

ҚАРАҒАНДЫ
УНИВЕРСИТЕТІНІҢ
ХАБАРШЫСЫ

ВЕСТНИК

КАРАГАНДИНСКОГО
УНИВЕРСИТЕТА

ISSN 0142-0843

ФИЗИКА сериясы
№ 2(62)/2011
Серия ФИЗИКА

Сәуір–мамыр–маусым
1996 жылдан бастап шығады
Жылына 4 рет шығады

Апрель–май–июнь
Издается с 1996 года
Выходит 4 раза в год

Собственник РГКП **Карагандинский государственный университет
имени Е.А.Букетова**

Бас редакторы — Главный редактор

Е.К.КУБЕЕВ,

академик МАН ВШ, д-р юрид. наук, профессор

Зам. главного редактора

Х.Б.Омаров, д-р техн. наук

Ответственный секретарь

Г.Ю.Аманбаева, д-р филол. наук

Серияның редакция алқасы — Редакционная коллегия серии

Т.А.Кокетайтеги,

К.К.Кусайынов,

Н.Х.Ибраев,

К.М.Арынгазин,

И.В.Брейдо,

Л.М.Ким,

С.Д.Джуманов,

М.М.Кидибаев,

З.Ж.Жанабаев,

Г.В.Климушева,

С.А.Кумеков,

В.М.Лисицын,

И.А.Огородников,

Г.И.Пилипенко,

С.В.Плотников,

Л.А.Пунг,

М.П.Тонконогов,

А.Ж.Турмухамбетов,

К.Ш.Шункеев,

Л.В.Чиркова,

редактор д-р физ.-мат. наук;

д-р техн. наук;

д-р физ.-мат. наук;

д-р пед. наук;

д-р техн. наук;

д-р физ.-мат. наук

д-р физ.-мат. наук (Узбекистан);

д-р физ.-мат. наук (Кыргызстан);

д-р физ.-мат. наук;

д-р физ.-мат. наук (Украина);

д-р физ.-мат. наук;

д-р физ.-мат. наук (Россия);

д-р физ.-мат. наук (Россия);

д-р физ.-мат. наук (Россия);

д-р физ.-мат. наук;

д-р физ.-мат. наук (Эстония);

д-р техн. наук;

д-р физ.-мат. наук;

д-р физ.-мат. наук;

ответственный секретарь

канд. техн. наук, доцент

Редакторы *Ж.Т.Нұрмұханова*

Редактор *И.Д.Рожнова*

Техн. редактор *Д.Н.Муртазина*

Издательство Карагандинского
государственного университета
им. Е.А.Букетова

100012, г. Караганда,

ул. Гоголя, 38,

тел., факс: (7212) 51-38-20

e-mail: izd_kargu@mail.ru

Басуға 21.06.2011 ж. қол қойылды.

Пішімі 60×84 1/8.

Офсеттік қағазы.

Көлемі 10,37 б.т.

Таралымы 300 дана.

Бағасы келісім бойынша.

Тапсырыс № 616.

Подписано в печать 21.06.2011 г.

Формат 60×84 1/8.

Бумага офсетная.

Объем 10,37 п.л. Тираж 300 экз.

Цена договорная. Заказ № 616.

Отпечатано в типографии
издательства КарГУ
им. Е.А.Букетова

Адрес редакции: 100028, г. Караганда, ул. Университетская, 28

Тел.: (7212) 77-03-69 (внутр. 1026); факс: (7212) 77-03-84.

E-mail: vestnick_kargu@ksu.kz. Сайт: <http://www.ksu.kz>

© Карагандинский государственный университет, 2011

Зарегистрирован Министерством культуры, информации и общественного согласия Республики Казахстан.

Регистрационное свидетельство № 1131–Ж от 10.03.2000 г.

МАЗМҰНЫ

КОНДЕНСАЦИЯЛАНҒАН КҮЙДІҢ ФИЗИКАСЫ

<i>Архипов В.В., Колт М.В., Кудусов А.С.</i> Бернулли сұлбасы және біртекті Дирак теңдеуі	3
<i>Базанов А.В., Падохин В.А.</i> Металл тұзы ерітінділері бетінен жоғары қарқынмен бұлану үрдісін математикалық баяндау	9
<i>Диқанбаев К.К.</i> Модификацияланған электролитте алынған кеуек кремнийдің оптоэлектрондық қасиеттерінің кейбір ерекшеліктері ...	15
<i>Жантөрина Н.Н., Шункеев К.Ш.</i> КВг кристалындағы экситон-фонондық әсерлесуге температура мен деформацияның әсері туралы	20
<i>Карстина С.Г.</i> Молекулярлық құрылымның тұрақтылығын зерттеу кезіндегі компьютерлік моделдеу әдістерін қолдану	25
<i>Көкетаев А.</i> Кездейсоқ сандар тізбегінің локальді максимумдары арасындағы қашықтықтар ықтималдылығының таралуы	31
<i>Сәлкеева А.К., Көкетайтегі Т.Ә., Ким Л.М., Балтабеков А.С., Тагаева Б.С.</i> Жерде сирек кездесетін элементтердің иондарымен активтендірілген сілтілі металдар сульфаттарының фотолюминесценциясы	38
<i>Юров В.М., Вертягина Е.Н., Гученко С.А.</i> Иондық сәулелендірудің композиттік жамылғының құрылымына және қасиеттеріне әсері ..	44
<i>Юров В.М.</i> Беттік керілу және люминофорлардың қасиеті	55

АСПАПТАР ЖӘНЕ ЭКСПЕРИМЕНТ ТЕХНИКАЛАРЫ

<i>Сәулебеков А.О., Венос Д., Трубицын А.А., Камбарова Ж.Т.</i> Екікаскадты цилиндрлік айна типті электрондық спектрометрдің аппараттық функциясын есептеу	62
--	----

ФИЗИКАНЫҢ ӘДІСТЕМЕСІ

<i>Арынгазин К.М., Васильева И.Ф.</i> Теориялық физикадағы геометриялық идеялардың қазіргі заманғы әдістері	67
<i>Ильина Л.Ф., Тәжібаева Д.К.</i> Электромагниттік индукция құбылысын зерттегенде және жалпы физика курсына Максвелл теориясының элементтерін практикалық қолдануда интерактивтік технологияларды қолдану	74
АВТОРЛАР ТУРАЛЫ МӘЛІМЕТТЕР	82

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

<i>Архипов В.В., Колт М.В., Кудусов А.С.</i> Схема Бернулли и одномерное уравнение Дирака	3
<i>Базанов А.В., Падохин В.А.</i> Математическое описание высокоинтенсивного процесса испарения с поверхности растворов солей металлов	9
<i>Диқанбаев К.К.</i> Некоторые особенности оптоэлектронных свойств пористого кремния, полученного в модифицированном электролите	15
<i>Жантүрина Н.Н., Шункеев К.Ш.</i> О влиянии температуры и деформации на экситон-фононное взаимодействие в кристалле КВг	20
<i>Карстина С.Г.</i> Применение методов компьютерного моделирования при исследовании устойчивости молекулярных структур	25
<i>Kuketayev A.</i> Probability distribution of distances between local extrema of random number series ..	31
<i>Сәлкеева А.К., Көкетайтегі Т.А., Ким Л.М., Балтабеков А.С., Тагаева Б.С.</i> Фотолюминесценция сульфатов щелочных металлов, активированных ионами редкоземельных элементов	38
<i>Юров В.М., Вертягина Е.Н., Гученко С.А.</i> Влияние ионного облучения на структуру и свойства композиционных покрытий	44
<i>Юров В.М.</i> Поверхностное натяжение и свойства люминофоров	55

ПРИБОРЫ И ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

<i>Саулебеков А.О., Венос Д., Трубицын А.А., Камбарова Ж.Т.</i> Расчет аппаратной функции электронного спектрометра типа двухкаскадного цилиндрического зеркала	62
---	----

МЕТОДИКА ФИЗИКИ

<i>Арынгазин К.М., Васильева И.Ф.</i> Современные методы геометрических идей в теоретической физике	67
<i>Ильина Л.Ф., Тәжібаева Д.К.</i> Использование интерактивных технологий в процессе изучения явления электромагнитной индукции и практического применения элементов теории Максвелла в курсе общей физики	74
СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ	82

КОНДЕНСАЦИЯ ЛАНҒАН КҮЙДІҢ ФИЗИКАСЫ ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 530.21

В.В.Архипов, М.В.Колт, А.С.Кудусов

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова (E-mail: midav_73@mail.ru)

Схема Бернулли и одномерное уравнение Дирака

В работе рассмотрено соотношение одномерного уравнения Дирака с классическим телеграфным уравнением. Исследована идея о том, что обобщение классической схемы Бернулли может привести к учету квантовых эффектов. Целью работы являлось исследование предположения о том, что квантовые свойства могут быть учтены включением возможности обратного во времени движения точки на шахматной доске Фейнмана. Для проверки этой гипотезы построена система вероятностных уравнений. Показано, что указанное предположение приводит к уравнениям, эквивалентным классическому телеграфному уравнению.

Ключевые слова: уравнение Дирака, схема Бернулли, телеграфное уравнение, квантовые свойства, вероятностные уравнения, обратное во времени движение точки.

1 Введение

В настоящей работе мы рассмотрим соотношение одномерного уравнения Дирака с классическим телеграфным уравнением, получаемым с использованием схемы Бернулли [1]. Это сопоставление впервые предложено Р.Фейнманом [2] для наглядного пояснения понятия спина и иллюстрации его метода функционального интеграла по траекториям. Позднее эта модель получила название шахматной доски Фейнмана, и она не раз использовалась для различного рода обобщений. В частности, в работе [3] предложен оригинальный метод её обобщения для вероятностной трактовки волновых функций Дирака.

1.1 Одномерное уравнение Дирака

В одномерном случае уравнение Дирака для свободной частицы с полуцелым спином может быть записано в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left(-i\hbar c \sigma_1 \frac{\partial}{\partial x} + m_0 c^2 \sigma_0 \right) \Psi, \quad (1)$$

где $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$ — двухкомпонентная функция, учитывающая два возможных состояния — «частица» и «античастица». Речь о собственно проекции спина не идет ввиду отсутствия самого понятия момента импульса в одномерном случае. Плотность вероятности определяется стандартным образом как $\Psi^+ \Psi$:

$$P(x, t) = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2.$$

Используемые в (1) матрицы $\sigma_{0,1}$ должны отвечать требованиям

$$\sigma_0^2 = \sigma_1^2 = 1, \quad \sigma_0 \sigma_1 + \sigma_1 \sigma_0 = 0, \quad (2)$$

т.е. можно взять какие-либо матрицы Паули, например:

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

В явном виде система уравнений (1) имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1 &= -\frac{\partial}{\partial x} \Psi_2 - \frac{im_0c}{\hbar} \Psi_1, \\ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Psi_2 &= -\frac{\partial}{\partial x} \Psi_1 + \frac{im_0c}{\hbar} \Psi_2. \end{aligned}$$

1.2 Телеграфное уравнение и схема Бернулли

Рассмотрим блуждание точки по шахматной доске Фейнмана (рис. 1). Предположим, что частица обладает направлением движения влево относительно оси Ox или вправо. Положительное направление вдоль оси Oy фиксированно. Делая шаг, точка смещается вверх на величину $\varepsilon_y = \varepsilon/\sqrt{2}$, где ε — размер ячейки. Если направление движения не меняется, то точка смещается также влево или вправо на величину ε_x , также равную $\varepsilon/\sqrt{2}$. Если направление меняется, то координата x остается прежней.

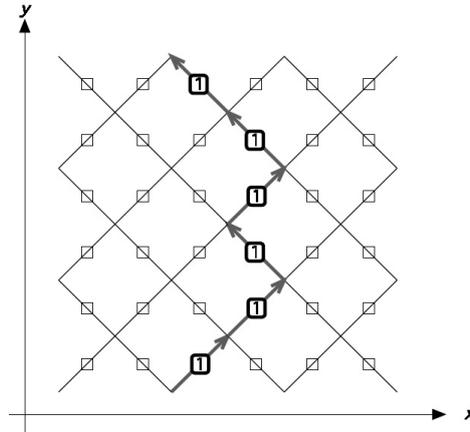


Рисунок 1. С каждым шагом вдоль оси Oy точка смещается влево или вправо. Цифра 1 есть значение переменной Бернулли для данного состояния. Ее значение в остальных квадратах равно нулю (рис. взят из статьи [3])

Пусть m — число такое, что $m\varepsilon$ есть вероятность для точки изменить свое направление. Для простоты будем предполагать, что этот параметр постоянен для всего пространства. Таким образом, исходя из элементарных законов сложения и умножения вероятностей, можно составить следующую пару уравнений:

$$\begin{aligned} u_+(x, y + \varepsilon_y) &= (1 - m\varepsilon)u_+(x - \varepsilon_x, y) + m\varepsilon u_-(x, y), \\ u_-(x - \varepsilon_x, y + \varepsilon_y) &= (1 - m\varepsilon)u_-(x - \varepsilon_x, y + \varepsilon_y) + m\varepsilon u_+(x - \varepsilon_x, y). \end{aligned} \tag{3}$$

Раскладывая функции u_{\pm} в ряд по ε с точностью до членов первого порядка, получим пару линейных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_+}{\partial y} + \frac{\partial u_+}{\partial x} &= -\sqrt{2}m u_+ + \sqrt{2}m u_-, \\ \frac{\partial u_-}{\partial y} - \frac{\partial u_-}{\partial x} &= -\sqrt{2}m u_- + \sqrt{2}m u_+. \end{aligned}$$

Сделаем замену

$$u_+ = e^{-\sqrt{2}my} U_+, \quad u_- = e^{-\sqrt{2}my} U_-, \tag{4}$$

получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_+}{\partial y} &= -\frac{\partial U_+}{\partial x} + \sqrt{2}m U_-, \\ \frac{\partial U_-}{\partial y} &= \frac{\partial U_-}{\partial x} + \sqrt{2}m U_+. \end{aligned} \tag{5}$$

Объединяя функции U_{\pm} в двухкомпонентный вектор и используя матрицы Паули вместо системы (5), можем записать

$$\frac{\partial U}{\partial y} = -\sigma_z \frac{\partial U}{\partial x} + \sqrt{2}m\sigma_x U. \quad (6)$$

Мы получили так называемое телеграфное уравнение [3]. Нетрудно видеть, что это выражение соответствует одномерному уравнению Дирака (1), если положить $y = ct$ и соответственным образом подобрать коэффициент m :

$$m = -\frac{im_0c}{\sqrt{2}\hbar}. \quad (7)$$

Выбор матриц Паули принципиальной роли в выводе не играет, достаточно выполнения свойств (2). Отметим, что приведенный вывод уравнения (6) соответствует так называемой схеме Бернулли, а именно: каждое последующее относительно исходного событие характеризуется переменной Бернулли, принимающей значение 0 или 1.

2 Вероятностная трактовка уравнения Дирака

На самом деле, наличие мнимой единицы i в (7) приводит к затруднению в соотношении уравнения Дирака со схемой Бернулли. Действительно, это подразумевает мнимость вероятности изменения направления движения $m\varepsilon$.

2.1 Обобщенные переменные Бернулли

В статье [3] сделано предположение, что эту трудность можно разрешить возможностью движения частицы против оси Oy . Для уравнения Дирака такое движение соответствует движению против направления времени. Общепринятая трактовка таких частиц, как «античастица» решает этот парадокс и хорошо согласуется с современными физическими представлениями. Учитывать возможное обратное движение в схеме Бернулли предлагается с использованием так называемых «анти-Бернулли» переменных, принимающих значение 0, +1, -1 (рис. 2). Причем отрицательное значение как раз соответствует движению против оси Oy .

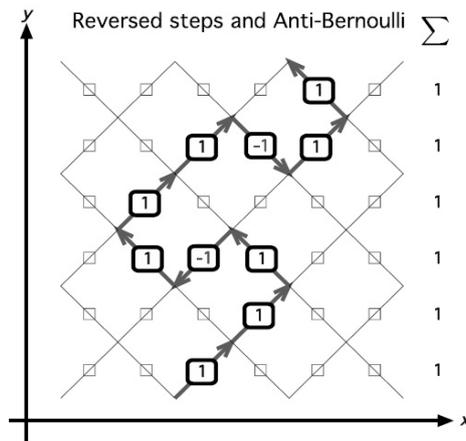


Рисунок 2. Теперь точка может двигаться как вдоль оси Oy , так и против. Обратному движению сопоставляется отрицательное значение «анти-Бернулли» переменной (рис. взят из статьи [3])

Исходя из приведенных соображений Орд (Ord G.N.) [3], приходим к следующей паре уравнений:

$$\begin{aligned} \varphi_+(x, y + \varepsilon_y) &= (1 - m\varepsilon)\varphi_+(x - \varepsilon_x, y) - m\varepsilon\varphi_-(x, y), \\ \varphi_-(x - \varepsilon_x, y + \varepsilon_y) &= (1 - m\varepsilon)\varphi_+(x - \varepsilon_x, y + \varepsilon_y) + m\varepsilon\varphi_+(x - \varepsilon_x, y), \end{aligned}$$

где знак « \leftarrow » перед последним слагаемым первого уравнения как раз обусловлен обратным ходом частицы. После разложения в ряд по ε получим систему линейных дифференциальных уравнений, аналогичных (8):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_+}{\partial y} &= -\frac{\partial \varphi_+}{\partial x} - \sqrt{2m}\varphi_+ - \sqrt{2m}\varphi_-, \\ \frac{\partial \varphi_-}{\partial y} &= \frac{\partial \varphi_-}{\partial x} - \sqrt{2m}\varphi_- - \sqrt{2m}\varphi_+. \end{aligned} \tag{8}$$

Замена

$$\varphi_{\pm} = e^{-\sqrt{2m}y} \psi$$

упрощает последнюю систему:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_+}{\partial y} &= -\frac{\partial \psi_+}{\partial x} + \frac{m}{k} \psi_-, \\ \frac{\partial \psi_-}{\partial y} &= \frac{\partial \psi_-}{\partial x} + \frac{m}{k} \psi_+. \end{aligned}$$

Вводя бивектор Ψ , получаем уравнение, аналогичное (6):

$$\frac{\partial \Psi}{\partial y} = -\sigma_z \frac{\partial \Psi}{\partial x} - i \frac{m}{k} \sigma_y \Psi,$$

которое отличается наличием мнимой единицы i в последнем слагаемом, что, как было отмечено чуть выше, решает проблему согласования схемы Бернулли с уравнением Дирака.

Однако, на наш взгляд, приведенное в статье [3] обоснование исходной системы уравнений (8) является недостаточным или плохо сформулированным. Для проверки выдвинутой идеи о том, что включение возможности обратного во времени движения точки может привести к полному соответствию уравнению Дирака, мы предлагаем альтернативный подход, основанный на непосредственном составлении соответствующих вероятностных уравнений.

2.2 Альтернативный подход

Введём вероятность изменения направления движения вдоль оси Oy как $n\varepsilon$, где n — положительное число, аналогичное m для оси Ox . Кроме того, введем дополнительно вероятности состояний, направленных против оси Oy . Будем обозначать их как $\tilde{\varphi}$.

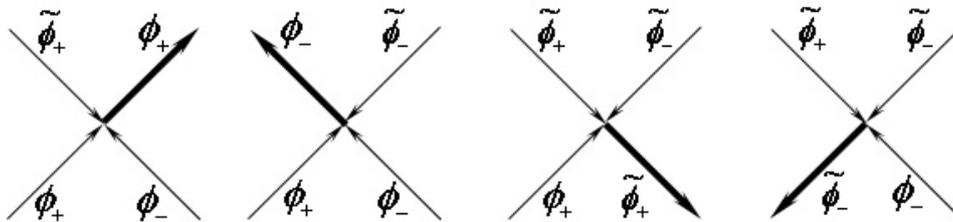


Рисунок 3. Результирующие состояния, справа налево: φ_+ , φ_- , $\tilde{\varphi}_+$, $\tilde{\varphi}_-$

На рисунке 3 показаны соотношения различных состояний. Конечные или результирующие состояния помечены жирными стрелками. В каждом случае левую нижнюю стрелку будем считать имеющей координаты (x, y) . Состояние φ_+ может явиться результатом того, что (см. правую картинку рис. 3): частица находилась в состоянии φ_+ и не изменила своего направления ни влево (вероятность этого $(1 - m\varepsilon)$), ни вниз (вероятность этого $(1 - n\varepsilon)$); частица находилась в состоянии φ_- , изменила свое направление вправо (вероятность этого $m\varepsilon$), продолжила движение вверх (вероятность этого $(1 - n\varepsilon)$); частица находилась в состоянии $\tilde{\varphi}_+$ и не изменила своего направления вправо (вероятность этого $(1 - m\varepsilon)$), но переключилась на движение вверх (вероятность этого $n\varepsilon$).

Аналогичным образом можно рассмотреть и остальные результирующие состояния. Теперь можно составить систему вероятностных уравнений по аналогии с (3):

$$\begin{aligned} \varphi_+(x, y + \varepsilon_y) &= \varphi_-(x, y)m\varepsilon(1 - n\varepsilon) + \varphi_+(x - \varepsilon_x, y)(1 - m\varepsilon)(1 - n\varepsilon) + \tilde{\varphi}_+(x - \varepsilon_x, y + \varepsilon_y)(1 - m\varepsilon)n\varepsilon, \\ \varphi_-(x - \varepsilon_x, y + \varepsilon_y) &= \tilde{\varphi}_-(x, y + \varepsilon_y)(1 - m\varepsilon)n\varepsilon + \varphi_-(x, y)(1 - m\varepsilon)(1 - n\varepsilon) + \varphi_+(x - \varepsilon_x, y)m\varepsilon(1 - n\varepsilon), \\ \tilde{\varphi}_+(x, y) &= \tilde{\varphi}_-(x, y + \varepsilon_y)m\varepsilon(1 - n\varepsilon) + \varphi_+(x - \varepsilon_x, y)(1 - m\varepsilon)n\varepsilon + \tilde{\varphi}_+(x - \varepsilon_x, y + \varepsilon_y)(1 - m\varepsilon)(1 - n\varepsilon), \\ \tilde{\varphi}_-(x - \varepsilon_x, y) &= \tilde{\varphi}_-(x, y + \varepsilon_y)(1 - m\varepsilon)(1 + n\varepsilon) + \varphi_-(x, y)(1 - m\varepsilon)n\varepsilon + \tilde{\varphi}_+(x - \varepsilon_x, y - \varepsilon_y)(1 - n\varepsilon)m\varepsilon. \end{aligned}$$

Раскладывая их в ряд по ε , получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_+}{\partial y} &= -\frac{\partial \varphi_+}{\partial x} + \sqrt{2}m\varphi_- - \sqrt{2}m\varphi_+ - \sqrt{2}n\varphi_+ + \sqrt{2}n\tilde{\varphi}_+, \\ \frac{\partial \varphi_-}{\partial y} &= \frac{\partial \varphi_+}{\partial x} + \sqrt{2}n\tilde{\varphi}_- - \sqrt{2}m\varphi_- - \sqrt{2}n\varphi_- + \sqrt{2}m\varphi_+, \\ \frac{\partial \tilde{\varphi}_+}{\partial y} &= \frac{\partial \tilde{\varphi}_+}{\partial x} - \sqrt{2}m\tilde{\varphi}_- - \sqrt{2}n\varphi_+ + \sqrt{2}m\tilde{\varphi}_+ + \sqrt{2}n\varphi_+, \\ \frac{\partial \tilde{\varphi}_-}{\partial y} &= -\frac{\partial \tilde{\varphi}_-}{\partial x} + \sqrt{2}n\tilde{\varphi}_- + \sqrt{2}m\tilde{\varphi}_- - \sqrt{2}n\varphi_+ + \sqrt{2}n\tilde{\varphi}_+. \end{aligned}$$

Сделаем замену, которая является обобщением замены (4):

$$\Phi = \exp\{\sqrt{2}n\alpha_3 x - \sqrt{2}m\beta y\}\Psi,$$

где

$$\Phi = \begin{pmatrix} \varphi_+ \\ \varphi_- \\ \tilde{\varphi}_+ \\ \tilde{\varphi}_- \end{pmatrix}, \quad \Psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \\ \tilde{\psi}_+ \\ \tilde{\psi}_- \end{pmatrix}$$

— четырехкомпонентные функции и

$$\alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

— матрицы Дирака. Нетрудно показать, что такая замена приводит к упрощению исходной системы и разбиению ее на две независимые части — для «частиц» и «античастиц»:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_+}{\partial y} &= -\frac{\partial \psi_+}{\partial x} + \sqrt{2}m\psi_- - \sqrt{2}n\psi_+, \\ \frac{\partial \psi_-}{\partial y} &= \frac{\partial \psi_-}{\partial x} + \sqrt{2}m\psi_+ - \sqrt{2}n\psi_-, \\ \frac{\partial \tilde{\psi}_+}{\partial y} &= \frac{\partial \tilde{\psi}_+}{\partial x} - \sqrt{2}m\tilde{\psi}_- + \sqrt{2}n\tilde{\psi}_+, \\ \frac{\partial \tilde{\psi}_-}{\partial y} &= -\frac{\partial \tilde{\psi}_-}{\partial x} - \sqrt{2}m\tilde{\psi}_+ + \sqrt{2}n\tilde{\psi}_-. \end{aligned}$$

Отметим, что каждая пара по отдельности эквивалентна системе уравнений (3).

Таким образом, включение возможности для частицы обратного во времени движения, в рамках рассмотренной здесь схемы Бернулли, приводит к уравнениям, эквивалентным телеграфному уравнению, полученному вначале. То есть выводы, сделанные в статье [3] относительно способа обобщить уравнения классической статистики на квантовый случай, являются недостаточно обоснованными.

References

- 1 *Kac M.* A stochastic model related to the telegrapher's equation // *Rocky Mountain Journal of Mathematics.*— 1974. — Vol. 4. — P. 497–509.
- 2 *Feynman R.P.* Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics // *Rev. Mod. Physics.* — 1948. — Vol. 20. — P. 367–387.
- 3 *Ord G.N.* Quantum mechanics in a two-dimensional spacetime: What is wavefunction? // *Annals of Physics.* — 2009. — Vol. 324. — P. 1211–1218.

В.В.Архипов, М.В.Колт, А.С.Кудусов

Бернулли сұлбасы және біртекті Дирак теңдеуі

Мақалада біртекті Дирак теңдеуінің классикалық телеграф теңдеуіне қатысы қарастырылған. Бернуллидің классикалық сұлбасын жалпылау кванттық эффектінің есепке алу идеясына әкелетіндігі зерттелген. Кванттық қасиеттер Фейнман шахмат тақтасындағы нүктенің кері қозғалыс уақытының мүмкіндіктерін енгізгенде есепке алынуы мүмкін. Бұл болжамды тексеру үшін ықтималдылық теңдеулер жүйесін құру керек, өз кезегінде ол эквиваленттік классикалық телеграф теңдеуіне әкелетіндігі көрсетілген.

V.V.Arhipov, M.V.Kolt, A.S.Kudusov

Bernoulli scheme and one-dimensional Dirac equation

The correlation between one-dimensional Dirac equation and classical telegraph equation is researched in this work. There is investigated the idea that the Bernoulli scheme generalization can cover quantum effects. More exactly, a purpose of the work is an investigation of the assumption that quantum properties can be taken account by the possibility of the time-reversed particle moving on the Feynman chessboard. For checking of this hypothesis a system of probabilistic equations is reduced. It is shown that the indicated assumption leads to equations which are equivalent to the classical telegraph equation.

А.В.Базанов, В.А.Падохин

Институт химии растворов РАН, Иваново, Россия (E-mail: bazanov@hotmail.ru)

Математическое описание высокоинтенсивного процесса испарения с поверхности растворов солей металлов

В работе рассмотрены вопросы математического описания испарения в выпарной установке жидких веществ под влиянием различных факторов теплоподвода. Проведен анализ сложной взаимосвязи процессов теплопереноса на поверхности раздела фаз, в парогазовой среде с природой растворенного вещества, структурой и свойствами системы растворитель-соль металла. На основе общих представлений о структуре турбулентности как системе турбулентных вихрей обсуждены соотношения для оценочной зависимости $Nu(\varepsilon)$. Выведены уравнения для скорости испарения и накопления растворенного вещества в дистилляте и для ряда характерных случаев испарения растворов в ограниченном объеме выпарной установки. Получена замкнутая система критериальных уравнений для St и Nu , описывающая их связь с ε и параметрами испарения.

Ключевые слова: математическое описание, испарения, растворенное вещество, теплоподвод, выпарная установка, теплоперенос.

В данном исследовании нами были рассмотрены вопросы испарения в выпарной установке жидких веществ под влиянием различных факторов теплоподвода и турбулизации паровой среды. Постановка указанной задачи актуальна в связи с проблемами выявления определяющих факторов, влияющих на качество дистиллята, получаемого при температурах испарения ≤ 98 °С.

Одной из характерных особенностей испарения растворов в выпарной установке является сложная взаимосвязь процессов теплопереноса на поверхности раздела фаз, в парогазовой среде с природой растворенного вещества, структурой и свойствами системы растворитель-соль металла. Турбулизация потока пара позволяет интенсифицировать испарение с поверхности выпариваемого раствора и унос парогазовой среды. При этом между процессами пароотвода и испарения возникает обратная связь, обуславливающая в ряде случаев возможность выбора оптимального режима работы выпарной установки.

Учесть влияние турбулентности в объеме выпарной установки значительно труднее, чем в открытой системе. Это связано с тем, что система пароотвода и внутренняя геометрия выпарной установки, как правило, сложны и многообразны, и поэтому формируемые под их воздействием потоки пара не соответствуют какой-либо стандартной схеме движения по типу атмосферного пограничного слоя, свободной конвекции или течения в канале, для которых тепло- и массообмен описываются на основе известных критериальных уравнений для чисел Стентона (St) или Нуссельта (Nu) в турбулентном потоке. По этой причине одним из возможных достаточно общих (хотя и существенно менее детализированным) способов описания подобных структур является задание среднего уровня турбулентных пульсаций, характеризуемого скоростью диссипации турбулентной энергии в единице объема ε , кг/(м·с³).

Критериальные уравнения для St и Nu , описывающие их связь с ε и параметрами испарения, в настоящее время отсутствуют. Имеющиеся результаты исследования для паровых объемов выпарных установок ограничены упомянутым выше кругом стандартных задач тепло- и массообмена: исследование тепловой конвекции при заданном тепловом напоре ΔT или конвективного переноса в турбулентном потоке, движущемся со скоростью u над поверхностью испарения. В большинстве рассмотренных работ при оценке скорости испарения не учитывают многообразия механизмов нагрева испаряющей жидкости, ограничиваясь единственным фактором теплоподвода через поверхность нагрева.

Предлагаемое исследование состояло из двух частей: в первой на основе общих представлений о структуре турбулентности как системе турбулентных вихрей обсуждаются соотношения для оценочной зависимости $Nu(\varepsilon)$, во второй — выводятся уравнения для скорости испарения и накопления растворенного вещества в дистилляте и для ряда характерных случаев испарения растворов в ограниченном объеме выпарной установки.

Оценка коэффициентов тепло- и массопереноса в выпарной установке. Паровая среда в выпарной установке, даже при небольших случайных или систематических движениях пара вследствие

его значительных характерных размеров, усредненную оценку которых представим как $h \approx V^{1/3}$, где V — объем выпарной установки, практически всегда находится в турбулентном состоянии. Ввиду отсутствия выделенного направления паровых потоков и нечетко определенной внутренней геометрической структуры выпарной установки турбулентные пульсации можно считать равномерными по всем направлениям, т.е. турбулентность в выпарной установке приближается к изотропной, единственной характеристикой интенсивности которой является параметр ε [3].

При заданном ε нетрудно получить оценку интенсивности турбулентного тепло- и массопереноса. Минимальный масштаб турбулентных пульсаций δ_v , согласно каскадной модели дробления вихря равен $(\rho v^3/\varepsilon)^{1/4}$, где ρ — плотность среды, кг/м³; v — молекулярная кинематическая вязкость м²/с. Общую размерную оценку для числа Нуссельта через толщину турбулентного диффузионного подслоя, в котором сосредоточено основное сопротивление процессу переноса, можно записать в следующем виде:

$$Nu = J_D h / (\rho C_p D \Delta T) \approx h / \delta_D, \quad (1)$$

где J_D — тепловой поток на стенку; C_p — теплоемкость, кДж/(кг·К); D — коэффициент молекулярной диффузии, м²/с; ΔT — разность температур в потоке и на стенке.

Параметр δ_D связан с δ_v зависимостью $\delta_D \approx \delta_v Pr^{-\alpha}$ [4], где $Pr = \nu/D$ — число Прандтля, α — некоторая константа, значение которой в нашем случае несущественно, поскольку для газов $\nu \approx D$.

Соотношение (1) определяет функцию $Nu(\varepsilon)$ с точностью до произвольного численного множителя, величину которого необходимо знать при проведении расчетов. Для его оценки, учитывая универсальный характер указанного соотношения, используем известные критериальные уравнения для Nu , описывающие тепло- и массообмен в трубах (формула Шервуда-Джиларда) [5]:

$$Nu_T = 0,023 Re^{0,83} Pr^{0,5} \quad (2)$$

и теплообмен при свободной конвекции (формула Саундерса) [6]:

$$Nu_K = 0,17 Ra^{1/3} Pr^{0,5}, \quad (3)$$

где $Re = uh/\nu$ — число Рейнольдса; h — диаметр трубы; $Ra = (g\beta\Delta T h^3/\nu a)$ — число Релея; g — ускорение свободного падения; β — коэффициент теплового расширения (для идеального газа, в приближении которого рассматривается паровая среда выпарной установки, $\beta = 1/T$); a — коэффициент температуропроводности, м²/с.

При одной и той же интенсивности турбулентности характеристики турбулентного переноса не должны зависеть от типа турбулентного течения. Проверим этот принцип на примере формул (2) и (3), заменив на ε любой из независимых параметров, входящих в эти формулы. Удобнее заменить наиболее часто варьируемые в экспериментах параметры: u в первой формуле и ΔT — во второй.

Отметим, что, поскольку ε есть величина размерная, для оценки интенсивности турбулентности следует использовать не просто ε , а её некоторую безразмерную комбинацию с другими параметрами течения, например, отношение h/δ_v , логарифм которого пропорционален полному числу каскадных дроблений (бифуркации) вихря от максимального масштаба h до минимального масштаба вязкой диссипации турбулентной энергии. И только в том случае, если во всех рассматриваемых экспериментах h и ν одни и те же, в качестве меры интенсивности турбулентных пульсаций можно применять абсолютное значение ε .

Зависимость $\varepsilon(u)$ для течения в трубе получим, приравняв работу сил давления в единицу времени на участке длиной l к величине ε , умноженной на объем этого участка, откуда находим

$$\varepsilon = (1/2) C_f u^3 / h, \quad (4)$$

где $C_f = 8(\nu^*/u)^2$ — коэффициент трения; ν^* — динамическая скорость.

Для расчета C_f можно использовать универсальный закон сопротивления Прандтля или, что проще для оценок, формулу Блазиуса [7]:

$$C_f = 0,316 Re^{-1/4}. \quad (5)$$

Из выражений (4) и (5) находим число Re как функцию ε :

$$Re = 1,946 (\varepsilon h^4 / \nu^3)^{0,364}, \quad (6)$$

подставив в которое уравнение (2), получим одну из искомым зависимостей:

$$Nu_T = 0,04 (\varepsilon h^4 / \nu^3)^{0,302} Pr^{1/2}. \quad (7)$$

Взаимосвязь ε и ΔT для свободной конвекции не столь очевидна хотя бы потому, что если, например, не превзойден порог неустойчивости, то теплообмен будет происходить путем молекулярной диффузии тепла, без какого-либо движения жидкости, т.е. при $\varepsilon = 0$. Рассмотрим некоторые соображения,

основанные на идее контакта малых вихревых элементов (масштаба вязкой диссипации δ_V) с поверхностью нагрева. Полагаем, что контакт имеет место в течение времени τ_V — времени жизни вихря, или, иначе, времени пребывания его у границы нагрева. За это время вихрь объемом $\sim \delta_V^3$ получит количество теплоты $\sim J_D \delta_V^2 \tau_V$, где δ_V^2 — площадь контакта, и вследствие чего нагревается от температуры среды T до температуры стенки T_S . Составив уравнение теплового баланса, находим:

$$\Delta T = J_D \tau_V / (\rho C_p \delta_V). \quad (8)$$

Указанный нагретый элемент жидкости (или турбулентный вихрь) турбулентными пульсациями переносится к верхней охлажденной границе. Механизм его перемещения, слияния с другими вихрями и т.д. неизвестен. Но в соответствии с общими представлениями о турбулентном переносе можно однозначно утверждать, что процесс этот должен происходить без участия молекулярных сил, или, точнее, хотя они всегда присутствуют, их влиянием по сравнению с крупномасштабным турбулентным переносом можно пренебречь. Поэтому потенциальная энергия нагретого вихря, связанная с его тепловым расширением, $E_{POT} = g\beta\Delta T\delta_V^3 h$ может перейти только в энергию турбулентных пульсаций и затем уже диссипировать в тепло. В единицу времени происходит $1/\tau_V$ контактов, создающих запас энергии E_{POT}/τ_V , величину которой приравняем скорости её диссипации в объеме столбца высотой h и площадью δ_V^2 :

$$g\beta\Delta T\delta_V^3 h / \tau_V = \varepsilon\delta_V^2 h.$$

Подставив в это выражение ΔT из соотношения (8), получим:

$$\varepsilon = g\beta J_D / (\rho C_p). \quad (9)$$

В этой формуле J_D выполняет ту же функцию, что и касательное напряжение (в безразмерной форме C_f) в соотношении (4). Поэтому определяющая величину J_D эмпирическая корреляция (3) имеет двойной физический смысл. С одной стороны, она, как и соотношение (2), описывает турбулентный перенос инертной примеси (тепла), а с другой — подобно выражению (5) может рассматриваться как гидродинамический закон, характеризующий интенсивность турбулентных пульсаций. Выразив с учетом соотношений (1), (3) и (9) ΔT как функцию ε , параметр Ra и формулу (3) перепишем в виде

$$Ra = 3,78[\varepsilon h^4 / (a^2 \nu)]^{3/4}, \\ Nu_K = 0,265(\varepsilon h^4 / \nu^3)^{1/4} Pr^{1/2}. \quad (10)$$

Формулы (7) и (10) по-прежнему описывают теплоперенос соответственно в трубах и между пластинами при свободной конвекции, но теперь параметры u и ΔT выражены через единую характеристику турбулентности ε , и поэтому числа Нуссельта для обоих случаев можно сравнить между собой.

Результаты расчета Nu и некоторых других характеристик рассматриваемых течений для ряда значений ε и фиксированных величин остальных параметров ($h=6$ м, $\nu=a=1,5 \cdot 10^{-5}$ м²/с, $Pr=1$, $T=20$ °C) представлены в таблице.

Т а б л и ц а

Параметры турбулентного теплопереноса в трубах и при свободной конвекции

$\varepsilon/\rho, \text{ м}^2/\text{с}^3$	Течение в трубе			Свободная конвекция		
	$Re, 10^4$	$u, \text{ м/с}$	Nu	$Ra, 10^{10}$	$\Delta T, \text{ }^\circ\text{C}$	Nu
10^{-5}	7,4	0,185	253	1,04	0,33	360
10^{-4}	17,4	0,43	507	5,9	1,86	640
10^{-3}	40,2	0,99	1015	3,3	10,45	1138
10^{-2}	93	2,29	2040	1,85	58,7	2030

Из приведенной таблицы видно, что для всех ε числа Рейнольдса и Релея выше критических и, следовательно, находятся в области турбулентного режима, для которого справедливы корреляции (2) и (3). Все рассчитанные значения Nu довольно близки друг другу. Наибольшее расхождение, не превышающее 30 %, имеет место при $\varepsilon=10^{-5}$.

Таким образом, несмотря на исключительное различие механизмов формирования турбулентности, для течений в трубе и свободной конвекции при использовании универсального параметра ε (u и ΔT) для интервала значений ε , соответствующих практическим параметрам турбулентности в установках, результаты расчета Nu в обоих случаях будут примерно одни и те же.

Отсюда можно предположить, что формулы (7) или (10) применимы для описания тепло- и массопереноса в турбулентных системах любого типа. Поэтому в тех случаях, когда структура турбу-

лентности не подходит ни под один из хорошо изученных стандартов турбулентных движений, но параметр ε известен, для расчета Nu можно использовать любую из этих формул, различие в оценках по которым не превышает 30 %.

Уравнение теплового баланса. Поскольку в отличие от открытой системы пространство выпарной установки имеет ограниченный объем, уравнения баланса тепла и массы должны быть составлены для двух сред, содержащих растворенное вещество — жидкого слоя раствора и паровоздушной фазы над его поверхностью.

Теплоперенос в слое жидкого раствора. Физические основы процесса испарения слоя жидкости, за исключением солнечной радиации, те же, что и рассмотренные в работе [1] для случая испарения в атмосферу. Перечислим основные факторы теплоподвода к слою раствора и описывающие их соотношения.

Тепло паровой фазы Q_r (индексом r будем отмечать некоторые параметры паровой среды выпарной установки) и конденсирующихся водяных паров Q_v переносится турбулентными пульсациями в объеме установки. Эти потоки, полагая, что уровень турбулентности в установке известен, оценим на основе общей критериальной зависимости (1), используя для расчета Nu любую из формул — (7) или (10).

Теплота, принятая слоем жидкого раствора, расходуется на его испарение. Уравнение теплового баланса жидкой фазы запишем в виде

$$Q_r + Q_v = Q_p,$$

где Q_p — теплота фазового перехода раствора из жидкого состояния в парообразное.

Разделив Q_p на удельную теплоту испарения раствора r_p , получим массовую скорость испарения раствора E_p , кг/(м²/с), связанную с кинетическими параметрами воздушной среды соотношением, аналогичным формулам для Q_r и Q_v .

При больших скоростях испарения, близких к кипению, в выражениях для Q_r , Q_v и E_p к движущей силе процесса переноса необходимо ввести поправочный множитель, учитывающий влияние стефановского потока, как это было сделано в работе [1] для задачи испарения в открытых системах. В правой части формулы для E_p добавляется множитель:

$$K = [\rho_s / (Y_s - Y)] \ln[(\rho_s - Y) / (\rho_s - Y_s)],$$

где Y — массовая концентрация растворенного вещества в объеме пара (индекс P опущен для краткости записи формул); s — индекс поверхности испарения, а в формулах для Q_r и Q_v — произведение $(1 - Y/\rho_s) K$.

Поправка на стефановский поток позволяет осуществить плавный переход от кинетического режима испарения, находящегося под воздействием турбулентного переноса в паре, к режиму чистого кипения с $Y_s \approx \rho_s$ и $P_s \approx P_{амм}$, для которого влияние числа Нуссельта компенсируется логарифмической особенностью в множителе K .

Уравнение баланса тепла и массы для паровой среды. Приток растворенного вещества в объеме парового пространства осуществляется только от поверхности испарения, в то время как его сток происходит либо со вторичными парами через сепаратор, либо через неплотности выпарной установки при нагнетании давления. Уравнение баланса массы паров растворенного вещества с учетом нестационарности процесса его накопления в течение времени испарения жидкого слоя раствора и аналогичное уравнение для пара запишем в виде

$$\begin{aligned} VdY / dt &= G_{EVP} - G_{POUT}, \\ VdY_{II} / dt &= G_{IN} - G_{BOUT}, \end{aligned} \tag{11}$$

где $G_{EVP} = S_{EVP} E_p$ — массовый поток растворенного вещества с поверхности испарения, кг/с; n — индекс воздуха; G_{IN} — приток свежего раствора; G_{iOUT} — уходящий из выпарной установки поток i -го компонента паровой смеси ($i=P, II$), связанный с суммарным стоком паровой среды G_{OUT} соотношением

$$G_{iOUT} = (Y_i / \rho_r) G_{OUT}.$$

Второе уравнение системы (11) не является обязательным для расчета Y_{II} , так как концентрацию воздуха в паровой смеси можно выразить с помощью уравнения идеального газа через концентрацию растворенного вещества

$$xY + Y_B = \rho_B, \tag{12}$$

где $x = \mu_B / \mu_P$; μ — молекулярный вес; ρ_B — плотность чистого воздуха при $T = T_r$, но оно необходимо при выводе уравнения для T_r и выражения для G_{OUT} . Отметим, что из-за различия температур потоков и молекулярных весов компонентов смеси суммарный выходящий поток G_{OUT} не равен сумме входных потоков G_{EVP} и G_{IN} .

Тепловой баланс паровой среды отличается большим разнообразием влияющих на него факторов теплообмена, к числу которых относятся упоминавшийся выше конвективный поток тепла из пара к поверхности испарения Q_r (здесь умноженный на S_{EVP}), а также схожий с ним по механизму переноса тепловой поток через стенку выпарной установки Q_h , представимый в том же виде, что и Q_r , с заменой движущей силы $(T_s - T_r)$ на $(T_\infty - T_r)$, где ∞ — индекс пара, и площади испарения S_{EVP} на S_h — суммарную площадь стенок выпарной установки. Другие формы теплообмена связаны с переносом материальных частиц воздуха и растворенного вещества. Учет всех перечисленных факторов тепло- и массообмена приводит к следующему уравнению:

$$V \rho_r C_{Pr} dT_r / dt = G_{EVP} C_{PP} (T_s - T_r) + G_{IN} C_{PB} (T_\infty - T_r) + Q_h - Q_r.$$

Продифференцировав уравнение (12) по времени и заменив производные по t от величин Y , Y_B и T_r правыми частями соответствующих уравнений, для G_{OUT} получим выражение

$$G_{OUT} = G_{EVP} \left[\frac{C_{PP}}{C_{Pr}} \left(\frac{T_s}{T_r} - 1 \right) + \frac{\rho_r x}{\rho_B} \right] + G_{IN} \left[\frac{C_{PB}}{C_{Pr}} \left(\frac{T_\infty}{T_r} - 1 \right) + \frac{\rho_r}{\rho_B} \right] + \frac{Q_h - Q_r}{C_{Pr} T_r}. \quad (13)$$

Из этой формулы видно, что равенство $G_{OUT} = G_{EVP} + G_{IN}$ выполняется лишь для весьма частного случая испарения — при $T_s \approx T_r \approx T_\infty$, $x = 1$ и $Q_h \approx Q_r$. При большой же массе раствора отклонение от этого равенства может быть значительным.

Необходимую при расчетах оценку величины ε получим исходя из предположения, что механическая энергия вводимой струи раствора полностью переходит в энергию турбулентных пульсаций парожидкостной среды установки. Отсюда находим

$$\varepsilon = (1/2) \rho_\infty W^3 / (S_0^2 V),$$

где W — объемный расход раствора, $\text{м}^3/\text{с}$; S_0 — площадь входного сечения трубы.

В результате проведенного анализа нами была получена замкнутая система уравнений, описывающая процесс испарения жидкого слоя раствора в выпарной установке при заданных масштабах и различных условиях его протекания, характеризующих состояние паровой среды установки.

References

- 1 Vorotilin V.P., Gorbunin V.D. Mathematical model of liquid evaporation in atmosphere // *Chimicheskaya promyshlennost.* — 1992. — № 6. — P. 354.
- 2 Danilov G.N., Bogdanov S.M., Ivanov O.P. etc. Heat transfer devices of refrigerating machineries. — Leningrad: Mashynostroyeniye, 1986.
- 3 Landau L.D., Livshits E.M. Mechanics of continuous environments. — M.: Nauka, 1984.
- 4 Franc-Kamenetsky D.A. Heat transfer in chemical kinetics. — M.: Chemistry, 1967.
- 5 Shervod T., Picford P., Uilki I. Masstransfer. — M.: Chemistry, 1983.
- 6 Gerhard B., Jaluria I., Mahadjan P., Sammakija B. Free current convection, heat — and mass. — M.: Mir, 1991. — T. 2.
- 7 Slihting G. Theory of interface. — M.: Nauka, 1969.

А.В.Базанов, В.А.Падохин

Металл тұзы ерітінділері бетінен жоғары қарқынмен булану үрдісін математикалық баяндау

Мақалада буландырғыш құрылғы ішіндегі сұйық күйіндегі заттың әр түрлі жылу өткізгіш арналары арқылы булану үдерісі математика әдістері көмегімен талданған. Әр түрлі фазалардағы заттардың шекара беттері арқылы жылу тасымалдау құбылысының бу-газ ортасында ерітілген заттардың табиғаттарына, құрамдарына және қасиеттеріне тәуелділігі зерттелген. Турбуленттік құбылыстың жалпы қасиеттеріне сүйене отырып, $N(\varepsilon)$ функциясы шамасы жуықтап анықталған. Дисцилляцията ерітілген заттың булану және жиналу жылдамдықтарын сипаттайтын тендеу, сондай-ақ St және Nu шамаларын анықтайтын тендеу құрастырылған.

A.V.Bazanov, V.A.Padohin

**Mathematical description of high-intensity process of evaporation
from the surface of salt metals solutions**

In this research the questions of the mathematical description of evaporation in the evaporating plant liquids under the influence of the various factors heat addition are considered. The analysis of the complex interplay heat and mass transfer the processes at the interface in vapor-gas medium with the nature of the solute structure and the properties of the solvent-metal salt is conducted. On the basis of general ideas about the structure of turbulence as a system of turbulent eddies discussed the relation to the estimated dependence $Nu(\varepsilon)$. Equations for the velocity of evaporation and accumulation of dissolved substances in the distillate and for a number of typical cases of the evaporation solutions in a limited amount of evaporation plant are installed. A closed system of criteria equations for St and Nu describing the relationship with the parameters ε and evaporation is obtained.

К.К. Диханбаев

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы (E-mail: dkadyrjan@mail.ru)

Некоторые особенности оптоэлектронных свойств пористого кремния, полученного в модифицированном электролите

Исследовано влияние концентрации фтористоводородной кислоты на оптоэлектронные свойства пористого кремния, полученного электрохимическим анодированием в модифицированном электролите. Экспериментально показано, что с уменьшением концентрации HF в растворе с этоксиэтанолом, пик спектра фотолюминесценции смещается в коротковолновую область длины волн с увеличением интенсивности люминесценции вследствие квантово-размерного эффекта. Также наблюдался низкочастотный сдвиг Рамановского спектра образцов пористого кремния с увеличением концентрации HF, с минимальным размером нанокристаллитов 3,6 нм.

Ключевые слова: фтористоводородная кислота, модифицированный электролит, оптоэлектронные свойства, низкочастотный сдвиг, фотолюминесценция, пористый кремний, квантово-размерный эффект.

1. Введение

Для демонстрации нанокристаллической природы образцов пористого кремния используется фотолюминесценция (ФЛ) и микро-рамановский спектр, ставшие в данном случае стандартными характеристическими методами. Обычно принимается, что механизм квантового ограничения в нанокристаллитах увеличивает ширину запрещенной зоны и снимает требования, предъявляемые к переходам правилами отбора, тем самым порождая ФЛ в видимом диапазоне для нанокристаллитов размерами меньше 4,5 нм [1]. Тем не менее механизм квантового ограничения сам по себе не может объяснить влияния поверхностной обработки, состава электролита и окружающей среды. Считается, что локализованные поверхностные состояния или дефекты в оксидах влияют на ход кривой и максимум энергии ФЛ. Эти локализованные состояния, как результат атомной неупорядоченности, существуют на поверхности нанокристаллитов внутри запрещенной зоны.

Расчеты показали [2], что поверхностные состояния существуют в виде взаимосвязанных экситонов, которые присутствуют стабильно в меньших кристаллитах вследствие расширения ширины запрещенной зоны. Интересно, что присутствие даже одного единственного атома водорода полностью нарушает маленькие кремниевые кластеры. Кроме того, оказываются димеры, образующиеся на границе $Si-SiO_2$, дают более сильную локализацию по сравнению с водородной поверхностью ПК [3].

Таким образом, при комнатной температуре спектр фотолюминесценции образуется путем многократной рекомбинации, и поверхностные состояния играют очень важную роль. Количественно рекомбинационные процессы в этом случае можно описать двумя системами: во-первых, свободные носители рекомбинируют безызлучательно на поверхностных дефектах, а излучение света происходит при рекомбинации экситона [4].

Энергетический пик и форма кривой ФЛ у нанокристаллического кремния будут зависеть от способа обработки образца, от удельного сопротивления подложки, от типа проводимости, от окружающей среды и состава электролита. Мало исследованы влияние изменения состава электролита на оптоэлектронные свойства пористого кремния, в частности, на спектры фотолюминесценции, и спектры рамановского рассеяния. Кроме того, в работе сопоставлены экспериментальные исследования спектров фотолюминесценции с результатами рамановского рассеяния в пористом кремнии. В кристаллитах достаточно малого размера фононы описываются суперпозицией плоских волн, что приводит к нарушению правил отбора по волновому вектору. В результате происходит уширение линии рамановского рассеяния и сдвиг максимума, что указывает на нарушение кристаллической структуры.

2. Методика эксперимента

Пористый кремний получен методом электрохимического анодирования монокристаллического Si p-типа проводимости, с удельным сопротивлением 10 Ом·см и кристаллической ориентацией (100). В качестве катода был использован платиновый электрод. Пластины кремния, предварительно обработанные в водном растворе HF, были погружены в раствор $H_2SO_4:H_2O_2$ в соотношении 1:3 в течение 5 минут и тщательно промыты в деионизованной воде.

Модифицированный состав электролита, состоящий из различных соотношений HF и этоксиэтанола, после смешивания хранился в течение суток в тefлоновой посуде. После электрохимического травления образцы со слоем ПК тщательно промывались струей деионизованной воды и просушивались на воздухе. Последующая сушка производилась на установке центрифугирования с вакуумным прижимом со скоростью вращения 2500 об/мин в течение 1 минуты и под воздействием инфракрасной лампы в течение 5 минут. Для обеспечения надежного омического контакта и сохранения постоянной плотности тока анодизации на тыльную сторону пластины предварительно наносился сплошной алюминиевый контакт методом термического вакуумного осаждения.

Для измерения фотолюминесценции в качестве источника возбуждения использовался импульсный лазер ИЛГИ-503 на молекулярном азоте, работающий в квазинепрерывном режиме на длине волны 337 нм, при длительности импульса 10 нс, частоте повторения импульсов 50 Гц и мощности излучения 20 Вт. Измерение ФЛ проводилось при комнатной температуре на установке КСВУ-23 с фотоумножителем ФЭУ-28.

Были исследованы спектры комбинационного рассеяния пористого кремния (*por-Si*), снятые на установке Horiba HR800, при возбуждении с помощью аргонового лазера с длиной волны излучения 488 нм при комнатной температуре.

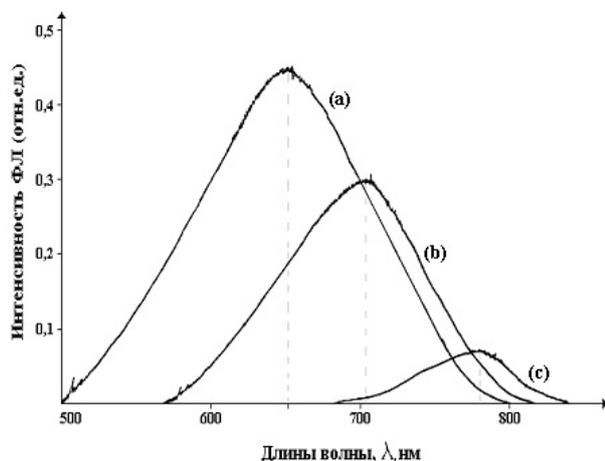
3. Влияние состава электролита на спектры фотолюминесценции

Состав электролита существенно влияет на распределение размеров кристаллитов и на смещение спектров ФЛ пористого кремния. С этой целью приготовлены три электролита с составами HF: этоксиэтанол в соотношениях: а) 1:1; б) 2:1; в) 3:1.

С уменьшением концентрации HF положение пика фотолюминесценции смещается в коротковолновую область. Допустим, пик ФЛ образцов, приготовленный в смеси HF: этоксиэтанол в соотношении 1:1, локализован при 650 нм, тогда как в смеси 2:1 и 3:1 пики фотолюминесценции обнаруживаются при 720 нм и 780 нм соответственно. Спектры ФЛ, измеренные в диапазоне длин волн от 500 до 850 нм, показаны на рисунке 1.

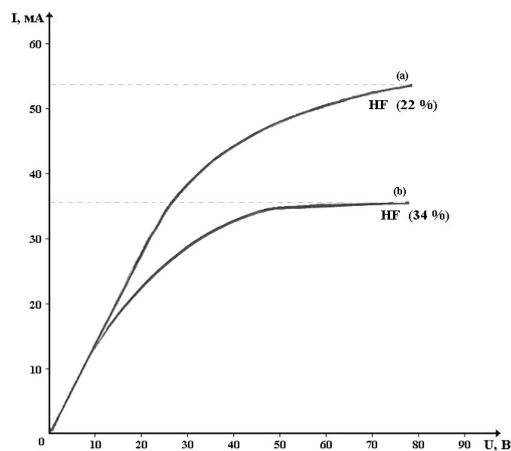
Из-за большой разветвленной поверхности пористого кремния и существующего огромного количества кислородных атомов в воздухе, вероятно, что кремниевые атомы поглощают атомы кислорода и с увеличением концентрации растворителя поверхность подвергается сильному окислению. В результате образцы, выдержанные на воздухе, характеризуются наличием большого количества Si-O связей. Высокая степень окисления поверхности приводит к заметному уменьшению размеров нанокристаллитов.

Следовательно, согласно модели квантового ограничения размер кремниевого нанокристаллита меньше в образцах, приготовленных с более низкой концентрацией HF.



HF:этоксиэтанол — а) 1:1; б) 2:1; в) 3:1

Рисунок 1. Спектры ФЛ от содержания фтороводорода в электролите состава HF:этоксиэтанол



а) 22 % HF; б) 34 % HF

Рисунок 2. I-U кривые электрохимического анодирования при различных содержаниях фтороводорода

Для того чтобы проверить данный результат, проведено измерение вольтамперной характеристики при непосредственной анодизации при различной концентрации HF. При формировании по-

ристого кремния ионы фтора играют важную роль в процессе приготовления пористого кремния. На рисунке 2 для р-типа материалов различной концентрации показаны I-U кривые для начальной стадии процесса приготовления образцов. При одном и том же напряжении проходит ток большей величины в образце с низкой концентрацией, чем с высокой.

В основном считают [5], что ионы фтора воздействуют на Si-Si связи и происходит травление кремния. Для пассивации поверхностных атомов кремния желательно, чтобы концентрация HF в электролите была выше и с большим количеством ионов фтора. В этом случае возрастает потенциальный барьер, который защищает поверхность кремния от дальнейшего воздействия ионов фтора, что приводит к уменьшению плотности тока. Поэтому, когда травление кремния в процессе получения пористого кремния происходит в растворе с высокой концентрацией HF, необходимо более высокое внешнее напряжение для преодоления потенциального барьера ионами фтора. Таким образом, увеличение концентрации HF в электролите приводит к ограничению плотности тока анодирования, следовательно, спектр фотолюминесценции с увеличением поперечных сечений образованных кристаллитов смещается в длинноволновую область.

4. Микроструктура рамановского рассеяния света в пористом кремнии

Исследование спектра рамановского рассеяния света в пористом кремнии является одним из наиболее перспективных методов, позволяющих выявить наличие структурных фаз в ПК и определить характерные размеры нанокристаллитов. Комбинационное рассеяние света кристаллического Si обычно представляет собой узкий пик при частоте 520 см^{-1} , указывающий на упорядоченность структуры ПК, а полуширина сигнала составляет $\sim 3 - 4 \text{ см}^{-1}$.

Для расчетов мы воспользовались уравнением Кардона, которое применимо к пористым структурам, с низкочастотным сдвигом пика — $\Delta\omega$:

$$d = 2\pi(B/\Delta\omega)^{1/2} / 10 \text{ (нм)},$$

где $B = 224 \text{ см}^{-1}$; $\Delta\omega$ — частота нижнего сдвига относительно линии комбинационного рассеяния для кристаллического кремния. С другой стороны, в работе [6] интенсивность рассеянного сигнала света для сферических кристаллитов рассчитывается следующим выражением:

$$I(\omega) = \int_0^1 \frac{\exp(-q^2 L^2 / 4a^2)}{[\omega - \omega(q)]^2 + (\Gamma_0 / 2)^2} d^3 q,$$

где $q = 2\pi/a$; a — постоянные решетки, Γ_0 — ширина линии LO фононов в монокристаллическом кремнии c-Si ($3,6 \text{ см}^{-1}$). Частота $\omega(q)$ LO фононов при рассеянии в c-Si определяется как

$$\omega^2(q) = A + B \cos\left(\frac{\pi q}{2}\right),$$

где $A = 1,714 \cdot 10^5 \text{ см}^{-2}$ и $B = 1,000 \cdot 10^5 \text{ см}^{-2}$. Эти параметры были определены из нейтронного рассеяния носителей. Из этих двух уравнений можем рассчитать комбинационное рассеяние света нанокристаллитов и оценить средний размер Si нанокристаллитов.

Спектр комбинационного рассеяния кристаллического кремния обычно представляет собой узкую симметричную линию, сосредоточенную на линии волнового числа 520 см^{-1} , полушириной $3,6 \text{ см}^{-1}$. В другой работе [7] рамановский спектр анализируется на основе особенности вклада из аморфной и нанокристаллической структуры пористого кремния. Допустим, вклад нанокристаллического кремния описывается с помощью феноменологической модели на основе пространственного ограничения фононов:

$$I(\omega) = \int_0^\infty I_L(\omega) P(L) DL,$$

где $I(\omega)$ — рамановский спектр; $I_L(\omega)$ — рамановское рассеяние первого порядка из фононов внутри нанокристаллов размером L ; $P(L)$ — распределения размеров нанокристаллов, т.е. гауссовское распределение со значениями L_0 и дисперсией σ .

На рисунке 3 показаны спектры рамановского рассеяния пористого кремния, полученного при различных концентрациях электролита, содержащие HF: этоксиэтанол в соотношениях 1:1; 2:1 и 3:1. Пик спектра рассеяния для образцов пористого кремния с концентрацией 2:1 и 3:1 находится на линии с частотой 520 см^{-1} , которая соответствует комбинационному рассеянию из кристаллического кремния. Это свидетельствует о том, что некоторая часть рассеянного света в пористом кремнии осуществляется от нанокристаллитов большого диаметра. Данное предположение подтверждает

смещение спектров фотолюминесценции пористого кремния в длинноволновую область спектра с увеличением поперечного сечения нанокристаллитов (рис. 1).

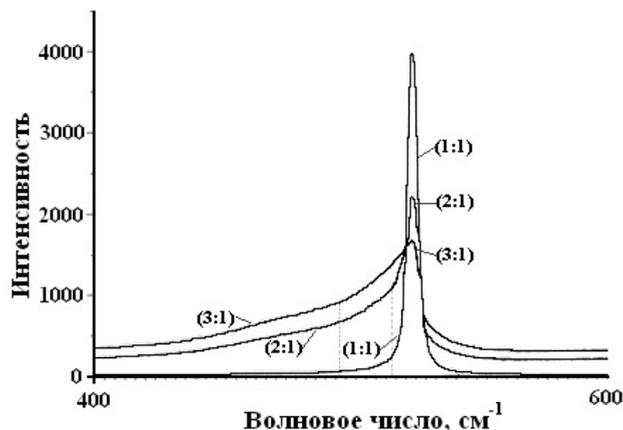


Рисунок 3. Смещение спектров комбинационного рассеяния света пористого кремния

Из рамановского спектра видно, что расширение пиков спектра рассеяния в низкочастотную область волнового числа сопровождается увеличением его интенсивности. Кроме того, полуширина спектра с уменьшением концентрации HF расширяется вследствие квантового ограничения. Наличие пика рамановского рассеяния при 520 см^{-1} у ряда образцов объясняется наличием макрокристаллитов в их структуре [8].

В этом случае полуширина рамановского спектра (ПРС) является главным параметром для расчета распределения размеров нанокристаллитов. Точка пересечения низкочастотного края ПРС с осью абсцисс определяет средний размер кристаллитов. В частности, для электролита (1:1) край пика линий ПРС располагается на частоте 513 см^{-1} , что составляет диаметр поперечного сечения порядка 3,6 нм. Следовательно, ПРС для электролитов 2:1 и 3:1, соответственно с частотами 516 и 518 см^{-1} , средний размер кристаллитов составляет 5,5 и 7,3 нм.

Спектры рамановского рассеяния, полученные при высокой концентрации HF, которые показаны на рисунке 3, характеризуются широкими, несимметричными линиями. Полуширина этих линии $\Delta\nu$ составляет от 10 до 35 см^{-1} , со сдвигом максимума 3–10 см^{-1} . Пик спектра линии основного сигнала простирается от 513 см^{-1} до 520 см^{-1} . В структуре нанопористого кремния присутствуют нанокристаллиты нитевидной формы, с сечением от 3,56 нм до 7,4 нм. При этом происходит уменьшение амплитуды сигнала и уширение полуширины спектра.

Кроме того, спадающий низкочастотный край рамановского спектра охватывает линии 480 и 460 см^{-1} . Как известно, гауссовская линия, сосредоточенная в этих диапазонах, принадлежит к аморфной кристаллической фазе [9]. Однако сформированные на поверхности пористого кремния нанокристаллиты представляют кристаллическую фазу, так как нанопористые структуры выращиваются из кристаллического кремния. Субоксидные пленки (SiO_x) на поверхности нанокристаллитов после электрохимического анодирования могут быть аморфными. Они обладают ближним или дальним порядком, подобно аморфному гидrogenизированному кремнию. Таким образом, присутствие субоксидной пленки вносит незначительный вклад в аморфную фазу в нанопористом кремнии.

Проведенные исследования спектров фотолюминесценции и рамановского спектра рассеяния образцов пористого кремния, приготовленных при различных соотношениях концентрации HF: этанола, позволяют сделать вывод, что микроскопическая структура образцов может быть описана как система нанокристаллитов сферической формы с минимальным размером 3,6 нм. При этом с уменьшением концентрации фтороводорода (HF) спектр фотолюминесценции смещается в коротковолновую область вследствие квантового ограничения.

References

- 1 Wolkin M.V., Jorne J., Fauchet P.M., Allan G., Delerue C. Electronic States and Luminescence in Porous Silicon Quantum Dots // Phys. Rev. Letters. — 1999. — Vol. 82. — № 1. — P. 197–200.

- 2 *Kashkarov P.K., Timoshenko V.Yu. et al.* Excitonic statement on a silicium surface. JETF. — М.: 2003. — 64. — P. 1123–1128.
- 3 *Kanemitsu Y., Okamoto Sh.* Resonantly exited photoluminescence from porous silicon // Phys. Rev. B. — 1997. — Vol. 56. — P. 1696–1699.
- 4 *Kovalev D., Gross E., Kunzner N., Koch F., Timoshenko V.Yu., Fujii M.* Resonant Electronic Energy Transfer from Excitons Confined in Silicon Nanocrystals to Oxygen Molecules // Phys. Rev. Letters. — 2002. — P. 137401 (1–4).
- 5 *Fang C.J., Ley L., Shanks H.R., Gruntz K.J., Cardona M.* FTIR spectrum of nanostructures // Phys. Rev. B. — 1994, 22. — P. 1980–1988.
- 6 *Campbell I.H., Fauchet P.M.* The effect of microcrystal size and shape on the one phonon Raman spectra of crystalline semiconductors // Solid State Commun. — 1984. 58. — P. 739–741.
- 7 *Richter H., Wang Z.R., Ley L.* The one phonon Raman spectrum in microcrystalline silicon // Solid State Commun. — 1981, 39. — P. 628–640.
- 8 *Reshina I.I., Guk E.G.* Combinational dispersion and a luminescence of porous silicon // FTP. — 1993. — Vol. 27. — P. 728–735.
- 9 *Joannopoulos J.D., Lucovsky G.* The Physics of Hydrogenated Amorphous Silicon // Topics in Applied Physics. — М.: 1987. — Vol. 1. — P. 26–28.

К.К.Диқанбаев

Модификацияланған электролитте алынған кеуек кремнийдің оптоэлектрондық қасиеттерінің кейбір ерекшеліктері

Сутекті фтор концентрациясының модификацияланған электролитте электрохимиялық анодтау тәсілімен алынған кеуек кремний қабықшасының оптоэлектрондық қасиеттеріне әсері зерттелді. Этоксизтанол ерітіндісінде HF концентрациясы азайтылған сайын фотолюминесценция спектрінің шыңы, қысқа толқын ұзындығына ығысатындығын және люминесценция қарқындылығының кванттық өлшем эффектісі бойынша өсетінін тәжірибе жүзінде көрсеттік. Сонымен қатар кеуек кремний қабықшасының Раман спектрінің кіші жиілік аумағына ұлғаюын аңғардық, ал нанокристаллиттер өлшемінің ең кіші диаметрі 3,6 нм құрды.

К.К.Dikhanbayev

Some features of optoelectronic properties of the porous silicon, received in the modified electrolit

The influence of the concentration of hydrofluoric acid on the optoelectronic properties of porous silicon received by electrochemical anodizing in the modified electrolyte is investigated. It is shown experimentally that a decreasing HF concentration in the solution with ethoxyethanol, the peak photoluminescence spectrum shifts to a shorter wavelengths with increasing intensity of luminescence due to quantum confinement effect. It was also observed low-frequency shift of the Raman spectrum of porous silicon samples with increasing concentration of HF, with a minimum size of 3.6 nm nanocrystals.

Н.Н.Жантурина, К.Ш.Шункеев

Актюбинский государственный педагогический институт (E-mail: shunkeev@rambler.ru)

О влиянии температуры и деформации на экситон-фононное взаимодействие в кристалле КВr

На основе правила Урбаха в щелочно-галлоидных кристаллах исследована зависимость экситон-фононного взаимодействия от температуры и деформации. Оценены низкотемпературные константы для экситон-фононного взаимодействия. Показано, что оно уменьшается с ростом температуры и деформации. Предложен механизм роста вероятности излучательных переходов при упругой деформации. Экспериментальным подтверждением этого является эффект увеличения вероятности автолокализации экситонов с излучательной аннигиляцией.

Ключевые слова: правило Урбаха, экситон-фононное взаимодействие, излучательные переходы, автолокализация, экситоны, аннигиляция, щелочно-галлоидные кристаллы.

Взаимодействие экситонов с фононами определяет природу существующих в них экситонных состояний, а следовательно, и характер физических процессов, протекающих при образовании экситонов. В кристаллах со слабым экситон-фононным взаимодействием существуют свободные экситоны, а в кристаллах с сильным экситон-фононным взаимодействием возможно существование автолокализованных экситонов. Эти состояния разделены между собой потенциальным барьером, поэтому показано, что в щелочногаллоидных кристаллах оба типа экситонных состояний сосуществуют. Переход из свободного состояния в автолокализованное при высоких температурах осуществляется при помощи термической активации, а при низких — способом квантовомеханического туннелирования [1, 2].

Для автолокализации экситонов требуется некоторое локальное возмущение. Такими возмущениями являются колебания решетки, которые вызывают пространственный и термический флуктуирующий потенциал для экситона [3].

В своей работе мы рассмотрели два вида таких возмущений: действие температуры и одноосное сжатие. Ранее [4, 5] экспериментально установлено, что в поле напряжения одноосного сжатия свободный пробег экситонов существенно сокращается, в результате чего увеличивается вероятность автолокализации экситонов в регулярных узлах решетки с последующей излучательной аннигиляцией.

В щелочногаллоидных кристаллах развитие континуальной теории автолокализации низкоэнергетических электронов возбуждения в условиях понижения симметрии решетки способствует более полному раскрытию теории автолокализованных экситонов в анизотропных твердых телах. Проанализированы зависимости константы экситон-фононного взаимодействия отдельно от температуры и величины деформации. По континуальной модели Тойозавы существуют два вида фононов: акустические и оптические и соответственно две константы [6]. Первая, в свою очередь, несет ответственность за процесс автолокализации экситонов и в континуальной модели определяется как

$$g = \frac{B}{A}, \quad (1)$$

где $A = 3\pi\hbar^2 / 2ma_0^2$ — кинетическая энергия экситона или полуширина экситонной зоны; $B = \frac{E_d^2}{2\beta a_0^3}$

— энергия релаксации решетки; m — эффективная масса экситона; a_0 — постоянная решетки; E_d — деформационный потенциал; β — упругая постоянная решетки. Акустическая ветвь значительно слабее, однако она обладает короткодействующим характером и поэтому может приводить к качественно новым эффектам.

Полуширина экситонной зоны A играет существенную роль в процессе локализации экситона в решетке. Выигрыш энергии при релаксации решетки вокруг экситона называется энергией релаксации решетки. При локализации экситон должен перейти в состояние, в котором его импульс не является определенным. При этом энергия экситона повышается на величину A по сравнению с миниму-

мом. В том случае, когда $B < A$, автолокализованное состояние экситона является не стабильным, а лишь метастабильным. В обратном случае, когда $B > A$, автолокализованное состояние является стабильным, а состояние свободного состояния метастабильным. Эти состояния разделены между собой потенциальным барьером.

Одним из хорошо изученных эффектов, зависящих от температуры, является экситонное поглощение. Поглощение автолокализованных экситонов должно находиться в области более низких энергий, чем первый экситонный пик поглощения. На длинноволновом спаде низкоэнергетической экситонной полосы поглощения имеется хвост поглощения, описываемый при достаточно высоких температурах соотношением, называемым правилом Урбаха:

$$I = I_0 \exp \left\{ -\delta \frac{h(\nu_0 - \nu)}{kT} \right\}, \quad (2)$$

где I — интенсивность поглощения; T — температура; параметр δ характеризует температурно-зависимый наклон спектральной характеристики; $h(\nu_0 - \nu)$ — энергия фононов, взаимодействующих с экситонами. Правило Урбаха представляет большой интерес в связи с тем, что еще ранее Тойозавой была предсказана его связь с процессом автолокализации экситонов. Он сформулировал простую модель, основанную на взаимодействии мгновенно локализованных экситонов с фононами. Если поглощается свет с энергией, меньшей, чем ширина запрещенной зоны, то дефицит энергии в поглощении преодолевается через взаимодействие с фононами. То есть в области «хвоста» усиливаются экситон-фононные взаимодействия, и константа начинает зависеть от температуры. Через спектр поглощения Урбаха можно удачно проанализировать экспоненциальное распределение энергий автолокализованных экситонов [7]. Эмпирический коэффициент в законе Урбаха позволяет определить константу экситон-фононного взаимодействия. Шрейбером и Тойозавой была установлена следующая связь между параметром наклона и коэффициентом экситон-фононного взаимодействия:

$$g = \frac{s}{\sigma}, \quad (3)$$

где s — пошаговый индекс, определяется геометрической размерностью решетки. В трехмерном случае $s = 1,5$ для щелочногалоидных кристаллов [2], а g определяется как отношение энергии релаксации решетки к полуширине экситонной зоны.

Причем при высоких температурах обнаруживается зависимость δ от температуры:

$$\delta = \delta_0 \frac{2kT}{\hbar\omega} \operatorname{tg} \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right). \quad (4)$$

Нами рассчитан низкотемпературный предел g -некоторых щелочногалоидных кристаллов, представленный в таблице.

Т а б л и ц а

Значения низкотемпературных пределов констант экситон-фононного взаимодействия некоторых щелочногалоидных кристаллов

Кристалл	σ_0	g
KBr	0,79	1,9
KI	0,82	1,83
KCl	0,78	1,92
NaCl	0,76	1,97

При взаимном согласовании выражений (3), (4) получаем зависимость константы экситон-фононного взаимодействия от температуры:

$$g = \frac{s\hbar\omega}{2kT\delta_0 \operatorname{tg} \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right)}. \quad (5)$$

Характер этой зависимости наглядно показан на графике (рис. 1).

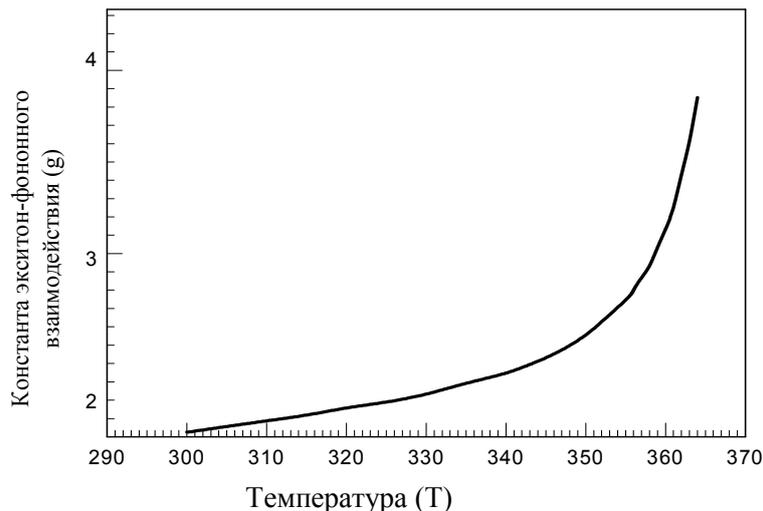


Рисунок 1. Зависимость константы экситон-фононного взаимодействия от температуры (КВг)

Из полученного графика видно, что константа экситон-фононного взаимодействия растет экспоненциально с ростом температуры. Действительно, при увеличении температуры происходит термическое расширение кристалла, что приводит к усилению экситон-фононного взаимодействия. Эти факты согласуются с рассматриваемой нами континуальной моделью ЩГК и подтверждают флуктуационную природу потенциального барьера автолокализации экситонов.

В температурном диапазоне, когда происходит тушение интенсивности люминесценции свободных экситонов, увеличивается интенсивность автолокализованных экситонов. Это означает, что между свободным и автолокализованным состояниями экситонов существует потенциальный барьер, высота которого уменьшается, а в последующем, с ростом температуры кристалла, полностью исчезает [8].

При достаточно низких температурах зависимость константы экситон-фононного взаимодействия от температуры почти исчезает. Как видно из рисунка, для кристалла КВг предельной является температура 300 К. Это означает, что до 300 К в кристалле КВг высота потенциального барьера не зависит от температуры.

Как видно из графика, для кристалла КВг существенное уменьшение потенциального барьера начинается от 360 К.

Эти данные совпадают с экспериментально полученной температурной зависимостью спектра кристалла КВг, приведенной в работе [7], где спад интенсивности люминесценции кристалла начинается от 355 К.

Согласно выражению (1) получаем, что

$$g = \frac{B}{A} = \frac{mE_d^2}{3\pi\beta a_0 \hbar^2}. \quad (6)$$

В случае одноосного сжатия коэффициенты зависят от деформации и принимают вид [7]:

$$A = \frac{\left(2 + 1/\varepsilon^2\right)\pi\hbar^2}{2ma_0^2}, \quad B = \frac{E_d^2}{2\beta a_0^3 \varepsilon^{7/3}},$$

где ε — деформация.

При одноосном сжатии в ЩГК из-за понижения симметрии кристаллической решетки высота потенциального барьера для автолокализации экситонов должна уменьшаться, и это приводит к увеличению вероятности автолокализации экситонов, отсюда

$$g = \frac{B}{A} = \frac{mE_d^2}{3\pi\beta a_0 \hbar^2 \varepsilon^{7/3} \left(2 + 1/\varepsilon^2\right)}. \quad (7)$$

На рисунке 2 на примере кристалла КВг построен график зависимости константы экситон-фононного взаимодействия от величины деформации, согласно которому установлено, что с ростом

степени относительной деформации (ε) уменьшается константа экситон-фононного взаимодействия (g). Одноосное сжатие на несколько порядков уменьшает постоянную решетки, значит, уменьшается потенциальный барьер между свободным и автолокализованным состоянием экситона. Показано, что уменьшение высоты автолокализационного барьера происходит из-за усиления взаимодействия экситонов с акустическими фононами. Уменьшение константы экситон-фононного взаимодействия с ростом степени относительной деформации хорошо согласуется с тем фактом, что при действии одноосного сжатия возрастает интенсивность люминесценции автолокализованных экситонов [9].

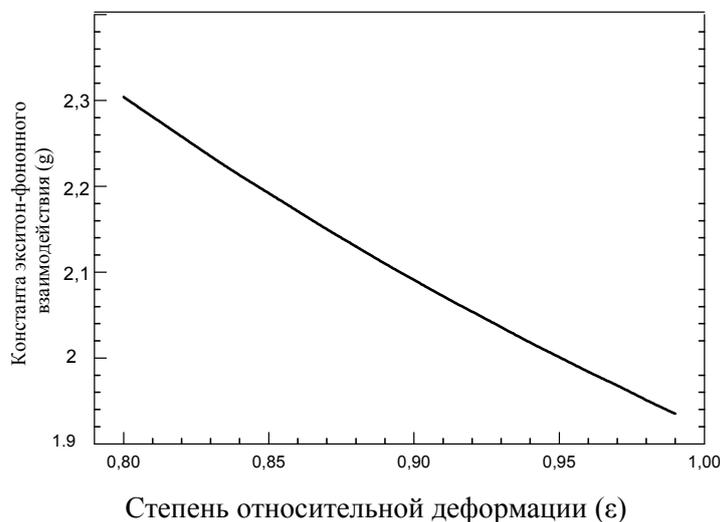


Рисунок 2. Зависимость константы экситон-фононного взаимодействия от деформации

Для изучения экситон-фононного взаимодействия мы исследовали правило Урбаха, связь которого с процессом автолокализации предсказывал Тойозава. В этом законе эмпирический коэффициент наклона имеет связь с константой короткодействующего экситон-фононного взаимодействия. Анализ формул (5) и (6) и графиков позволяет заключить, что константа экситон-фононного взаимодействия возрастает в обоих случаях — с ростом температуры и одноосной деформации. Этим можно объяснить схожесть экспериментальных эффектов, происходящих при увеличении температуры и одноосной деформации кристалла [10]. С увеличением константы экситон-фононного взаимодействия вероятность автолокализации экситонов также повышается.

Таким образом, в ЩГК с уменьшением температуры и степени относительной деформации в щелочногалогидных кристаллах уменьшается экситон-фононное взаимодействие. Экспериментальным подтверждением этого является эффект увеличения вероятности автолокализации экситонов с излучательной аннигиляцией [3–5].

References

- 1 Aluker E.D., Lusic D.J., Chernov S.A. Electronic excitation and a radioluminescence in alkali halide crystals. — Riga: Zinatne, 1979. — 252 p.
- 2 Lushchik Ch.B., Lushchik A.Ch. Disintegration electronic excitation with formation of defects in solid states. — M.: Nauka, 1989. — 264 p.
- 3 Vasilev A.N., Mihajlin V.V. Introduction in spectroscopy of dielectrics. — M., 1998. — 213 p.
- 4 Babin V., Bekeshev A., Elango A. et al. Effect of uniaxial stress on dynamics of electronic excitations in alkali halides / Journal of Luminescence. — 76&77 (1998) 502–506. — 231 c.
- 5 Babin V., Elango A., Kalder K. et al. Luminescent defects created in alkali iodides by plastic deformation at 4.2 K / Journal of Luminescence. — 81 (1999). 71–77. — 215 c.
- 6 Yutaka Toyozawa. Optical processes in solids // Cambridge University press, 2003.
- 7 Sagimbaeva Sh. Z. Temperature suppression of a luminescence from selftraped excitons by low temperature monoaxial deformation. The author's abstract dissertation on competition of a scientific degree the candidate of physical and mathematical sciences. — Aktobe (Kazakhstan), 2003. — 17 p.
- 8 Babin V., Bekeshev A., Elango A. et al. Effect of uniaxial stress on luminescence of undoped and thallium-doped KI and RbI crystals // J.Phys.: Condens. Matter 11 (1999) 2303–2317, 141 p.

9 *Song K.S., Williams R.T.* Self-Trapped Excitons, Springer series in Solid-State Sciences. — Vol. 105 / Springer-Verlag. — Berlin, 1993.

10 *Tulepbergenov S.K.* Modeling of influence on selftrapped and disintegration electronic excitation in alkali halide crystals by deformation: Dissertation on competition of a scientific degree the candidate of physical and mathematical sciences. — Aktobe (Kazakhstan), 2002. — 120 p.

Н.Н.Жантөрина, К.Ш.Шүнкеев

КВr кристалындағы экситон-фонондық әсерлесуге температура мен деформацияның әсері туралы

Сілтілі-галлоидты кристалдарда Урбах ережесі негізінде экситон-фонондық әсерлесудің температураға және деформацияға тәуелділігі зерттелді. Кейбір сілтілі-галлоидты кристалдар үшін экситон-фонондық әсерлесудің константасының төменгі температуралық шекті мәні есептелді. Температура мен деформацияның өсуіне байланысты экситон-фонондық әсерлесудің азаятындығы тағайындалды. Бұл құбылыс экситондардың серпімді деформация әсерінен сәуле шығару қабілеттілігінің артуымен түсіндіріледі. Экситондардың автолокализациясының ықтималдылығының арту эффектісі аталған құбылыстың тәжірибелік расталғанын көрсетеді.

N.N.Zhanturina, K.S.Shunkeev

About influence on exciton-phonon interaction in crystal KBr by temperature and deformation

There are the dependence of exciton-phonon interaction by temperature and deformation in alkali halide crystals, based on Urbah rule. The low temperature finite value of constant of exciton-phonon interaction was estimated. The exciton-phonon interaction decreases with the increasing temperature and deformation. This appearance is explained the increasing the ability of emission by elastic deformation. Experimental acknowledgement of it is the effect of increase in probability of autolocalization excitons with radiating annihilation

С.Г.Карстина

Казахстанский государственный университет им. Е.А.Букетова (E-mail: upo@ksu.kz)

Применение методов компьютерного моделирования при исследовании устойчивости молекулярных структур

Методами компьютерного моделирования и мультифрактального анализа исследованы процессы образования локальных фрактальных структур при межмолекулярных взаимодействиях в адсорбированном на неоднородной пористой поверхности молекулярном слое. Показано, что процессы образования устойчивых молекулярных структур сопровождаются изменением обобщенных фрактальных размерностей, упорядоченности матрицы, скорости изменения энтропии и скоростных коэффициентов протекающих реакций. Характер изменения этих параметров зависит от начального распределения взаимодействующих молекул, вероятности взаимодействия, начальной упорядоченности матрицы и ее температуры. Полученные в работе результаты подтверждаются экспериментальными данными по изменению кинетики затухания люминесценции при образовании в адсорбированном слое молекулярных кластеров при переносе энергии электронного возбуждения и аннигиляции.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, мультифрактальный анализ, межмолекулярные взаимодействия, скоростные коэффициенты, люминесценция, кинетика затухания, молекулярный слой, абсорбция.

В дисперсных матрицах в результате обмена энергией, веществом и информацией с окружением [1–4] при достижении некоторого критического состояния возможно образование локальных устойчивых молекулярных структур [5, 6]. Данный процесс может сопровождаться локализацией энергии возбуждения на масштабах порядка радиуса корреляции, изменением скорости и механизмов межмолекулярных взаимодействий [2–4, 7, 8], термодинамических и фрактальных параметров матрицы в целом. Экспериментально протекание указанных процессов можно обнаружить по изменению кинетики затухания люминесценции и изменению соотношений между кинетическими параметрами процессов разгорания или затухания люминесценции. В дополнение к экспериментальным результатам детально проанализировать изменения кинетических, термодинамических и фрактальных параметров матрицы при образовании локальных молекулярных структур в результате межмолекулярных взаимодействий также можно с помощью методов компьютерного моделирования и мультифрактального анализа.

Важным преимуществом методов компьютерного моделирования является то, что они позволяют учесть структурные особенности молекулярной матрицы, влияние температуры, вероятности взаимодействия, характера распределения взаимодействующих молекул и их концентрационных соотношений на процессы образования устойчивых молекулярных структур, определить некоторые индивидуальные параметры для управления свойствами матрицы, поэтапно описать протекающие в ней процессы, накопить сведения об отдельных свойствах или параметрах исследуемой системы без потери целостного представления о ней. К числу наиболее эффективных и универсальных методов компьютерного моделирования, применимых при исследовании структурно-неоднородных молекулярных матриц и процессов, приводящих к образованию, росту и разрушению молекулярных структур в результате межмолекулярных взаимодействий, можно отнести метод вероятностного клеточного автомата [6, 7, 9, 10]. Этот метод основан на представлении дисперсной молекулярной матрицы в виде совокупности областей, аналогичных элементарным ячейкам кристаллов, в которых в значительной степени сохраняется упорядоченность и выполняются установленные локальные или вероятностные правила.

В настоящей работе метод клеточного автомата был использован нами для анализа устойчивости молекулярных структур, образующихся в адсорбированном на неоднородной пористой поверхности кремнезема мономолекулярном слое, состоящем из двух сортов молекул: донора и акцептора [11]. Как известно, молекулы, адсорбированные на пористой поверхности, представляют собой сложную систему, в которой возможно образование различных подсистем при электронном возбуждении и последующих за ним процессов переноса энергии, аннигиляции и люминесценции. При этом механизм протекания реакции с участием возбужденной молекулы определяется ее положением в конкретной подсистеме или, иначе говоря, ее окружением [6]. Подтверждением этому являются результаты мно-

гочисленных экспериментальных исследований. Остановимся на некоторых экспериментальных результатах, полученных нами при исследовании фотопроцессов в структурно-неоднородной молекулярной матрице, представляющей собой адсорбаты катионных красителей акридинового ряда (трипафлавин, акридиновый оранжевый) на поверхности широкопористого кремнезема С-80. Катионные красители акридинового ряда могут сорбироваться на кремнеземе по катионообменному механизму и закрепляться на поверхности за счет ионных сил. При большой концентрации молекул красителя возможно образование ассоциатов, которые могут принимать участие в триплет-триплетной аннигиляции (ТТА) на поверхности, что открывает новые каналы дезактивации возбуждения. При проведении эксперимента возбуждение осуществлялось второй гармоникой излучения ($\lambda = 532$ нм) лазерной системы на YAG: Nd³⁺. Анализ полученных в работе спектров быстрой флуоресценции исследуемых адсорбатов красителей показал, что концентрационное тушение быстрой флуоресценции начинается при концентрации красителей $1 \cdot 10^{-2}$ 1/нм². Учитывая, что монослойное покрытие при размерах молекулы акридинового оранжевого или трипафлавина $R \sim 3\text{ \AA}$ должно быть при концентрации 3,0 1/нм², наблюдаемое концентрационное тушение быстрой флуоресценции является следствием неравномерной, островковой сорбции частиц.

Островковый характер сорбции молекул красителя на поверхности кремнезема подтверждают также эксперименты по исследованию фотопроцессов с участием адсорбатов акридиновых и флуоресцеиновых (эритрозина, бенгальского розового) красителей. Проведенные исследования процессов гомо- и гетеро-триплет-триплетной аннигиляции с различными концентрациями молекул красителей на поверхности пористого кремнезема в широком интервале температур позволили установить, что обменно-резонансные процессы определяются неоднородностью кластеров и фрактальностью поверхности кремнезема.

Существенно дополнить сделанные на основе экспериментальных данных выводы позволяют результаты, полученные нами при моделировании аналогичных процессов на структурно-неоднородной поверхности и мультифрактальном анализе моделируемой системы. Как известно, используя метод мультифрактального анализа, можно получить набор числовых параметров, чувствительных к структурной перестройке в адсорбированном слое и образованию локальных молекулярных структур (кластеров). При этом термодинамические условия образования подобных структур можно определить по изменению спектра обобщенных фрактальных размерностей Реньи $D_q(q)$, зависящего от конкуренции близко- и дальнедействующих взаимодействий. При моделировании процессов образования и разрушения локальных молекулярных структур в результате переноса энергии электронного возбуждения и аннигиляции в качестве показателя структурных изменений матрицы нами была выбрана информационная энтропия [12].

Этот подход удобен тем, что при временной эволюции к равновесному состоянию энтропия системы возрастает и остается неизменной при достижении равновесного состояния. Возрастание энтропии сопровождается возрастанием степени хаотичности, достигающей максимального значения в состоянии равновесия. При этом следует учитывать, что эволюция может вести как к деградации, так и представлять собой процесс самоорганизации, в ходе которого могут возникать структуры различной сложности. Для определения пути, по которому пойдет процесс эволюции, необходимо использовать количественные критерии самоорганизации, выбор которых представляет собой достаточно сложную задачу, поэтому чаще проводят сравнительный анализ относительной степени упорядоченности (или хаотичности) различных состояний исследуемой матрицы. Степень упорядоченности и значения энтропии выделенных состояний в общем случае будут различными. Следовательно, можно утверждать, что некоторое состояние будет более хаотичным по сравнению с другими, а, соответственно, разность энтропий может служить мерой относительной степени упорядоченности выделенных состояний.

Таким образом, об изменениях в структурной организации молекулярной матрицы можно судить по изменению энтропии системы. При этом, как показали результаты компьютерного моделирования и мультифрактального анализа, более быстрое изменение энтропии происходит в системе, в которой число молекул, принадлежащих локальным молекулярным структурам (кластерам), незначительно, а, соответственно, взаимодействия протекают между некластеризованными молекулами. По мере пространственного разделения взаимодействующих молекул и их кластеризации возрастает степень упорядоченности матрицы, а скорость изменения энтропии уменьшается. Для матриц с различной степенью начальной упорядоченности различия в спектрах обобщенных фрактальных размерностей при изменении эффективности межмолекулярного взаимодействия и процессов переноса

энергии наблюдаются на дальневременных участках кинетических кривых. Влияние температуры матрицы, эффективности миграции энергии по донорной подсистеме и бимолекулярных взаимодействий на спектр обобщенных фрактальных размерностей Реньи $D_q(q)$ обусловлено нарушением упорядоченности моделируемой матрицы в результате образования локальных поверхностных молекулярных кластеров, в пределах которых сохраняется порядок, но при этом нарушается упорядоченность всей системы [13–16].

Проведенный в работе мультифрактальный анализ распределения взаимодействующих молекул на неоднородной поверхности показал, что при хаотическом распределении микрокластеров по поверхности степень упорядоченности матрицы меньше, чем для матрицы с некластеризованным хаотическим распределением. Независимо от степени покрытия поверхности взаимодействующими молекулами увеличение степени упорядоченности в распределении взаимодействующих молекул приводит к уменьшению обобщенных фрактальных размерностей $D_q(q)$ и информационной энтропии системы S . При этом меньшие значения S и $D_q(q)$ соответствуют наиболее равновесным условиям формирования поверхностных молекулярных структур. Обнаруженные нами закономерности хорошо согласуются с литературными данными. Так, в работе [5] показано, что фрактальная размерность не монотонно зависит от параметра, характеризующего энергию взаимодействия частиц при образовании агрегатов (кластеров): при малой и большой энергии взаимодействия фрактальная размерность близка к размерности пространства, при промежуточных значениях энергии взаимодействия частиц d_f проходит через минимум (минимальное значение d_f равно 1.79). При этих же значениях происходит переход к режиму роста, при котором в кластере образуется большое число пустот, при больших энергиях взаимодействия частиц формируется кластер с однородной пористостью.

Сопоставление спектров обобщенных фрактальных размерностей при различных состояниях моделируемой системы показало, что при меньших вероятностях взаимодействия на начальном этапе эволюции системы спектры $D_q(q)$ совпадают для случаев начального мультифрактального и хаотического распределений и наблюдается их различие на дальневременных участках кинетических кривых во всем исследуемом температурном диапазоне.

Проведенные расчеты параметра упорядоченности Δ [11, 17, 18] показали, что изменение упорядоченности системы в результате межмолекулярных взаимодействий, описываемых реакцией вида $A+B \rightarrow 0$, где A и B — концентрации взаимодействующих молекул первого и второго сортов, определяется вероятностью взаимодействия, температурой матрицы и характером начального распределения частиц (рис.), а соответствующие скоростные коэффициенты протекающих в матрице реакций уменьшаются с увеличением параметра упорядоченности системы.

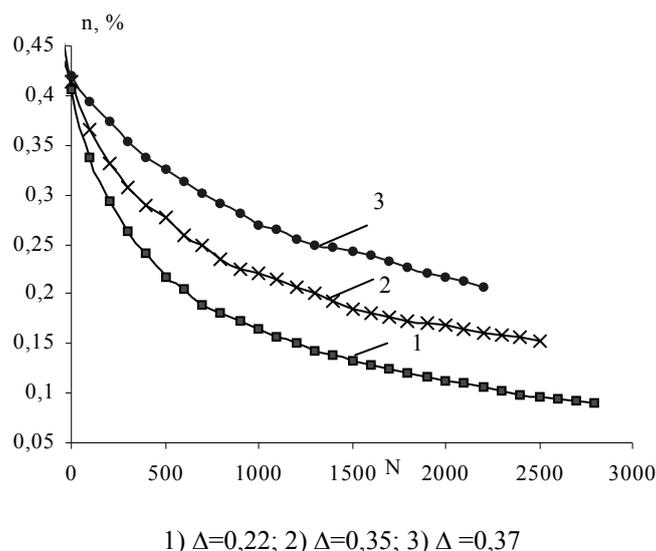


Рисунок. Зависимости кинетики убыли взаимодействующих пар n в результате межмолекулярных взаимодействий от степени начальной упорядоченности структурно-неоднородной молекулярной системы

Наблюдаемые кинетические зависимости хорошо согласуются с литературными данными [19–21], а закон убыли взаимодействующих молекул определяется фрактальностью структур, образованных совокупностью областей, занятых частицами одного сорта. При этом кинетика межмолекулярных взаимодействий в матрицах с одинаковой начальной упорядоченностью замедляется с понижением температуры.

Это связано с тем, что при более высоких температурах матрицы легче происходит активация, в результате чего сокращается время перехода акцептора в новую узловую точку на поверхности, а следовательно, при миграции акцепторов по поверхности увеличивается число доступных мест между узлами, занятыми донорами. Анализ кинетики гетероаннигиляционных взаимодействий в матрицах со случайным, не кластеризованным распределением показал, что увеличение параметра начальной упорядоченности приводит к увеличению скорости убыли доноров при низких температурах матрицы ($T \sim 213$ К) и, наоборот, к замедлению кинетики при более высоких температурах матрицы ($T \sim 273$ К). Такое поведение можно объяснить, предположив, что при повышении температуры матрицы происходит быстрая смена кинетических режимов, влияющих на пространственное разделение взаимодействующих молекул и образование неоднородностей, различных по размерам и плотностям частиц в них.

При этом переход от случайного распределения к кластерному происходит быстрее при более высокой температуре матрицы. Аналогичный вывод позволяет сделать также и анализ изменения скоростных коэффициентов k аннигиляции при различных температурах матрицы и начальной упорядоченности взаимодействующих молекул. При этом скорость убыли взаимодействующих молекул определяется преобладанием различных кинетических режимов в разные моменты времени, характеризующихся различными значениями скоростных коэффициентов и характером их изменения. Так, при высоких температурах матрицы наблюдается периодическое изменение скоростного коэффициента и его уменьшение при увеличении степени начальной упорядоченности. Очевидно, это связано с тем, что, пока в системе преобладает взаимодействие между не связанными в кластеры, случайно распределенными по поверхности молекулами, аннигиляция приводит к периодическому объединению локальных неоднородностей и уменьшению скоростного коэффициента либо их пространственному разделению, сопровождаемому увеличением скоростного коэффициента. Если в распределении взаимодействующих молекул преобладают пространственно разделенные локальные области с высокой плотностью частиц в них, то наблюдается незначительное изменение скоростного коэффициента, что позволяет рассматривать систему как гомогенную. С понижением температуры матрицы переход к гомогенному кинетическому режиму наблюдается при меньших значениях параметра упорядоченности. При этом для больших вероятностей взаимодействия ($p \sim 0.7$) при температурах $T < 237$ К и соотношении концентраций взаимодействующих молекул 1:1 временные изменения параметра упорядоченности в результате межмолекулярных взаимодействий имеют линейный возрастающий характер, как в случае начального хаотического, так и в случае начального мультифрактального распределений.

Влияние упорядоченности структурно-неоднородных молекулярных систем на кластеризацию адсорбированных по поверхности молекул можно проанализировать также с помощью функции распределения частиц по ячейкам заданного размера. При этом с увеличением степени начальной упорядоченности Δ наблюдается увеличение размеров образующихся кластеров, состоящих из частиц одного сорта, а вид функции распределения приближается к пуассоновскому. Можно предположить, что увеличение размеров кластеров должно приводить к увеличению времени захвата кластером молекул акцептора, соответственно, к замедлению кинетики бимолекулярных взаимодействий и уменьшению численных значений скоростных коэффициентов. Кроме того, на основании результатов проведенных расчетов показано, что независимо от температуры матрицы при увеличении степени начальной упорядоченности в распределении реагентов наблюдается тенденция к увеличению плотности частиц в ячейках (I_{AV}), уменьшению корреляционной размерности D_2 и информационной энтропии системы S . При этом меньшие значения S и $D_q(q)$ соответствуют наиболее равновесным условиям формирования поверхностных структур и более высокому уровню самоорганизации системы в целом. Полученная корреляция между степенью начальной упорядоченности и корреляционной размерностью хорошо согласуется с данными работы [22], в которой уменьшение фрактальной размерности объясняется увеличением размера неоднородностей и их достаточно большой долей в системе.

Таким образом, на основе результатов компьютерного моделирования и мультифрактального анализа показано, что образующиеся в процессе межмолекулярных взаимодействий локальные моле-

кулярные структуры могут переходить от одного устойчивого состояния к другому. При этом каждое новое устойчивое состояние будет отличаться от предыдущего значениями фрактальных, термодинамических и кинетических параметров. Нелинейные эффекты взаимодействия приводят к тому, что образовавшиеся на поверхности локальные фрактальные структуры теряют свою индивидуальность и трансформируются в коллективную макросистему, свойства которой не зависят от кинетики процессов на начальных стадиях эволюции. Имеющие место в такой системе бимолекулярные взаимодействия, в том числе и аннигиляция, будут приводить к пространственной корреляции в распределении взаимодействующих частиц, т.е. к самоорганизации. Управлять процессом самоорганизации можно, изменяя либо кинетику сближения взаимодействующих молекул, либо характер их распределения. Соотношение же концентраций взаимодействующих молекул определяет переход от хаотического распределения участвующих в процессе частиц к упорядоченному, а соответственно, и смену механизма переноса энергии электронного возбуждения между взаимодействующими молекулами.

References

- 1 Spectroscopy and dynamics of excitations in considered molecular systems / Edited by V.M.Arganovicha, R.M.Hohstrassera — М.: Nauka, 1987. — 493 p.
- 2 Malinovskiy V.K. Disorder solids: universal regularities in structure, dynamics and transport phenomena // FTT. — 1999. — Т. 41. — Vol. 5. — P. 805–808.
- 3 Novikov V.U., Kozlov G.V. Fractal analysis of macromolecules // Success in Chemistry. — 2000. — Т. 69. — Vol. 4. — P. 378–399.
- 4 Karmanov A.P., Monakov Yu.B. Legnin // Success in Chemistry. — 2003. — Vol. 72. — № 8. — P. 797–819.
- 5 Roldugin V.I. Fractal analysis in dispersed systems // Success in Chemistry. — 2003. — Т. 72. — Vol. 10. — P. 931–959.
- 6 Applied synergetic, fractals and computer modeling of structures / Edited by A.A.Oksogoeva — Tomsk: TSU, 2002. — 384 p.
- 7 Antropova T.V., Gordeeva Yu.A., Ryzhikova B.D., Saletsky A.M. Transfer of electronic excitation energy between dissimilar dye molecules in matrix of porous glass // ZhPS. — 2005. — Vol. 72. — № 4. — P. 446–449.
- 8 Baktybekov K.S., Karstina S.G., Markova M.P., Vasilieva I.F. Investigation of phosphorescence decay nature in donor-acceptor pair on structural and non-uniform surface // Fundamental problem of modern material authority. Materials of international scientific conference — 2004. — № 1. — P. 128–132.
- 9 Vanag V.K. Research of specially extended dynamical system using probabilistic automaton // UFN. — 1999. — Vol. 169. — № 5. — P. 481–504.
- 10 Toffoly T., Morgolus N. Cellular molecular machines. — М.: Mir, 1991. — 280 p.
- 11 Karstina S.G., Baktybekova K.S., Vertyagina E.N. Analyses of luminescence decay kinetics on the SiO₂ surface at different temperature based on multifractal formalism // News of HEIs. Physics. — 2005. — Т. 48. — № 6. — P. 3–8.
- 12 Nashchyokin A.V., Colmakov A.G., Soshnikov I.P. et al. Using concept of multifractal to characterize structural properties of composite films of fullerene C₆₀ doped CdTe // Pisma v ZhTF. — 2003. — Т. 29, ed. 14. — P. 8–14.
- 13 Ushakov N.N., Yurkov G.Yu., Baranov D.A. et al. Optical and photoluminescent properties of nanomaterials based on cadmium sulfide nanoparticles and polyethylene // OIS. — 2006. — Т. 101. — № 2. — P. 262–267.
- 14 Feder I. Fractals. — М.: Mir, 1991. — 254 p.
- 15 Ekimov A.P., Onushchenko A.A. Quantum size effect in optical spectra of semiconductor microcrystal // FTP. — 1982. — Vol. 16. — № 7. — P. 1215–1219.
- 16 Ushakov N.N., Kochubey V.I., Zapsis K.V. Evolution of angular power spectrum of scattered light point source, last layer of turbid medium // OIS. — 2004. — Vol. 96. — № 5. — P. 874–879.
- 17 Karstina S.G., Baktybekov K.S., Baratova A.A. Thermodynamic and kinetic conditions for formation of stable surface fractal structures // Non-lined world. — 2007. — № 3 (5). — P. 133–138.
- 18 Baktybekov K.S., Karstina S.G., Vertyagina E.N. Modeling of radiation defects evolution in regular structures by the cellular automata method // Eurasian Physical Technical Journal. — 2004. — Vol. 1. — № 1. — P. 19–23.
- 19 Zeleny L.N., Milovanov A.V. Fractal topology and strange kinetics: from percolation theory to problems in cosmic electrodynamics // UFN. — 2004. — Vol. 174. — № 8. — P. 808–852.
- 20 Baktybekov K.S., Karstina S.G., Markova M.P., Vertyagina E.N. Dynamics of multifractal nature of donor-acceptor pairs distribution as a result of recombination processes // Bulletin of KazNU. — Seriya pfysicheskaya. — 2004. — № 2 (17). — P. 72–75.
- 21 Bozhokin S.V., Parshin D.A. Fractals and multyfractals. — М., Izhevsk: NIZ «Regularnaya i haoticheskaya dinamika», 2001. — 128 p.
- 22 Bagnich S.A., Konash A.V. The influence of inhomogeneous properties system in the process of percolation in two-dimensional space // FTT. — 2001. — Т. 43. — Vol. 12. — P. 2215–2222.

С.Г.Карстина

Молекулярлық құрылымның тұрақтылығын зерттеу кезіндегі компьютерлік моделдеу әдістерін қолдану

Компьютерлік модельдеу және мультифракталды талдау әдістерімен молекулярлық қабаттың біртекті емес борқылдақ беткейінде адсорбцияланған молекулааралық өзара әрекеттестіктер кезінде тұрақты фракталды құрылымдардың түзілу процестері зерттелді. Тұрақты молекулярлық құрылымдардың түзілу процестері жинақталған фракталды өлшемдердің, матрицаның реттелуінің, өтіп жатқан реакциялардың энтропиясының өзгеру жылдамдығының және жылдамдық коэффициенттерінің өзгеруімен бірге жүретіндігін көрсетті. Бұл өлшемдердің өзгеру сипаты өзара әрекеттесуші молекулалардың бастапқы бөлінісіне, өзара әрекеттесу мүмкіндігіне, матрица мен оның температурасының бастапқы реттелуіне байланысты болады. Мақалада алынған нәтижелер электрондық козу және аннигиляция энергиясын көшіру кезіндегі молекулярлық кластерлердің адсорбцияланған қабатында түзулер кезінде люминесценцияның өшу кинетикасын өзгерту жөніндегі эксперименталдық мәліметтермен расталды.

S.G.Karstina

Use of computer moderating methods at research of molecular structure stability

By the methods of computer moderating and multifractal analysis are researched processes of local fractal structures at intermolecular interactions in adsorbed on heterogeneous porous surface of molecular layer. It is shown, that formation of stable molecular structures are accompanied by changes of generalized fractal dimensions, ordering of the matrix, rate of entropy change and rate coefficients of reactions. Nature of these parameters depend on initial distribution of interacting molecules, probability of interaction, initial ordering of matrix and its temperature. The derived results in work are confirmed by experimental data on change in luminescence decay kinetics in formation in adsorbed layer of molecular clusters in the electron excitation energy transfer and annihilation.

A.Kuketayev

Primatics Financial, McLean, VA, USA (E-mail: jawabean@gmail.com)

Probability distribution of distances between local maximum of random number series

It is considered a sequence of random independent numbers. If x_1, x_2, \dots, x_n and so it is local maximum. Here it is showed that the probability mass function (PMF) $f_m(d)$ of distances d between local maxima is non-parametric. And the same will be for any probability distribution of random numbers in the sequence, and that the average distance is exactly 3. It is presented a method of computation of this PMF and its level for distances between 2 and 29. This PMF is confirmed to match distance distributions of sample random number sequences, which were created by pseudo generators of random number or obtained from "real" random number sources.

Key words: independent random number sequence, mass probability maxima, pseudogenerator, nonparametric function.

1. Average distance between local maximum

Let's take any number in the sequence and find out the probability that it's a local maximum.

Definition 1. A number x_i is a local maximum, if the following condition is true $x_{i-1} < x_i > x_{i+1}$.

First, we'll use a combinatorial approach. Consider the following sequence (fig.) of pseudo generators of random by MS Excel RAND () function:

- | | |
|-----------------|-----------------|
| 1. 0.935536495 | 11. 0.489033299 |
| 2. 0.191531578 | 12. 0.912367351 |
| 3. 0.429049655 | 13. 0.604552972 |
| 4. 0.308968021 | 14. 0.039395302 |
| 5. 0.179540986 | 15. 0.3780448 |
| 6. 0.401329789 | 16. 0.55317569 |
| 7. 0.71581906 | 17. 0.6308772 |
| 8. 0.604617962 | 18. 0.373163479 |
| 9. 0.877254876 | 19. 0.812434426 |
| 10. 0.973280207 | 20. 0.560173882 |

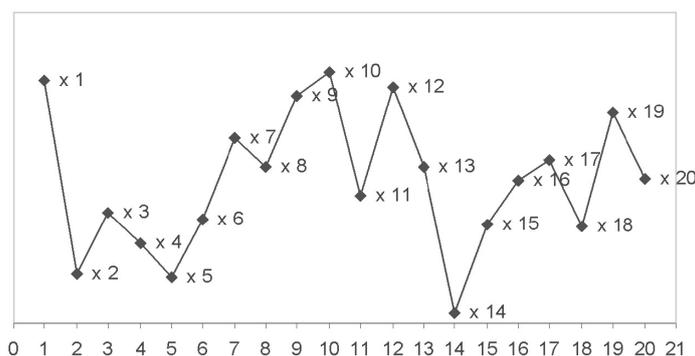


Figure. Sample random sequence

Let's take any three consecutive numbers x_{i-1} , x_i and x_{i+1} . For instance, for $i=3$ we have: $x_2=0.191531578$, $x_3=0.429049655$ and $x_4=0.308968021$. In this case, x_3 is a local maximum. If we denote the greatest value as 2, the least value as 0 and the value in the middle as 1, then we have a triplet (0,2,1). Any three consecutive numbers can be represented by such triplet. Out of six possible permutations

(0,1,2), (0,2,1), (1,0,2), (1,2,0), (2,0,1) and (2,1,0)

we are interested only in two combinations, which represent local maxima

(0,2,1) and (1,2,0).

Therefore, if we take any three consecutive numbers, then the probability that the number in the middle is a local maximum is

$$P_{\max} = \frac{2}{6} = \frac{1}{3}.$$

If we have $3 \cdot N$ numbers in the sequence, then N of them are local maxima. It also means that the average distance between maxima should be exactly 3.

Now, let's introduce some additional notation and use an operator approach. When $x_{i-1} < x_i$ we'll put an operator U , i.e. the sequence goes «up». Alternatively, when $x_{i-1} > x_i$ we'll put an operator D , i.e. the sequence goes «down». For our sample sequence, the corresponding operator sequence is:

1. 0.935536495
2. 0.191531578 D
3. 0.429049655 U
4. 0.308968021 D
5. 0.179540986 D
6. 0.401329789 U
7. 0.71581906 U
8. 0.604617962 D
9. 0.877254876 U
10. 0.973280207 U
11. 0.489033299 D
12. 0.912367351 U
13. 0.604552972 D
14. 0.039395302 D
15. 0.3780448 U
16. 0.55317569 U
17. 0.6308772 U
18. 0.373163479 D
19. 0.812434426 U
20. 0.560173882 D

We can apply our new notation to triplets and see that

(0,1,2) becomes $\langle UU \rangle$
 (0,2,1) and (1,2,0) become $\langle UD \rangle$
 (1,0,2) and (2,0,1) become $\langle DU \rangle$
 (2,1,0) becomes $\langle DD \rangle$.

Having a new notation, we can use it to compute the probability of appearance of a local maximum in the middle of any triplet. We are interested in triplets represented by $\langle UD \rangle$, because it's the only expression, which represents a local maximum in the middle of a triplet. We shall use a standard cumulative distribution function (CDF) $F(x)$, defined as a probability of $x \leq x_i$:

$$F(x_i) = \Pr(x \leq x_i) = \int_{-\infty}^{x_i} f(x) \cdot dx,$$

where $f(x)$ is PDF (probability density function) of x . This also could be written as

$$F(x_i) = \int_0^{F(x_i)} dF(x).$$

On the other hand, probability of $x > x_i$ is

$$\int_{F(x_i)}^1 dF(x) = 1 - F(x_i).$$

Now, we can write the following formula

$$\langle UD \rangle = \int_0^1 dF(x_{i-1}) \cdot \int_{F(x_{i-1})}^1 dF(x_i) \cdot \int_0^{F(x_i)} dF(x_{i+1}).$$

The first integral declares that the first number in a triplet $\langle UD \rangle$ can have any value. The next integral says that the number in the middle of a triplet should be greater than the first number. Finally, the third integral is for the trailing number of a triplet, which should be less than the previous number. It's easy to compute the probability as follows

$$\begin{aligned} \int_0^1 dF(x_{i-1}) \cdot \int_{F(x_{i-1})}^1 dF(x_i) \cdot \int_0^{F(x_i)} dF(x_{i+1}) &= \int_0^1 dF(x_{i-1}) \cdot \int_{F(x_{i-1})}^1 dF(x_i) \cdot F(x_i); \\ \int_0^1 dF(x_{i-1}) \cdot \int_{F(x_{i-1})}^1 dF(x_i) \cdot F(x_i) &= \int_0^1 dF(x_{i-1}) \cdot \left(\frac{1}{2} - \frac{F(x_{i-1})^2}{2} \right); \\ \int_0^1 dF(x_i - 1) \cdot \left(\frac{1}{2} - \frac{F(x_i - 1)^2}{2} \right) &= \frac{1}{2} - \frac{1}{6} = \frac{1}{3}. \end{aligned}$$

We got the same number in both combinatorial and operator approaches.

2. PMF of distances between local maxima

Now, it's time to advance our notation. Let's break up $\langle UD \rangle$ into pieces.

Definition 2. Operators $\langle, U, D \text{ and } \rangle$ are defined as

$$\begin{aligned} \langle \psi(x) &= \int_0^1 d\psi(x), \\ U \cdot \psi(x) &= \int_{z(x)}^1 d\psi(x) \cdot \psi(x), \\ D \cdot \psi(x) &= \int_0^{z(x)} d\psi(x) \cdot \psi(x), \\ \rangle &= 1. \end{aligned}$$

Armed with this notation let's look at any quintet of numbers from $i-1$ to $i+3$. If it happens so that the numbers come like $(0, 2, 1, 4, 3)$, then we got two local maxima $x_i=2$ and $x_{i+2}=4$. The distance between these maxima is $(i+2) - i=2$. This quintet can be represented by an expression $\langle UDUD \rangle$. Such quintet in our sample sequence can be found at $i=10$: ($x_9=0.877254876$, $x_{10}=0.973280207$, $x_{11}=0.489033299$, $x_{12}=0.912367351$, $x_{13}=0.604552972$).

Definition 3. If x_i is a local maximum, and the next nearest maximum is the number x_j , the the distance between maxima is $j-i$.

Now, we can compute the probability of the distance between local maxima equal to 2

$$\Pr(d=2) = f_m(2) = \frac{\langle UDUD \rangle}{P_{\max}} = \frac{\langle UDUD \rangle}{\langle UD \rangle}, \quad (1)$$

where d is a distance between local maxima and $f_m(d)$ is a probability mass function (PMF) of the distribution of these distances.

Notice the denominator. It is necessary to divide the probability of the quintet by the probability of the maximum in its first three numbers (triplet). Consider the quintet ($x_{10}=0.973280207$, $x_{11}=0.489033299$, $x_{12}=0.912367351$, $x_{13}=0.604552972$, $x_{14}=0.039395302$) from the sample sequence above. Its operator expression is $\langle DUDD \rangle$, which doesn't seem to represent two maxima on distance 2. Let's add the number

$x_9=0.877254876$ and look at the resulting sextet. This sextet's operator expression is $\langle UDUDD \rangle$. It starts with $\langle UDUD \rangle$. Clearly, our original quintet is a part of a sextet with two maxima on distance 2. Therefore, we have to take into account those quintets, which are not represented by $\langle UDUD \rangle$, but these quintets could be parts of sought quintets. Probability P_{\max} in denominator includes those quintets, which would be left unaccounted otherwise.

This formula can also be interpreted in terms of conditional probabilities as follows

$$\Pr(A|B) = \frac{\Pr(A \cap B)}{\Pr(B)}, \quad (2)$$

where event $A \cap B$ is a quintet with one maximum in its head and one maximum in its tail, event B is the maximum in first three numbers of a quintet, and event $A|B$ is two maxima on a given distance from each other.

Using the same methodology it's easy to show that the probability of the distance 3 is

$$\Pr(d=3) = f_m(3) = \frac{\langle UDUUD \rangle + \langle UDDUD \rangle}{P_{\max}} = \frac{\langle UDU^2D \rangle + \langle UD^2UD \rangle}{P_{\max}}. \quad (3)$$

In order to see why there are two terms in the numerator, consider these two sextets (0,2,1,3,5,4) and (0,3,2,1,5,4). The following is the table with formulae for the next 3 distances

$$\Pr(d=4) = f_m(4) = \frac{\langle UDU^3D \rangle + \langle UD^2U^2D \rangle + \langle UD^3D \rangle}{P_{\max}}; \quad (4)$$

$$\Pr(d=5) = f_m(5) = \frac{\langle UDU^4D \rangle + \langle UD^2U^3D \rangle + \langle UD^3U^2D \rangle + \langle UD^4UD \rangle}{P_{\max}}; \quad (5)$$

$$\Pr(d=6) = \frac{\langle UDU^5D \rangle + \langle UD^2U^4D \rangle + \langle UD^3U^3D \rangle + \langle UD^4U^2D \rangle + \langle UD^5UD \rangle}{P_{\max}}. \quad (6)$$

3. Results

In order to compute a probability of a given distance between maxima, we have to identify corresponding integrals, evaluate them and sum them up. For example, computing the probability of distance 4 involves evaluation, see equation 4. A simple analytical expression for the sums of integrals in numerators of the above probabilities was presented in [6]:

$$p(l) = 2^l \frac{(l-1)(l+1)}{(l+3)!}. \quad (7)$$

In [6] a set of similar problems are studied, e.g. permutation generated random walks, by using a different and more generic approach. However, the equation 7 can be used to derive the probability of distances between local maxima:

$$f_m(d) = \frac{p(l)}{P_{\max}} = 3 \cdot 2^d \frac{(d-1)(d+1)}{(d+3)!}. \quad (8)$$

We were not aware of this work, and in absence of a simple analytical expression for a sum of integrals in the PMF equations (such as 4), we wrote a Java program, which does all required work. First, it generates the necessary integrals using our operator notation, e.g. $\langle UDU^3D \rangle + \langle UD^2U^2D \rangle + \langle UD^3D \rangle$. Next, it evaluates the corresponding integrals and sums symbolically.

The resulting PMF table is shown in table. Variance of this distribution ≈ 1.167168 and the standard deviation ≈ 1.08 .

Table of PMF of distances between local maxima

Distance d	Probability $f_m(d)$	Decimal Approximation
2	2/5	0.4
3	1/3	0.3333333333333333
4	6/35	0.17142857142857143
5	1/15	0.06666666666666667
6	4/189	0.021164021164021163
7	1/175	0.005714285714285714
8	2/1485	0.0013468013468013469
9	4/14175	2.821869488536155E-4
10	4/75075	5.328005328005328E-5
11	2/218295	9.161913923818686E-6
12	4/2764125	1.4471125582236693E-6
13	1/4729725	2.114287828573543E-7
14	8/278326125	2.8743259368842937E-8
15	1/273648375	3.654324641978963E-9
16	2/4583103525	4.363855167334454E-10
17	8/162820783125	4.913377669887681E-11
18	4/764299911375	5.2335476433640715E-12
19	2/3781060408125	5.289521414950853E-13
20	4/78642438249375	5.0863122876684074E-14
21	2/428772250281375	4.664480965565126E-15
22	8/19566987612046875	4.088518968077954E-16
23	2/58274046742786875	3.432059573325511E-17
24	4/1447106344699640625	2.7641368684830376E-18
25	8/37392513326621578125	2.1394657080470717E-19
26	8/501914364595623354375	1.5938973985025013E-20
27	4/3494761822449632109375	1.1445701318770342E-21
28	8/100847608441898396203125	7.932761246003232E-23
29	1/188217886723358757890625	5.312991328341671E-24

$$\text{Total } \frac{2722885427931256697484374}{2722885427931256697484375} \quad 1 - 3.6725746509274224E-25.$$

We tested validity of a computed PDF table on several random and pseudo-random number sequences. For pseudo-random number sequences we used Java's standard pseudo-random generator `java.lang.Random` and Daniel Cer's Java implementation [1] of notorious RANDU generator [2]. We used Mads Haahr's True Random Number Service web site [3] as a source of «true» random numbers. We modified the supplied Java client, which connects to the server and retrieves the true random number batches. We generate random number sequences using these methods and compared them with the theoretical PMF using several tests such as Kolmogorov-Smirnov and χ^2 goodness of fit tests, see chapters 1.3.5.15 and 1.3.5.16 in [4].

Also, according to the central limit theorem in large samples the standard deviation of the average distance between maxima should approach $[(\sigma)/(\sqrt{n})]$, where σ is the standard deviation of the distances in the population and n is the size of the sample [5]. We used this feature to compare sample average distances to a theoretical average distance 3 [table 2].

As expected, `java.lang.Random`'s and «true» random sequences were consistent with our PMF on any sample sizes varying from 100 to 100,000,000. Surprisingly, RANDU-generated sequences were also compliant with this PMF. When deriving this PMF, we assumed that numbers in the sequences are independent of each other. RANDU generator has a well known deficiency: its numbers are not independent. However, as it was noted before, it fared well in our tests.

Table of CDF of distances between local maxima

Distance d	Cumulative Probability $F_m(d)$	Decimal Approximation
2	2/5	0.4
3	11/15	0.7333333333333333
4	19/21	0.9047619047619048
5	34/35	0.9714285714285714
6	134/135	0.9925925925925926
7	4717/4725	0.9983068783068783
8	5773/5775	0.9996536796536797
9	31183/31185	0.9999358666025333
10	184273/184275	0.9999891466558133
11	4729717/4729725	0.9999983085697371
12	16372121/16372125	0.999997556822954
13	30405374/30405375	0.999999671110782
14	241215974/241215975	0.999999958543376
15	32564156609/32564156625	0.999999995086623
16	36395233873/36395233875	0.999999999450477
17	343732764373/343732764375	0.999999999941815
18	3419236445623/3419236445625	0.99999999999415
19	142924083427117/142924083427125	0.99999999999944
20	782679504481871/782679504481875	0.999999999999949
21	4482618980214373/4482618980214375	0.999999999999996
22	53596531285171873/53596531285171875	≈ 1.0
23	[5341787618088796859/5341787618088796875]	
24	[17307391882607701871/17307391882607701875]	
25	[232984121496642140621/232984121496642140625]	
26	[3253148659416077296871/3253148659416077296875]	
27	[188217886723358757890609/188217886723358757890625]	
28	[1408389014447201740078117/1408389014447201740078125]	
29	[2722885427931256697484374/2722885427931256697484375]	

The table 3 shows sample statistics for «true» random and RANDU generated sequences compared to theoretical frequencies of distances between maxima. Both samples are distributed as predicted by theoretical PMF $f_m(d)$, they pass χ^2 goodness of fit test with higher than 0.99 probabilities. Their average distances are also within the $3\text{-}\sigma$ area of a theoretical value of 3. The p-value for the latter test is the probability of the deviation from the theoretical average distance greater than of the observed value.

Table 3

Sample Frequency Comparison

Distance	Theoretical Frequency	True Random Frequency	RANDU Frequency
2	40000	39803	40462
3	33333	33544	33003
4	17143	17119	17073
5	6667	6673	6545
6	2116	2139	2157
7	571	549	571
8	135	136	148
9	28	31	36

Distance	Theoretical Frequency	True Random Frequency	RANDU Frequency
10	5	3	5
11	1	2	0
12	0	1	0
Average	3	3.00187	2.99447
Std Dev of Mean	0.0034		
p-value		0.584	0.106
χ^2 , df		1.006, 10	1.386, 8
p-value		0.9998	0.9944

Conclusion 1. We constructed a simple method of computation of PMF of the distribution of distances between local maxima in random number series. We confirmed that selected pseudo-random and true random number sequences are distributed according to this PMF.

Acknowledgement 1. Author is very grateful to Dr. F.M.Pen'kov and Dr. K.Gartvig for fruitful discussions and interesting suggestions on this topic.

References

- 1 Daniel Cer, *RANDU.java*, <http://cer.freeshell.org/renma/highlight/renma/Randu/Randu.java>, 2005.
- 2 Donald E.Knuth. The Art of Computer Programming. — Vol. 2: Seminumerical Algorithms, 3rd edition. — Boston, Addison-Wesley, 1998.
- 3 Mads Haahr *True Random Number Service*, <http://random.org>
- 4 NIST/SEMATECH e-Handbook of Statistical Methods, <http://www.itl.nist.gov/div898/handbook/>
- 5 Wolfram *MathWorld*, <http://mathworld.wolfram.com/CentralLimitTheorem.html>
- 6 Oshanin G., Voituriez R., Nechaev S. et al. Random patterns generated by random permutations of natural numbers, 2006, <http://www.citebase.org/abstract?id=oai:arXiv.org:cond-mat/0609718>

А.Көкетаев

Кездейсоқ сандар тізбегінің локалді максимумдары арасындағы қашықтықтар ықтималдылығының таралуы

Кездейсоқ тәуелсіз сандардың тізбегі қарастырылған. Егер $x_{i-1} < x_i > x_{i+1}$ болса, онда x_i — локалді максимум. Мақалада массалық ықтималдылық функциясы (PMF) $f(d)$ d қашықтық пен локалді максимум арасында параметрлік емес екені көрсетілді. Бұл кез келген кездейсоқ сандардың тараулының ықтималдылығы үшін дұрыс. Орташа қашықтық 3-ке тең. PMF әдісінің санау әдісі келтірілді және оның деңгейі қашықтар үшін 2 және 29 арасында. Нәтиже кездейсоқ сандар тізбегінің қашықтықтарының таралуымен расталады. Олар кездейсоқ сандар псевдогенераторлар көмегімен жасалды немесе кездейсоқ сандардың табиғи көздерінен алынды.

А.Кукетаев

Распределение вероятности расстояний между локальными максимумами последовательности случайных чисел

Рассмотрена последовательность случайных независимых чисел. Если $x_{i-1} < x_i > x_{i+1}$, то x_i — локальный максимум. В работе показано, что функция массовой вероятности (PMF) $f(d)$ от расстояний d между локальными максимумами является непараметрической. Это справедливо для любого распределения вероятности случайных чисел в последовательности. Среднее расстояние точно 3. Представлены методика вычисления этого PMF и его уровень для расстояний между 2 и 29. Результат подтверждается для распределения расстояний пробной последовательности случайных чисел, которые были созданы псевдогенераторами случайных чисел или получены из «истинных» источников случайного числа.

А.К.Салькеева¹, Т.А.Кокетайтеги², Л.М.Ким², А.С.Балтабеков², Б.С.Тагаева²

¹ Карагандинский государственный технический университет;

² Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова (E-mail: abskargu@mail.ru)

Фотолюминесценция сульфатов щелочных металлов, активированных ионами редкоземельных элементов

В работе исследованы кристаллы и порошки K_2SO_4 и $LiKSO_4$, активированные ионами Sm и Gd. Установлено, что в кристаллах сульфата калия эти примесные ионы образуют два типа центров люминесценции, при нагревании один тип необратимо превращается в другой. Отмечено, что в $LiKSO_4$ ионы редкоземельных элементов образуют один тип центров. Образование двух типов центров в кристаллах K_2SO_4 связано с гидратацией или локальным механизмом компенсации заряда. Определено, что в $LiKSO_4$ механизм компенсации заряда нелокальный.

Ключевые слова: центры люминесценции, примесные ионы, редкоземельные элементы, гидратация, локальный механизм компенсации зарядов, сульфат калия.

При активации диэлектрических кристаллов гетеровалентными примесными ионами возникают дополнительные вакансии, компенсирующие избыточные заряды. Компенсация может быть локальной, когда вакансии располагаются в ближайшем окружении примесного центра, и нелокальной. Примесные ионы, взаимодействующие с окружением, образуют центр люминесценции. Следовательно, механизм компенсации избыточного заряда оказывает существенное влияние на оптические характеристики примесных центров свечения. Например, при локальной компенсации заряда в галоидах щелочных металлов, активированных двухвалентными катионами, центр свечения рассматривается как диполь $Me^{2+}V_c^-$ [1].

Объектами исследования в данной работе являются сульфаты щелочных металлов, активированные трехвалентными ионами самария и гадолиния. Исходные кристаллы K_2SO_4 и $LiKSO_4$ были выращены из насыщенных водных растворов методом изотермического испарения растворителя при 40°C. Активаторы добавлялись в исходный раствор в виде водорастворимых солей. Выбор редкоземельных ионов (РЗИ) в качестве люминесцентных зондов обусловлен тем, что их оптические свойства формируются f-d переходами [2]. Они экранируются валентными электронами, поэтому только сильное возмущение в ближайшей координационной сфере оказывает влияние на оптические характеристики примесных центров. По всем справочным данным указанные выше сульфаты щелочных металлов не гидратируются. Введение в кристаллическую решетку трехвалентных примесных ионов приводит к образованию большого числа дополнительных вакансий. При росте образцов из водных растворов в эти вакансии могут захватываться молекулы воды. Эти нейтральные молекулы могут выполнять роль компенсатора избыточного заряда у примесных ионов. При термической обработке молекулы воды частично можно удалить. Об этом свидетельствуют изменения кривых термостимулированной люминесценции сульфата калия и литий-калий сульфата, активированных ионами РЗИ, до и после подобной процедуры [3, 4].

Спектрально-люминесцентные исследования проведены по стандартной методике. Для фотовозбуждения образцов использована лампа ЛД (D)-400. Во все приведенные ниже спектры возбуждения люминесценции и излучения внесены аппаратные поправки, учитывающие спектральное распределение лампы возбуждения и спектральную чувствительность ФЭУ [5].

Измерения спектров поглощения полученных монокристаллов при комнатной температуре показали, что в кристалле K_2SO_4 -Sm имеются три полосы оптического поглощения. Их максимумы находятся при 4,30; 4,48 и 5,49 эВ. В спектре поглощения кристалла K_2SO_4 -Gd в области прозрачности матрицы появились также три полосы поглощения с максимумами при 4,36; 4,58 и 5,54 эВ. Для обоих образцов $LiKSO_4$, активированных ионами самария и гадолиния, в области прозрачности матрицы наблюдаются широкие полосы оптического поглощения с максимумами при 5.15 и 5.27 эВ соответственно.

На рисунке 1 приведены спектры излучения и возбуждения фотолюминесценции для кристалла K_2SO_4 -Sm. При возбуждении кристалла сульфата калия, активированного ионами самария, в полосах поглощения возникает фотолюминесценция. На рисунке 1 а представлен спектр излучения, измеренный при возбуждении данного образца в области 4.1 эВ, т.е. на длинноволновом крае первой полосы

поглощения. В этом случае в основном возбуждается излучение, максимум которого находится при 3.12 эВ. Вид коротковолнового крыла данной полосы излучения показывает наличие второй, более коротковолновой полосы фотолюминесценции. Здесь же приведен спектр возбуждения для полосы излучения с максимумом при 3.12 эВ, измеренный при регистрации излучения в области 3.0 эВ.

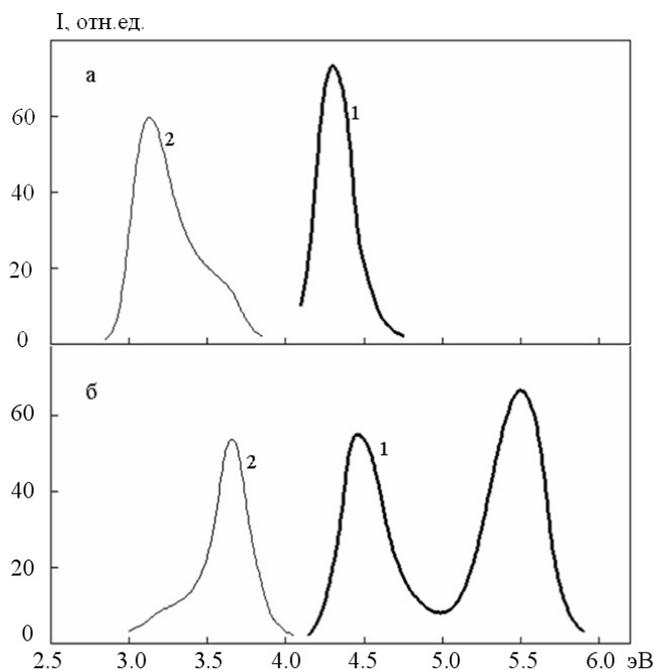


Рисунок 1. Спектры возбуждения (1) и излучения (2) при 80 К для кристалла K_2SO_4-Sm

Такой способ измерения спектра возбуждения обусловлен стремлением уменьшить влияние второй полосы в спектре фотолюминесценции данного кристалла. На рисунке 1 б приведены спектры излучения и возбуждения фотолюминесценции для второй полосы излучения. Спектр излучения измерялся при возбуждении кристалла K_2SO_4-Sm в области 5.55 эВ. Доминирующая полоса излучения в этом случае имеет максимум при 3.54 эВ. Спектр возбуждения для этой полосы фотолюминесценции измерен при регистрации сигнала в области 3.65 эВ. Сравнение результатов, приведенных на рисунке 1 а, б, показывает, что длинноволновая фотолюминесценция эффективно возбуждается в первой (длинноволновой) полосе поглощения, в двух остальных полосах поглощения возбуждается более коротковолновое излучение. Таким образом, спектры поглощения, возбуждения и излучения люминесценции показывают наличие в изучаемой матрице двух типов центров свечения ионов самария. Для кристалла K_2SO_4-Gd были проведены измерения спектров излучения и возбуждения фотолюминесценции. Как и в кристаллах, активированных ионами самария, наблюдаются две полосы излучения. Их максимумы лежат в области 3,30 эВ и 3,75 эВ. Первая полоса излучения является доминирующей при возбуждении в длинноволновой полосе поглощения.

Таким образом, ионы гадолиния, подобно ионам самария, образуют два типа примесных центров. Этот вывод согласуется с результатами измерений кривых температурного тушения фотолюминесценции. Они для двух наблюдаемых полос излучения качественно различны. На рисунке 2 приведены кривые температурного тушения фотолюминесценции кристалла K_2SO_4-Gd . Выход свечения в полосе излучения фотолюминесценции с максимумом при 3.30 эВ практически не зависит от температуры в области 80–160 К, а затем испытывает температурное тушение. Излучение с максимумом 3.75 эВ испытывает сильное температурное тушение в области 80–240 К, и выше 240К практически не наблюдается. Различный вид кривых температурной зависимости относительного выхода фотолюминесценции представляет собой дополнительный и неоспоримый аргумент в пользу существования в изучаемом образце двух типов примесных центров свечения. Установлено, что кривые температурного тушения, как и в случае образцов с примесью ионов самария, не описываются эмпирическим законом Мотта.

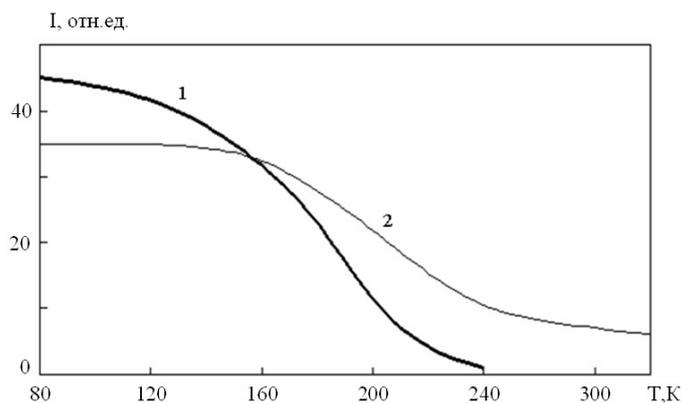


Рисунок 2. Кривые температурного тушения фотолюминесценции кристалла K_2SO_4-Gd в коротковолновой (1) и длинноволновой (2) полосах излучения

Два типа примесных центров люминесценции в матрице сульфата калия, активированных трехвалентными ионами самария и гадолиния, могут возникнуть по двум причинам: из-за неэквивалентности катионных узлов кристаллической решетки или существенных различий в ближайшем окружении примесных ионов.

На рисунке 3 представлены спектры излучения сульфата калия, активированного ионами самария. Эти результаты получены на порошкообразных образцах при температуре 80 К. Образцы возбуждались квантами с энергией 4.40 эВ. При таком выборе полосы возбуждения в спектре фотолюминесценции хорошо проявляются обе полосы излучения. Термическая обработка проводилась при 600 °С. Из рисунка видно, что с увеличением длительности термической обработки в обоих образцах интенсивность длинноволновой люминесценции уменьшается практически до полного исчезновения. Подобное поведение спектра излучения предполагает, что в активированных кристаллах исчезают длинноволновые полосы поглощения. Перескоком примесных ионов из катионного узла одного типа в другой объяснение данного явления представляется маловероятным. Кристаллы выращиваются в условиях термодинамического равновесия. Если при более высоких температурах термодинамическое равновесие достигается перескоком примесных ионов из катионных узлов одного типа в другой, то при понижении температуры должны идти релаксационные процессы, возвращающие систему в исходное состояние. Экспериментально установлено, что после термической обработки и длительного хранения образца при комнатной температуре в сухой атмосфере исходный вид спектров излучения не восстанавливается.

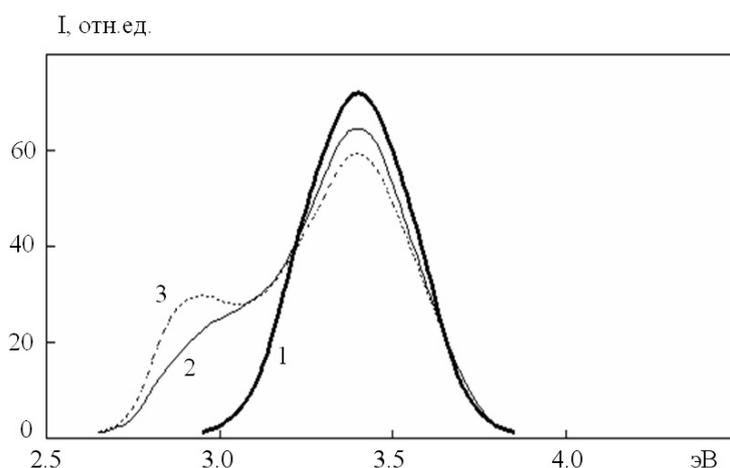


Рисунок 3. Спектр излучения кристалла K_2SO_4-Sm до (1) и после термической обработки при 600 °С. Длительность термической обработки составляет 1 час (2) и 3 часа (3)

Результаты, аналогичные приведенным на рисунке 3, получены для порошкообразных образцов для сульфата калия, активированного ионами гадолиния.

Трехвалентные ионы Sm и Gd замещают в кристаллической решетке изучаемой матрицы катионы K^+ . Для компенсации избыточного заряда на каждый примесный ион должны возникать две катионные вакансии. Влияние термической обработки на спектрально-люминесцентные свойства сульфата калия, активированного ионами самария или гадолиния, нами связывается с наличием в кристаллической решетке молекул воды. В две расположенные рядом катионные вакансии, которые компенсируют избыточный заряд примесного иона, может быть захвачена молекула воды. Молекула структурной воды не имеет электрического заряда. Поэтому, когда молекулы воды размещаются в катионной подрешетке, они компенсируют избыточный заряд гетеровалентного примесного катиона. Строение кристаллической решетки сульфата калия и размеры молекулы воды позволяют этому реализоваться. При термической обработке часть или все молекулы структурной воды удаляются. Это и приводит к изменениям в спектрах оптического поглощения, возбуждения и излучения фотолюминесценции.

Особенностью редкоземельных элементов является незаполненная f-оболочка, которая экранируется валентной электронной оболочкой. Из этого следует, что небольшие вариации в ближайшем окружении примесных редкоземельных элементов не сильно влияют на их оптические свойства. Изменения координационного числа по атомам кислорода у катионных узлов не должны приводить к столь существенным различиям в оптических свойствах двух типов примесных центров. Молекула воды обладает дипольным моментом. В результате они могут взаимодействовать с примесными редкоземельными ионами, что и приводит к наблюдаемым оптическим спектрам. При термической обработке образцов примесные центры, взаимодействующие с молекулами структурной воды, исчезают. Существенные различия в оптических спектрах двух типов примесных центров, создаваемых ионами одной природы, позволяют утверждать, что компенсация избыточного заряда имеет локальный характер.

На рисунке 4 приведены спектры возбуждения и излучения фотолюминесценции кристаллов $LiKSO_4-Sm$ и $LiKSO_4-Gd$ при 80 К.

Люминесценция кристалла $LiKSO_4-Sm$ при фотовозбуждении имеет максимум при 3.85 эВ. Полоса излучения примесных ионов самария не меняется при изменении энергии возбуждающих квантов в пределах полосы поглощения. Это подтверждается измерениями спектра возбуждения для данной люминесценции.

Аналогичные результаты получены при измерениях спектров излучения и возбуждения фотолюминесценции в кристаллах $LiKSO_4-Gd$. Максимум полосы излучения наблюдается при температуре жидкого азота при 4.05 эВ.

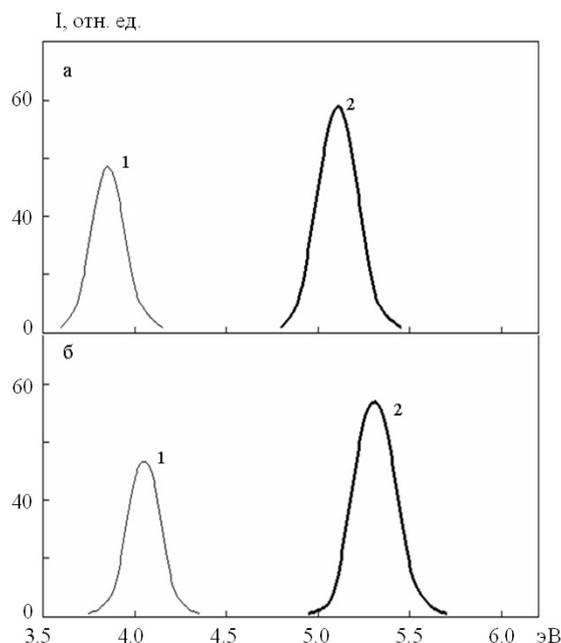


Рисунок 4. Спектры излучения (1) и возбуждения (2) при 80 К для кристаллов $LiKSO_4-Sm$ (а) и $LiKSO_4-Gd$ (б)

Независимость спектров излучения от энергии падающих квантов в пределах оптической полосы примесного поглощения позволяет утверждать, что в изучаемых кристаллах образуется один тип примесных центров люминесценции, и асимметрия формы полос поглощения обусловлена особенностями взаимодействия ионов редкоземельных элементов с кристаллообразующими частицами матрицы.

В кристалле LiKSO_4 два неэквивалентных катионных узла: один имеет тетраэдрическое, а второй — октаэдрическое окружение из атомов кислорода [6]. Примесные ионы замещают в решетке катионы. Избыточный заряд компенсируется катионными вакансиями. В решетке сульфата калия имеет место локальная компенсация избыточного заряда примесных ионов. В сульфате калия ряд наблюдаемых явлений объясняется тем, что локальная компенсация избыточного заряда примесных ионов осуществляется молекулами структурной воды. В результате в этом кристалле возникают два типа примесных центров свечения с различными спектрально-люминесцентными свойствами. Приведенные экспериментальные результаты показывают, что в кристаллах LiKSO_4 ионы самария и гадолиния создают один тип центров люминесценции.

Примесные ионы редкоземельных элементов менее чувствительны к изменениям в ближайшем окружении, чем ионы другого типа. Образование одного типа центров свечения предполагает ряд альтернативных гипотез или их комбинации: примесные ионы замещают катионы только в определенных узлах кристаллической решетки, кристаллы LiKSO_4 с примесными ионами не гидратируются, с этими примесными ионами реализуется нелокальная компенсация заряда.

При гидратировании активированных кристаллов сульфата калия их спектрально-люминесцентные свойства меняются при термической обработке. Кристаллы LiKSO_4 , активированные ионами самария и гадолиния, подвергались длительной (до 24 часов) термической обработке при температурах 250–300 К, а порошкообразные — при 600 °С или переплавлялись. Измерения спектров поглощения для монокристаллов или спектров излучения и возбуждения фотолюминесценции дали результаты, аналогичные приведенным на рисунке 4. Следовательно, объекты исследования в процессе роста из насыщенных водных растворов не гидратируются или наблюдается незначительное гидратирование. Однако известно, что кривые термостимулированной люминесценции данных образцов качественно сильно меняются при термической обработке [3, 4].

Таким образом, в кристаллах сульфата калия реализуется локальный механизм компенсации избыточного заряда, а в сложном сульфате лития и калия — нелокальный. В первом образце молекулы воды играют роль компенсатора заряда.

Данная работа выполнена при поддержке Фонда фундаментальных исследований МОН РК по гранту № Ф. 05–08.

References

- 1 *Gurvich A.M.* Introduction in physical chemistry of crystalphosphors. — М.: Nauka (Russia), 1982. — 375 p.
- 2 *Marphuni A.S.* Spectroscopy, luminescence and the radiating centers in minerals. — М.: Nedra (Russia), 1975. — 324 p.
- 3 *Salkeeva A.K., Kim L.M., Kuketaev T.A.* Influence of thermal processing on recombination luminescence of potassium sulfate doped by ions of gadolinium // *Izvestiya Vuzov.* — Fizika (Russia). — 2006. — Vol. 49. — № 6. — P. 89–90.
- 4 *Kim L.M., Salkeeva A.K.* Influence of ions of a samarium and a gadolinium on radiolysis potassium sulfate // *Vestnik KarGU. Ser. Chemistry (Kazakhstan).* — 2007. — P. 14–18.
- 5 *Epstein M.I.* Spectral measurements in the electrovacuum technics. — М.: Nauka (Russia), 1970. — 160 p.
- 6 *Aleksandrov K.S., Beznosikov B.V.* Structural phase transitions in crystals (family of potassium sulfate). — Novosibirsk: Nauka (Russia), 1993. — 287 p.

А.К.Салкеева, Т.Ә.Көкетайтегі, Л.М.Ким, А.С.Балтабеков, Б.С.Тағаева

Жерде сирек кездесетін элементтердің иондарымен активтендірілген сілтілі металдар сульфаттарының фотолюминесценциясы

Зерттеу нысандары Sm және Gd иондарымен активтендірілген K_2SO_4 және LiKSO_4 кристалдары мен ұнтақтары болып табылады. Калий сульфаттары кристалдарында аталған коспалық иондар екі түрлі люминесценция орталықтарын түзетіні тағайындалды. Қыздыру барысында бір түрдегі орталық қайтымсыз түрде екіншіге ауысады. LiKSO_4 кристалдарында жерде сирек кездесетін элементтердің иондары бір түрлі орталықтар түзеді. K_2SO_4 кристалдарында екі түрлі орталықтардың түзілуі

гидратациямен немесе зарядтың локальді механизм бойынша компенсациялануымен байланыстырылады. LiKSO_4 кристалдарында зарядтың компенсациялану локальді емес.

A.K.Salkeeva, T.A.Koketaitegi, L.M.Kim, A.S.Baltabekov, B.S.Tagueva

Photoluminescence of alkaline metals sulphates doped by ions of rare-earth elements

The objects of research are crystals and powders K_2SO_4 and LiKSO_4 , activated by ions Sm and Gd. It is established that in crystals of potassium sulphate these impurity ions form two types of luminescence centers. At heating one kind transforms to another irreversibly. In LiKSO_4 ions of rare-earth elements form one kind of the centers. Formation of two kinds of the centers in crystals K_2SO_4 contacts hydration or the local mechanism of charge indemnification. In LiKSO_4 the mechanism of charge indemnification is not local.

В.М.Юров¹, Е.Н.Вертягина², С.А.Гученко¹

¹Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова (E-mail: exciton@list.ru);

²Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева, Астана (E-mail: Vertyagina_EN@enu.kz)

Влияние ионного облучения на структуру и свойства композиционных покрытий

В работе приведены результаты исследования ионного облучения композиционных многофазных покрытий. Для исследования поверхности покрытий использовался атомно-силовой микроскоп NT-206. Использовалось осаждение многофазных покрытий на ионно-плазменной установке. Облучение покрытий осуществлялось ионами аргона с помощью источника ионов с полым катодом. Отмечено, что после ионного облучения структура и механические свойства покрытий изменяются, но характер изменений отличается для различных покрытий. Предложена статистическая модель образования скопления дефектов при облучении большими дозами радиации.

Ключевые слова: ионное облучение, композиционные покрытия, атомно-силовой микроскоп, ионно-плазменная установка, ионы аргона, скопление дефектов, дозы радиации.

Введение

Основное влияние ионной бомбардировки на свойства покрытий осуществляется на стадии их зарождения вследствие релаксации напряжений в области ионного удара и перестройки кристаллической структуры. При этом на поверхности образуются точечные дефекты, которые являются активными центрами адсорбции. Важную роль также играет подвижность адатомов на поверхности (поверхностная диффузия), которая усиливается при низкоэнергетической бомбардировке растущей пленки ионами инертного газа. Увеличить количество образующихся точечных дефектов можно увеличением либо энергии потока ионов, либо плотности тока ионов. Одновременно с образованием дефектов идет и обратный процесс их рекомбинации — «отжиг», который снижает концентрацию дефектов. В результате этих двух процессов устанавливается равновесное количество центров зародышеобразования, на которое можно влиять, изменяя параметры ионного облучения.

В настоящей работе приведены результаты исследования ионного облучения композиционных многофазных покрытий, о структуре и свойствах которых мы сообщали в работах [1–4].

Образцы и методика эксперимента

При проведении экспериментов нами использовались композиционные катоды, полученные методом индукционного плавления на установке ИСЭ СО РАН (г. Томск). С помощью этих катодов наносились покрытия на ионно-плазменной установке ННВ — 6.6И1 на стальную подложку при различных технологических режимах.

Для исследования поверхности покрытий в наномасштабе нами использовался атомно-силовой микроскоп NT-206 международной кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий Евразийского национального университета им. Л.Н.Гумилева.

Для нанесения нанопокровтий используются следующие основные технологические подходы: 1) осаждение покрытий в условиях ионного ассистирования; 2) осаждение многослойных покрытий со слоями нанометрической толщины; 3) осаждение многофазных покрытий; 4) комбинация перечисленных способов. Нами использовалось осаждение многофазных покрытий в условиях ионного ассистирования.

Перед нанесением покрытий в вакуумной камере производилась очистка подложек сначала тлеющим разрядом, для чего на подложку подавалось напряжение 1–3 кВ в течение 5–10 мин, затем ионная очистка деталей. Для этого камеру откачивают до давления $5 \cdot 10^{-5}$ мм рт. ст., через натекагель подают чистый аргон до давления $3\text{--}5 \cdot 10^{-4}$ мм рт. ст. и устанавливают напряжение разряда 700–800 В, напряжение на мишени 1–3 кВ. Ионная очистка проводилась в течение 15–20 мин. Напыление шло при давлении $5 \cdot 10^{-5}$ мм рт. ст., при достижении которого в камеру подавался аргон до давления $5\text{--}8 \cdot 10^{-4}$ мм рт. ст., устанавливалось напряжение 900–1000 В. Напыление проводилось в течение 15–

20 мин. Температура подложки контролировалась хромель-алюмелевой термопарой, прикрепленной непосредственно к подложке.

Ниже использованы следующие обозначения композиционных катодов: № 2 — Cr-Mn-Si-Cu-Fe-Al; № 3 — Zn-Al; № 4 — Zn-Cu-Al; № 5 — Mn-Fe-Cu-Al; D — Al-Fe.

Измерения параметров модуля упругости покрытий выполнялись с использованием АСМ. Основной измерительный элемент АСМ — зонд. Для определения модуля упругости регистрируют процесс вдавливания зонда в виде диаграммы «нагрузка на зонд — глубина вдавливания». Значение модуля упругости покрытия находят по углу наклона кривой «нагрузка — глубина вдавливания». От глубины вдавливания и упругости покрытия зависит изгиб микроконсоли зонда при сближении с поверхностью образца.

Выбор параметров измерения — положения и диапазона сближения «зонд–образец», количества точек измерения и осреднения — производят из панели силовой спектроскопии АСМ. Система прибора перемещает образец к зонду, контролируя положение образца. При этом регистрируется параметр изгиба консоли зонда в единицах электрического сигнала на фотодетекторе (Z_{def}^*). Предполагается, что постоянный сигнал в начальной стадии сближения соответствует положению острия зонда в свободном состоянии, т.е. неизогнутой консоли зонда. Образец постепенно сближается с зондом в пределах предварительно установленного диапазона за счет вертикального движения (расширения) пьезосканера и затем удаляется (при сжатии пьезосканера) с равными шагами. По результатам измерений строится зависимость изгиба консоли от параметра расстояния (положения зонда) Z_{pos} .

Измеренные данные отображают в графическом виде, а также в текстовом файле для использования при численной обработке.

Результаты индентирования оценивают на основании зависимости глубины индентирования δ от величины приложенной нагрузки P . Проведенные нами оценки показывают, что деформацию покрытий в данном диапазоне можно считать упругой. В таком случае модуль упругости образца можно рассчитать исходя из теории Герца:

$$E = \frac{(3/4) \cdot (1 - \nu^2) \cdot P}{\sqrt{R} \cdot \delta^2},$$

где ν — коэффициент Пуассона образца (для стали $\nu = 0,25$, для резины $\nu = 0,5$, для остальных материалов $\nu = 0,3$); $P = kZ_{\text{def}}$, $\delta = Z_{\text{pos}} - Z_{\text{def}}$; δ — глубина индентирования поверхности покрытия; $Z_{\text{def}} = cZ_{\text{def}}^*$; c — нормировочный коэффициент, который определяется экспериментально. Здесь не учитывается модуль упругости алмазного индентора, поскольку можно предположить, что он намного выше величины модуля упругости для исследуемого образца.

Параметры шероховатости для участка поверхности, отображаемого анализируемым АСМ-изображением, а также прочие статистические характеристики вычислялись по следующим соотношениям:

1) среднеарифметическая шероховатость:

$$R_a = \frac{1}{N_x \cdot N_y} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{i=0}^{N_x-1} |Z_{i,j} - \bar{Z}|, \quad \text{где} \quad \bar{Z} = \frac{1}{N_x \cdot N_y} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{i=0}^{N_x-1} Z_{i,j},$$

а $Z_{i,j}$ — регистрируемая величина отклонения зонда по вертикали при прохождении его по поверхности образца; N_x — количество столбцов АСМ-матрицы; N_y — количество строк АСМ-матрицы;

2) среднеквадратичное отклонение:

$$R_q = \left(\frac{1}{N_x \cdot N_y} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{i=0}^{N_x-1} (Z_{i,j} - \bar{Z})^2 \right)^{1/2};$$

3) асимметрия распределения высот:

$$R_{sk} = \frac{1}{N_x \cdot N_y \cdot R_q^3} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{i=0}^{N_x-1} (Z_{i,j} - \bar{Z})^3;$$

4) эксцесс распределения высот:

$$R_{ku} = \frac{1}{N_x \cdot N_y \cdot R_q^4} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{i=0}^{N_x-1} (Z_{i,j} - \bar{Z})^4$$

Облучение покрытий ионами аргона проводилось с помощью многоамперного источника ионов с полым катодом. Ток в дуге составлял 1 А, а потенциал на подложке поддерживался равным 300 В.

Результаты эксперимента

На рисунках 1–8 показаны АСМ-изображения поверхности композиционных покрытий до и после облучения, полученные в режиме латерально-силовой микроскопии (одновременно с контактной статической АСМ).

На рисунках 9–16 приведены гистограммы распределения хиллококов по высоте.

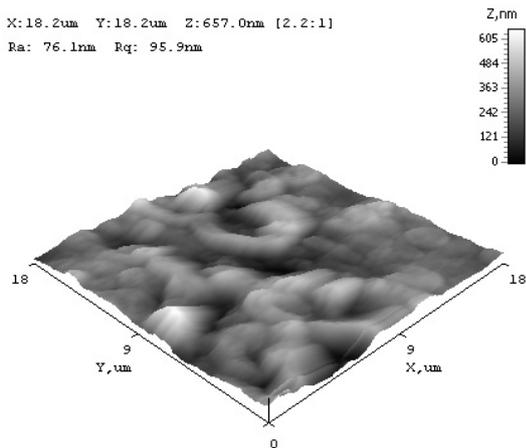


Рисунок 1. АСМ-изображение поверхности покрытия Fe-Al (до облучения)

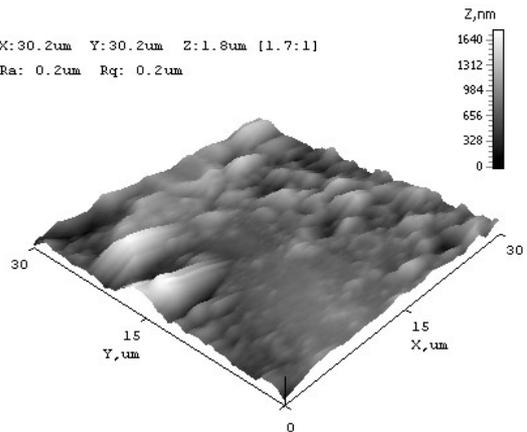


Рисунок 2. АСМ-изображение поверхности покрытия Fe-Al (после облучения)

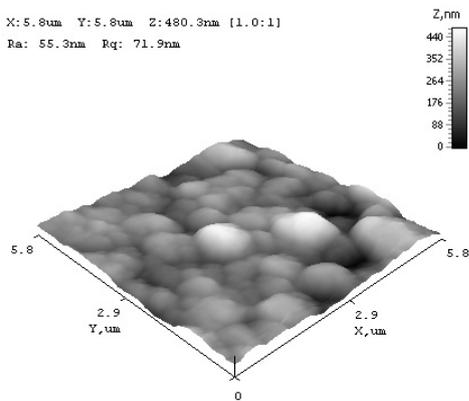


Рисунок 3. АСМ-изображение поверхности покрытия Zn-Al (до облучения)

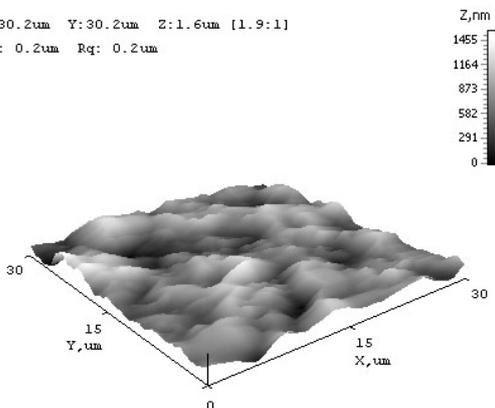


Рисунок 4. АСМ-изображение поверхности покрытия Zn-Al (после облучения)

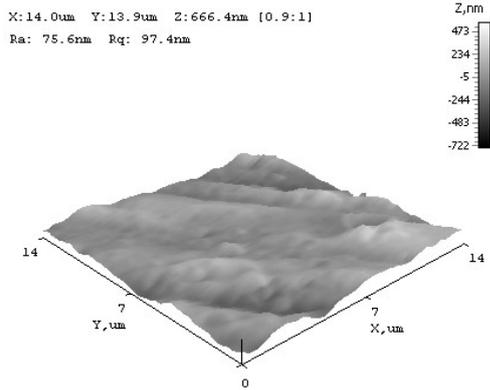


Рисунок 5. АСМ-изображение поверхности покрытия Cr-Mn-Si-Cu-Fe-Al (до облучения)

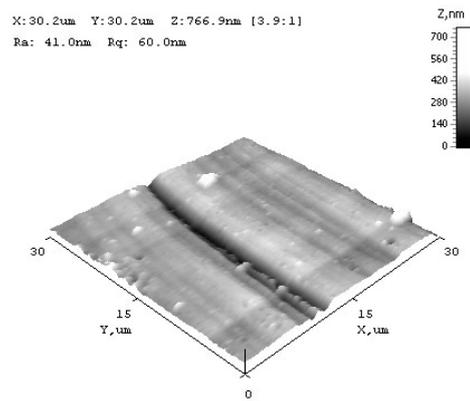


Рисунок 6. АСМ-изображение поверхности покрытия Cr-Mn-Si-Cu-Fe-Al (после облучения)

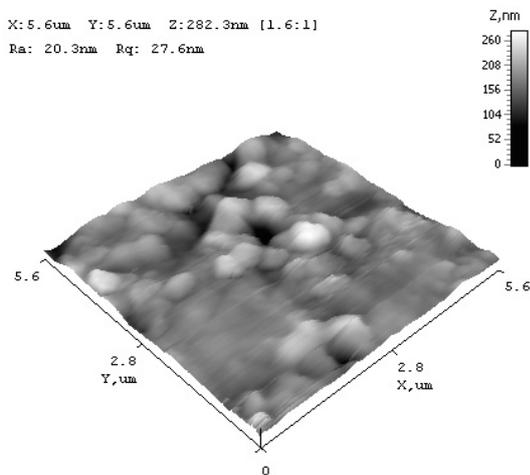


Рисунок 7. АСМ-изображение покрытия Mn-Fe-Cu-Al (до облучения)

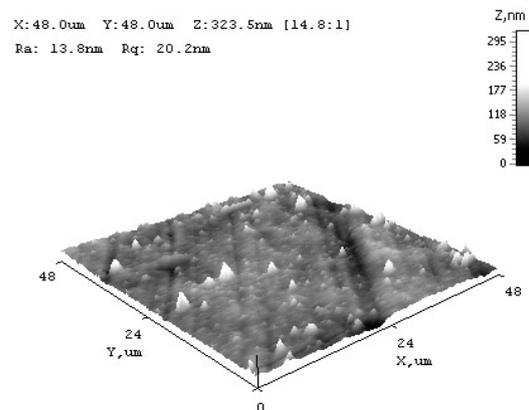


Рисунок 8. АСМ-изображение покрытия Mn-Fe-Cu-Al (после облучения)

Таблица 1

Измерение модуля Юнга методом наноиндентирования

Покрытие	После облучения	До облучения
	Е, ГПа	Е, ГПа
Cr-Mn-Si-Cu-Fe-Al	1	0,5
Zn-Al	0,6	0,6
Mn-Fe-Cu-Al	0,1	0,3
Fe-Al	0,2	0,7

Таблица 2

Шероховатость покрытия R_a

Покрытие	После облучения	До облучения
	R_a , нм	R_a , нм
Cr-Mn-Si-Cu-Fe-Al	22,26	13,34
Zn-Al	76,39	78,0
Mn-Fe-Cu-Al	23,08	29,89
Fe-Al	147,06	56,14

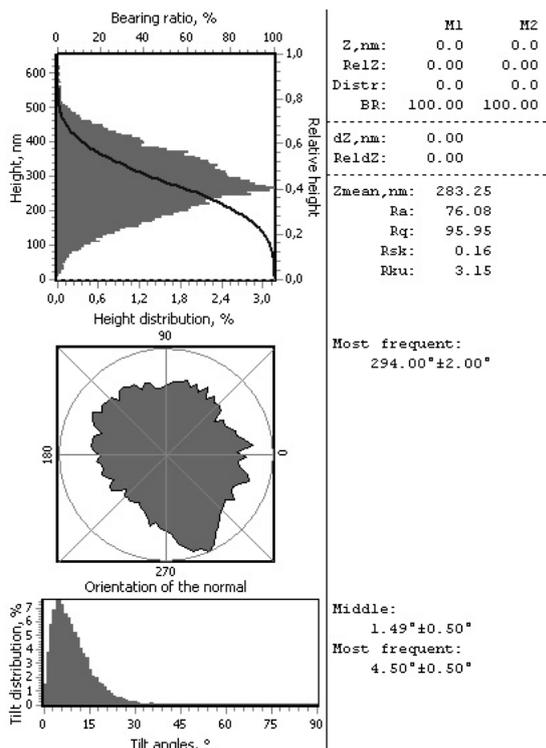


Рисунок 9. Гистограмма распределения хиллококов по высоте для покрытия Fe-Al (до облучения)

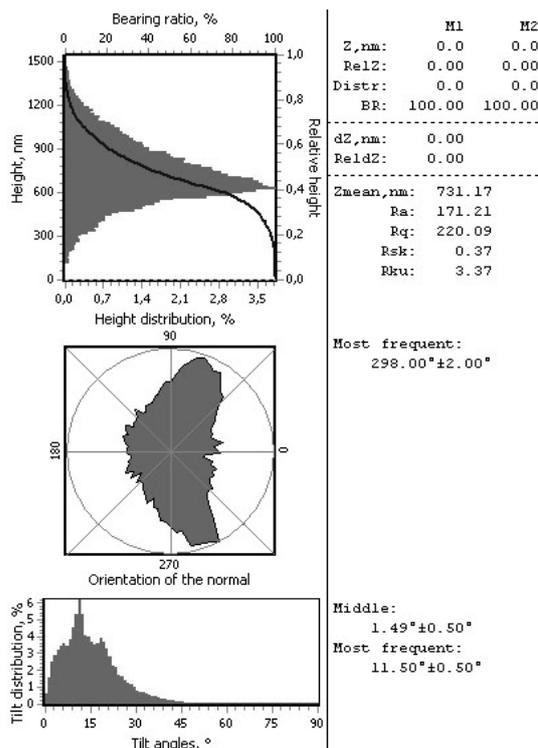


Рисунок 10. Гистограмма распределения хиллококов по высоте для покрытия Fe-Al (после облучения)

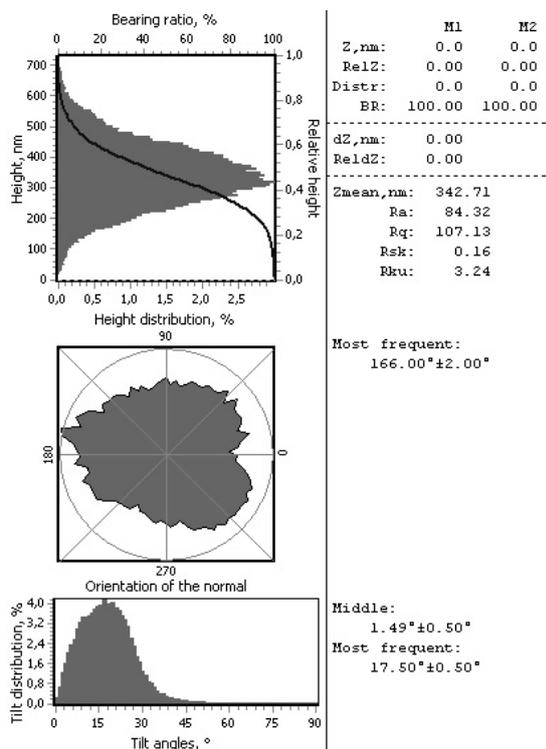


Рисунок 11. Гистограмма распределения хиллококов по высоте для покрытия Zn-Al (до облучения)

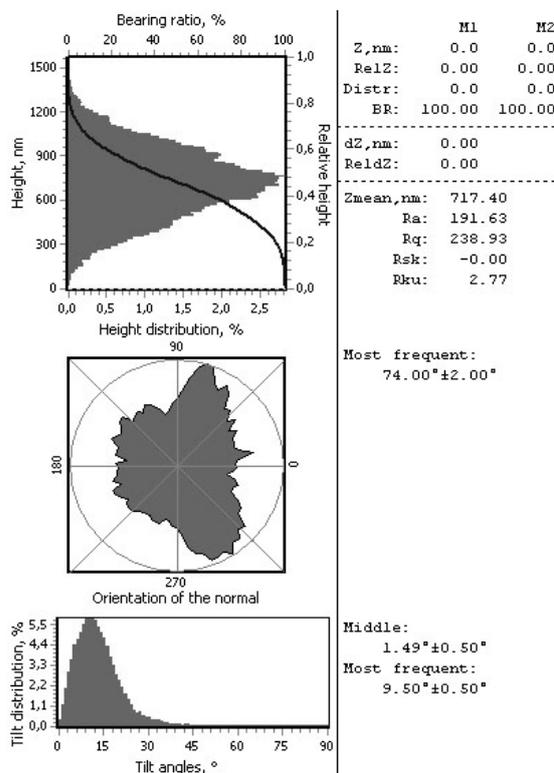


Рисунок 12. Гистограмма распределения хиллококов по высоте для покрытия Zn-Al (после облучения)

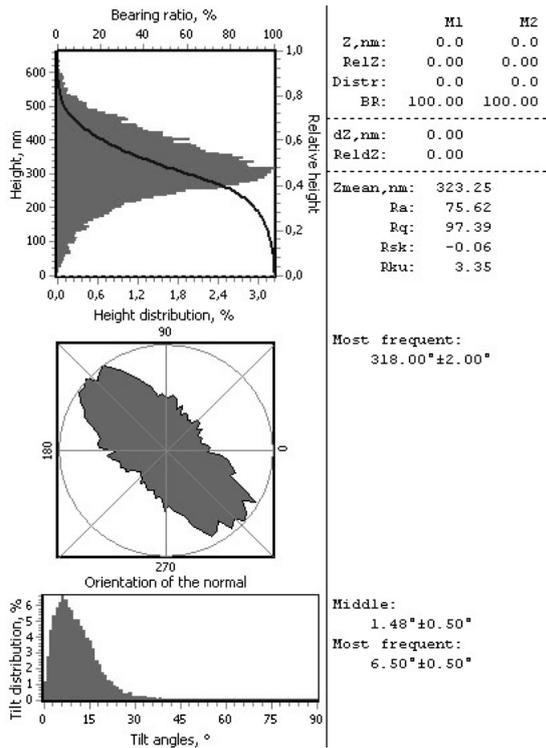


Рисунок 13. Гистограмма распределения хиллококов по высоте для покрытия Cr-Mn-Si-Cu-Fe-Al (до облучения)

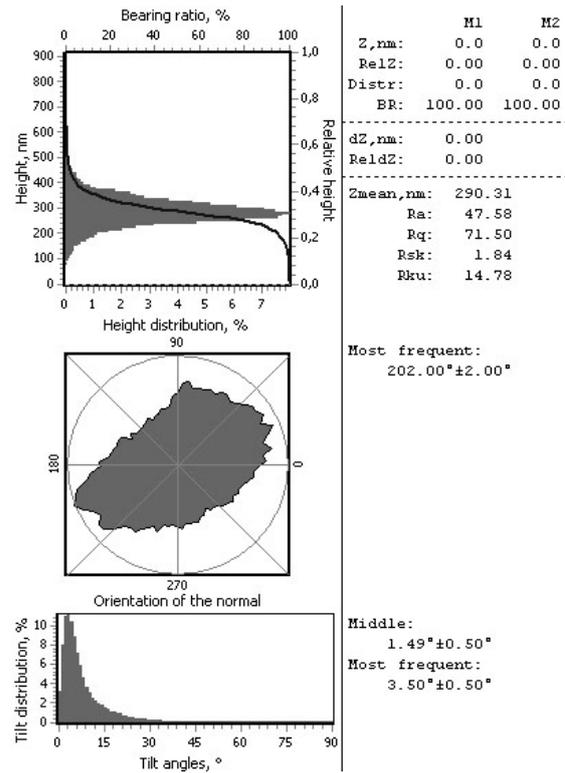


Рисунок 14. Гистограмма распределения хиллококов по высоте для покрытия Cr-Mn-Si-Cu-Fe-Al (после облучения)

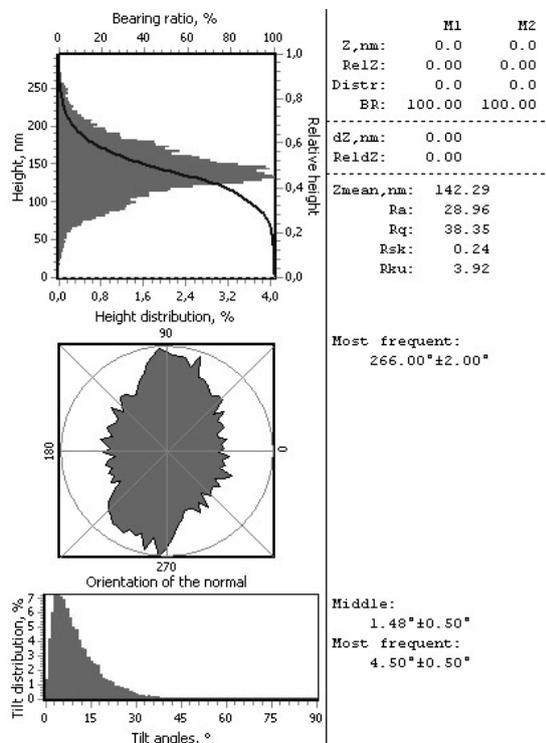


Рисунок 15. Гистограмма распределения хиллококов по высоте для покрытия Mn-Fe-Cu-Al (до облучения)

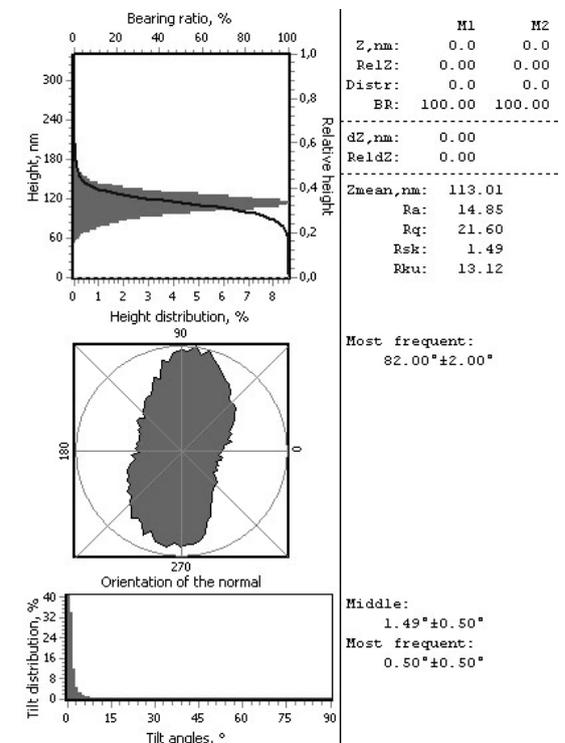


Рисунок 16. Гистограмма распределения хиллококов по высоте для покрытия Mn-Fe-Cu-Al (после облучения)

Обсуждение результатов эксперимента

Из рисунков 1–16 следует, что ионное облучение влияет и на структуру покрытий, и на распределение хиллококов по высоте. Исключение составляет покрытие Zn-Al, которое оказалось радиационно-стойким. Это отчетливо видно на рисунках 3, 4 и 11, 12. С полученным результатом коррелирует и значение модуля Юнга, измеренного до и после облучения.

Такое поведение покрытия Zn-Al связывается нами с его ярко выраженной глобулярной структурой (рис. 3). Наличие такой системы «шаров» приводит к упругому рассеянию ионов аргона, так что локальная деформация оказывается незначительной. Это находит свое отражение в поведении модуля Юнга, который не изменяется в процессе облучения (табл. 1), и параметре шероховатости (табл. 2).

Структура покрытия Fe-Al резко отличается от структуры покрытия Zn-Al. В этом случае мы наблюдаем незамкнутые наноструктуры (рис. 1). Шероховатость этого покрытия после облучения увеличивается почти в три раза, в то время как модуль Юнга уменьшается во столько же раз.

Такое же поведение модуля Юнга наблюдается и для покрытия Mn-Fe-Cu-Al. Причина этого заключается в том, что содержание марганца и меди в покрытии значительно меньше, чем в соответствующем катоде. На рисунке 17 показан спектр РФЭС (рентгенофотоэлектронный спектр), и в таблице 3 представлено содержание элементов в покрытии, полученном с помощью электрода Mn-Fe-Cu-Al.

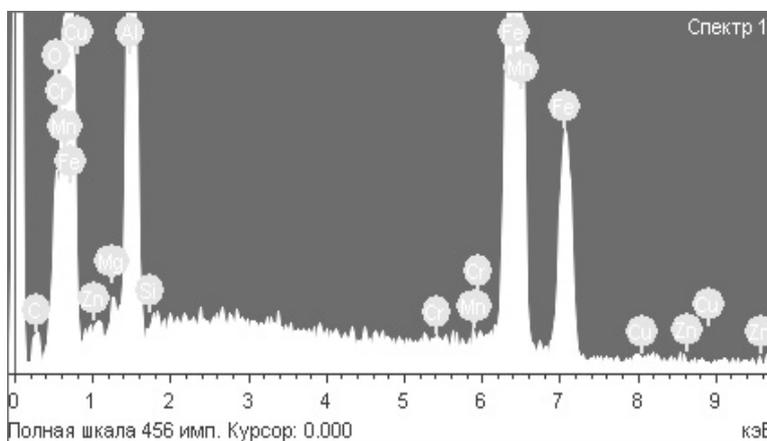


Рисунок 17. РФЭС композиционных покрытий для катода Mn-Fe-Cu-Al

Таблица 3

Элементный состав покрытия, полученного с помощью катода Mn-Fe-Cu-Al

Элемент	Весовой %	Атомный %
C	4.80	15.15
O	3.82	9.06
Mg	0.67	1.04
Al	18.19	25.55
Si	0.00	0.00
Mn	0.69	1.06
Fe	72.51	49.20
Cu	0.00	0.00
Zn	0.00	0.00

Из таблицы 3 видно, что медь, которая присутствует в катоде, в покрытии отсутствует. Содержание марганца составляет около 1 ат.%, поэтому для электрода Mn-Fe-Cu-Al покрытие получается аналогичным покрытием с катодом Fe-Al.

Для покрытия Cr-Mn-Si-Cu-Fe-Al спектр РФЭС показан на рисунке 18 и элементный состав приведен в таблице 4.

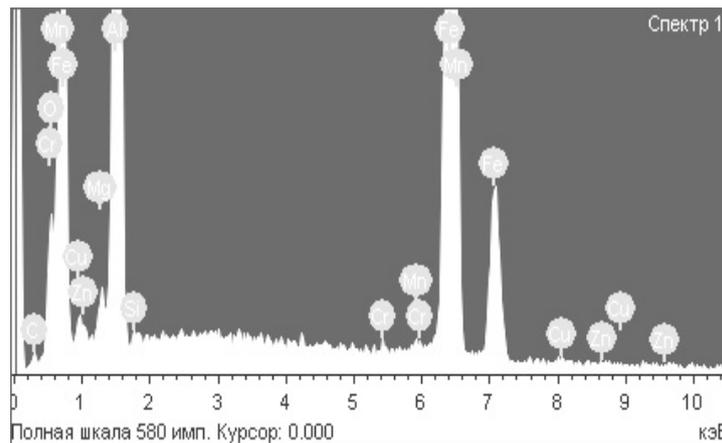


Рисунок 18. РФЭС композиционных покрытий для катода Cr-Mn-Si-Cu-Fe-Al

Т а б л и ц а 4

Элементный состав покрытия, полученного с помощью катода Cr-Mn-Si-Cu-Fe-Al

Элемент	Весовой %	Атомный %
C	1.56	5.09
O	6.98	14.44
Mg	0.67	1.04
Al	10.42	15.12
Cr	2.04	4.08
Mn	0.34	0.24
Fe	77.03	54.03
Cu	0.00	0.00
Zn	0.00	0.00

Из таблицы 4 видно, что медь, которая присутствует в катоде Cr-Mn-Si-Cu-Fe-Al, в покрытии также отсутствует. АСМ-изображение (рис. 5) показывает наличие «слабой» глобулярной структуры, которая практически исчезает после облучения ионами аргона (рис. 6). В то же время модуль Юнга и шероховатость после облучения увеличиваются в два раза (табл. 1 и 2). Это отлично от поведения покрытий, полученных с помощью катодов Fe-Al и Mn-Fe-Cu-Al, хотя содержание железа и алюминия отличается незначительно. Видимо, даже незначительное содержания хрома резко влияет на свойства соответствующих покрытий.

Несмотря на то, что способы получения наноструктурных материалов и покрытий довольно разнообразны [5], все они основаны на механизме интенсивной диссипации энергии, обобщенной в трех стадиях формирования. На первой стадии идет процесс зародышеобразования, который из-за отсутствия соответствующих термодинамических условий не переходит в массовую кристаллизацию. Вторая стадия представляет собой формирование вокруг нанокристаллических зародышей аморфных кластеров, которые на третьей стадии объединяются в межкристаллитную фазу с образованием диссипативной структуры.

Микроструктуру однофазных пленок качественно хорошо можно описать с помощью моделей, предложенных Мовчаном и Демчишиным, Торнтоном [6, 7]. Однако эти модели сильно изменяются, если в пленку добавить легирующую примесь. Примеси останавливают рост зерна и стимулируют перезародышеобразование. Это явление приводит, как правило, к формированию глобулярной структуры. Для среднего и высокого содержания примесей полностью исчезает столбчатая микроструктура, которая типична главным образом для однофазных пленок. Этот факт описывает модель, которая была развита Барна и Адамиком [8]. Однако модель Барна — Адамика не в состоянии объяснить появление незамкнутых наноструктур, обнаруженных нами в системе Fe-Al. Подобные наноструктуры были обнаружены и описаны в работе [5]. В работе [2] нами показано, что работа образования глобулы пропорциональна кубу поверхностного натяжения. Иными словами, незамкнутые наноструктуры характерны для тех веществ, у которых поверхностное натяжение имеет значительную величину. После

Сравнивая (8) и (9), получим:

$$N_0 = \left(\frac{1}{c} \cdot \frac{\ln n_0}{n_0} \cdot \frac{G^0}{kT} \right)^{1/2}. \quad (10)$$

Формула (10) отвечает равновесному значению числа частиц в коллоиде. Сделаем оценку числа частиц в кластере для покрытия нитрида титана: $G^0 \approx 410$ кДж/моль; $c \approx 0,001$; $\ln n_0/n_0 \approx 0,02$; $k=1,38 \cdot 10^{-23}$, $T=300$ К.

Тогда $N_0 \approx 60$ атомов нитрида титана. Полученное нами значение коррелирует с числом атомов N в зародыше при гомогенном образовании нанокластеров в расплавах различных металлов. При этом размер кластера с учетом (7) оказывается равным $r \approx 1$ нм.

Заклучение

Приведенные выше исследования показывают, что, используя ионное облучение, можно изменять механические свойства покрытий. В частности, уменьшение модуля Юнга означает уменьшение коэффициента трения, поскольку его величина пропорциональна микротвердости и модулю Юнга. Этот эффект особенно важен для деталей космической техники — спутников связи и т.д., траектория полета которых часто находится в пределах ионосферы.

References

- 1 Guchenko S.A., Ibraev N.H., et al. Compositions cathodes for ionic-plasma coverings // Vestnik KarGU. — Ser. Physics, — 2009. — № 4 (56) — P. 41–47.
- 2 Jurov V.M., Vertyagina E.N., Baktybekov K.S. and el. Ionic-plasma coverings on the basis of aluminium alloys // Vestnik KarGU, — Physica. — 2010. — № 3 (59). — P. 41–46.
- 3 Jurov V.M., Vertyagina E.N., Baktybekov K.S. and al. Formation наноструктурных composites at ionic-plasma sedimentation of multiphase materials // Chaos and structures in nonlinear systems. The theory and experiment: The Collection of works of 7th of the international scientific conference: Karaganda, on September, 23–25, 2010. — P. 21–28.
- 4 Jurov V. M., Guchenko S.A., Ibraev N.H. Influence of technological parametres on properties of ionic-plasma composite coverings // Vestnik KarGU. Ser. Physics. — 2010. — № 4 (60). — P. 28–38.
- 5 Psachje S.G., Zolnikov K.P., Konovalenko I.S. Synthes and properties of nanocrystals and substructural materials. — Tomsk: Publishing house Tomsk University, 2007. — 264 p.
- 6 Movchan B.A., Demchishin A.V. Research of structure and properties of thick vacuum condensates of nickel, the titan, tungsten, aluminium oxide and zirconium dioxide // FMM. — 1969. — 28. — № 4. — P. 23–30.
- 7 Thornton J.A. Structure and topography of sputtering coatings // Ann. Rev. Material Sci. — 1977. — Vol. 7. — P. 239–260.
- 8 Barna P.B., Adamik M. Formation and Characterization of the structure of surface coating // Protective Coatings and Thin Films / Edited by Pfleau Y., Barna P.B. — Kluwer Academic, Dortrecht. The Netherlands, 1977. — P. 279–297.

В.М.Юров, Е.Н.Вертягина, С.А.Гученко

Иондық сәулелендірудің композиттік жамылғының құрылымына және қасиеттеріне әсері

Мақалада композиттік көпфазалық жамылғысын иондық сәулелендіру нәтижесі берілген. Жамылғы бетін зерттеу үшін NT-206 атомдық-күштік микроскоп қолданылды. Иондық-плазмалық қондырғымен көпфазалық жамылғылар алынды. Жамылғыны сәулелендіру қуыс катоды бар иондар қорек көзі көмегімен аргон иондарымен жүзеге асты. Иондық сәулелендіруден кейін жамылғының құрылымы және механикалық қасиеті өзгереді, бірақ әр түрлі жамылғы әрқалай өзгеріске ұшырайды. Радиацияның үлкен дозасымен сәулелендіру кезіндегі ақаулар топтануы құрылуының статистикалық моделі ұсынылады.

V.M.Jurov, E.N.Vertjagina, S.A.Guchenko

Influence of an ionic irradiation on structure and properties of composite coverings

In the present work the research of ionic irradiation of the composite multiphase coverings are presented. For research of the covering surfaces the atomic-power microscope NT-206 was used. We used sedimentation of multiphase coverings on ionic-plasma installation. The irradiation of coverings was carried out by ions of argon by means of a source of ions with the hollow cathode. After the ionic irradiation the structure and mechanical properties of coverings have changed, but character of changes differs for various coverings. The statistical model for formation of defect congestion is offered for the case of the big doses of radiation.

В.М.Юров

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова (E-mail: exciton@list.ru)

Поверхностное натяжение и свойства люминофоров

В работе рассмотрены вопросы влияния состояния поверхности люминофоров на эффективность люминесценции и световую отдачу люминесцентных ламп. Получена формула для интенсивности люминесценции через энергию Гиббса кристаллической основы. Показана роль поверхностного натяжения в процессах люминесценции. Предложены методы определения поверхностного натяжения люминофоров.

Ключевые слова: люминофоры, поверхность, интенсивность люминесценции, поверхностное натяжение, энергия Гиббса, световая отдача, люминесцентные лампы.

Введение

По сообщениям прессы, Нацхолдинг «Зерде» и корейская компания «Seoul Semiconductor» строят в Казахстане завод по выпуску энергосберегающих ламп. В 2011 г. ожидается начало строительства полноценного производства с постепенной локализацией и использованием местных материалов до 30 %. К 2014 г. объем привлечения местных ресурсов достигнет 70 %. Общие инвестиции составляют \$50 млн, из которых южнокорейские партнеры выделяют порядка \$20 млн, включая трансферт новых технологий. (8 мая, 2010, Бизнес&Власть, Дина Серикпаева).

С 1 января 2011 г. в России прекратилось производство и продажа ламп накаливания мощностью сто и более ватт. Постепенно, до 2014 г., Россия перейдет на полное энергосбережение. В результате этого внедрения бюджет России сэкономит от 10 до 20 % расходов на электроэнергию.

Влияние состояния поверхности люминофоров на эффективность люминесценции и световую отдачу люминесцентных ламп исследуется уже давно. Во многих работах (см., напр., [1,2]) эффекты снижения яркости люминесценции при размоле кристаллофосфоров объясняются резким увеличением удельной поверхности люминофора в слое и, соответственно, увеличением рассеяния возбуждающего света, приводящего, в конечном счете, к потерям.

В работе [3] на основе теории «мутных» сред был сделан вывод, что причиной снижения световой отдачи люминесцентных ламп является наличие малых частиц в слое размерами до 3 мкм, увеличивающих рассеяние ультрафиолета обратно в разрядный промежуток.

Однако эта модель не согласуется с результатами работ по рентгенолюминесценции (см. обзор [4]), где критический размер зерна люминофора определен в 20–40 мкм, начиная с которого квантовый выход свечения рентгенолюминесценции также резко падает. Естественно, что для частиц такого размера рассеяние рентгеновских лучей пренебрежимо мало.

Можно предположить, что при дроблении кристалла в нем создаются дефекты, являющиеся центрами тушения, причем в более мелких зернах концентрация этих дефектов выше, что и приводит к падению выхода люминесценции с увеличением дисперсности. С этой точки зрения, однако, трудно понять одинаковую зависимость выхода люминесценции от размера зерна для отожженных и неотожженных образцов, а также исчезновение размерного эффекта при запрессовке порошка в таблетку (прессование может только увеличить число дефектов, но не уменьшить).

Обобщая результаты экспериментальных данных, авторы работы [5] предложили эмпирическую зависимость относительной интенсивности I от размера r зерен люминофора:

$$I = (1 - d/r)^3, \quad (1)$$

где d — толщина «мертвого» слоя.

По мнению авторов [5], «мертвый» слой — это слой, из которого выходят на поверхность термализованные (горячие) носители заряда. Выход носителей заряда с глубины d конкурирует с их рекомбинацией на центрах свечения, что приводит к тушению люминесценции в «мертвом» слое.

В работе [6] мы рассмотрели вопрос отклика подсистемы дефектов в твердых телах на внешнее воздействие (температура, давление, свет и т.д.) с позиций неравновесной статистической термодинамики. Дефекты кристалла (примесные ионы, центры окраски и т.д.) рассматривались как система взаимодействующих частиц, погруженная в термостат. Квантовые переходы, обусловленные взаимодействием дефектов с термостатом, будут диссипативными (с вероятностью P) в отличие от взаимодействия с внешним полем (с вероятностью F).

Для интенсивности люминесценции нами получено выражение

$$I/I_0 = 1 / \left[1 + C \exp \left(- \frac{E_m - G^0/N}{kT} \right) \right], \quad (2)$$

где E_m — энергия основного состояния центра свечения; G^0 — энергия Гиббса кристаллической (без примеси) основы; N — концентрация центров свечения; $C = \text{const}$.

По форме соотношение (2) совпадает с известной формулой Мотта:

$$I/I_0 = 1 / \left[1 + C \exp(-Q/kT) \right], \quad (3)$$

где энергия активации безызлучательного перехода

$$Q = E_m + G^0/N. \quad (4)$$

Здесь мы учли, что энергия Гиббса имеет отрицательный знак.

Разлагая экспоненту в (2) в ряд и ограничиваясь существенными членами, получим:

$$I = \text{const} \cdot \frac{N}{G^0}. \quad (5)$$

Из уравнения (5) следует очевидный факт увеличения интенсивности свечения с ростом числа N центров свечения до тех пор, пока они не начнут взаимодействовать и образовывать агрегаты (концентрационное тушение).

Изменение радиуса зерна люминофора приводит к изменению давления P на межфазной границе, которое можно описать уравнением Кельвина:

$$P/P_0 = \exp(2\sigma\vartheta/rRT), \quad (6)$$

где σ — межфазное поверхностное натяжение; ϑ — молярный объем; P_0 — давление над плоской поверхностью.

Поскольку $G^0 = H - TS + PV$ (H — энтальпия, S — энтропия, T — температура, V — объем, изменением которого можно пренебречь), то с учетом (6) выражение (5) можно переписать в виде

$$I = \text{const} \cdot \exp \left(- \frac{2\sigma\vartheta}{rRT} \right) \approx \text{const} \cdot \left(1 - \frac{d_1}{r} \right), \quad (7)$$

где глубина «мертвого» слоя d_1 равна

$$d_1 = 2\sigma\vartheta/RT. \quad (8)$$

Поскольку $\left(1 - \frac{d}{r} \right)^3 \approx \left(1 - \frac{3d}{r} \right)$, то уравнения (1) и (8) совпадают с точностью до постоянного множителя, причем $d_1 = d/3$.

Люминесцентные методы определения поверхностного натяжения

Уравнения (7) и (8) использовались нами для разработки люминесцентного метода определения поверхностного натяжения твердых тел [7]. Экспериментальное определение поверхностного натяжения твердых тел затруднено тем, что их молекулы (атомы) лишены возможности свободно перемещаться. Исключение составляет пластическое течение металлов при температурах, близких к точке плавления [8].

Способ применяли для определения поверхностного натяжения диэлектрических кристаллов КС1 с примесью ионов таллия в качестве люминесцирующего зонда. Интенсивность рентгенолюминесценции определялась стандартным фотоэлектрическим методом. Размер зерна диэлектрика определялся с помощью металлографического микроскопа типа МИМ-8. Результаты показаны на рисунке 1.

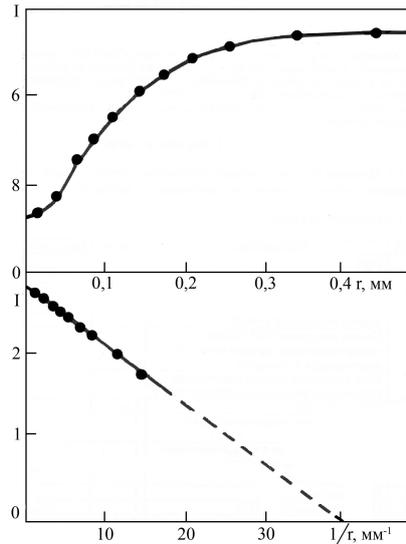


Рисунок 1. Зависимость интенсивности рентгенолюминесценции KCl–Tl от размера зерна люминофора

В координатах $I \sim 1/r$ экспериментальная кривая спрямляется в соответствии с (7), давая значение $d = 0,02$ мкм. Аналогичный результат ранее получен в [4], но расчетных формул, конечно, не было. Для KCl $\vartheta = 37,63$ см³/моль, и из (8) для поверхностного натяжения получено $\sigma = 0,221 \cdot \text{Дж/м}^2$.

Недостатком описанного выше метода являются трудоемкость и длительность пробоподготовки, связанная с отбором частиц твердого тела под микроскопом и формированием соответствующих проб по размерам частиц для последующего измерения интенсивности люминесценции каждой пробы.

В изобретении [9] этот недостаток нами устранен путем изменения процесса пробоподготовки и физического принципа измерения поверхностного натяжения. В этом изобретении проба готовится в виде массивной навески, но с различной концентрацией активатора, а в качестве физического принципа процесса измерения взято явление температурного тушения люминесценции. Этот эффект был обнаружен нами и описан в работе [10].

Зависимость энергии активации температурного тушения люминесценции от обратной концентрации активатора в люминофоре описывается формулой

$$Q = \text{const} \cdot \left(1 - \frac{N_{кр}}{N}\right), \quad (9)$$

где Q — энергия активации температурного тушения люминесценции; N — концентрации активатора в люминофоре.

Параметр $N_{кр}$ связан с поверхностным натяжением σ формулой

$$N_{кр} = \frac{2\sigma\vartheta}{RT}, \quad (10)$$

где ϑ — молярный объем основы люминофора; R — универсальная газовая постоянная; T — температура (К), при которой производится измерение.

Построенная зависимость в координатах $Q \sim 1/N$ ($1/N$ — обратная концентрация активатора в люминофоре) получается прямая, тангенс угла наклона которой определяет $N_{кр}$, и по формуле (10) рассчитывается поверхностное натяжение люминофора (σ).

Способ применяли для определения поверхностного натяжения кристаллов KBr с примесью ионов таллия в качестве активатора.

Люминофоры на основе KBr готовились стандартным методом [10]. Кристаллы KBr растирались в порошок, в который в определенных количествах добавляется TlBr. Затем смесь прокаливалась при температуре $0,52 T_{пл}$ ($T_{пл}$ — температура плавления основы — KBr). Концентрация таллия в KBr варьировалась в пределах от 0,001 до 0,1 мол.% с шагом 0,0025 мол.%.

Температурная зависимость интенсивности люминесценции определялась стандартным фотоэлектрическим методом. Как указывалось выше, температурная зависимость интенсивности люминесценции описывается формулой Мотта (3).

Для каждой концентрации активатора измеряем температурную зависимость интенсивности люминесценции и по формуле (3) определяем Q_1, Q_2, \dots, Q_n . Затем строим зависимость $Q(N)$, представленную на рисунке 2.

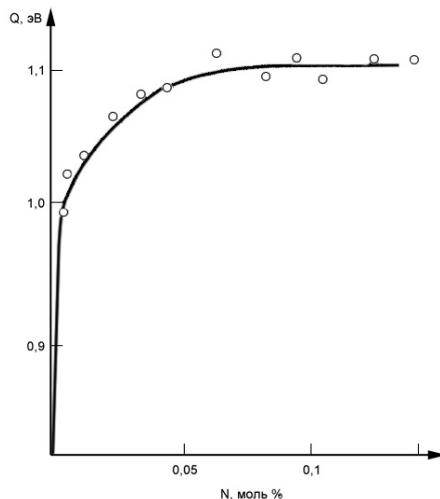


Рисунок 2. Зависимость энергии активации Q от концентрации центров люминесценции для KBr-Tl

В координатах $Q \sim 1/N$ экспериментальная кривая спрямляется в соответствии с (9), давая значение $N_{кр} = 0,875$ мол.%. Для KBr $\vartheta = 43,3$ см³/моль и из соотношения (10) для поверхностного натяжения получено: $\sigma = 0,252$ Дж/м². Это значение по порядку величины соответствует и KCl, определенному нами выше.

Сравнение результатов с теорией и другими экспериментальными методами

Существуют различные методы определения поверхностного натяжения (или поверхностных напряжений) твердых тел. Эти методы немногочисленны, имеют свои преимущества и недостатки, поэтому мы не будем выделять и анализировать каждый из них. Они подробно описаны в работах [8, 11]. Кратко суть этих методов состоит в следующем. В методе «нулевой ползучести» образец (длинной нити, фольги) нагревают до достаточно высокой температуры, так что он начинает сокращаться по длине под действием поверхностных напряжений. К образцу прикладывается внешняя сила, поддерживающая неизменной форму образца. По величине этой силы определяют величину поверхностного натяжения. Метод применим в основном к металлам. В методе раскалывания кристалла проводят отщепление слоя кристалла. Поверхностное натяжение определяют по величине работы, затрачиваемой на раскалывание кристалла. Таким образом, были получены значения поверхностного натяжения ионных кристаллов (табл.). В методе растворения порошка сравниваются теплоты растворения массивного кристалла и порошка той же массы, площадь поверхности которого S определяется независимым способом. Тогда поверхностное натяжение определяется формулой $\sigma = \Delta Q/S$, где ΔQ — разность теплот растворения. В методе «нейтральной капли» величина поверхностного натяжения определяется по форме равновесной капли другого вещества, которая расположена на поверхности изучаемого твердого тела. Отметим также метод «залечивающейся царапины», в котором поверхностное натяжение находится по данным о времени половинного «залечивания царапины», нанесенной на поверхность кристалла. Здесь необходимо также знать величину поверхностной диффузии, которой определяется скорость «залечивания». Данные измерений для ряда ионных кристаллов приведены в таблице.

Немногочисленность экспериментальных и теоретических данных по поверхностному натяжению твердых тел затрудняет их сопоставление и анализ. Тем не менее из таблицы следует, что полученные нами результаты по величине в два раза больше, чем в методе раскалывания кристалла.

**Экспериментальные и теоретические значения поверхностного натяжения
некоторых ионных кристаллов**

Кристалл	σ_1 , Дж/м ²	σ_2 , Дж/м ²	Борн и Штерн σ , Дж/м ²	Френкель σ , Дж/м ²	Ленард-Джонс σ , Дж/м ²
KCl (100)	0,110	0,221	0,107	0,121	0,093
NaCl (100)	0,270	-	-	-	-
KBr (100)	-	0,252	0,096	0,118	0,073
MgO (100)	1,200	-	-	-	-
Слюда	0,310	-	-	-	-

Примечание. Значение σ_1 взято из работы [11]; значение σ_2 получено нами; значение σ приведено в работе [12].

Поверхностное натяжение плоской поверхности кристалла зависит от кристаллографической ориентации этой поверхности. Поскольку в общем случае в кристалле силы связи с соседними атомами по разным направлениям различаются, то при формировании поверхности (фактически разрыве связей) важную роль играет ориентация поверхности по отношению к этим связям. Достаточно очевидно, что минимальное значение поверхностного натяжения (поверхностной энергии) будет у тех поверхностей, в которых лежит наибольшее число сильных связей и которые имеют наименьшее число пересечений с такими связями. Например, для кубической решетки грани куба (100) параллельны двум связям с ближайшими соседями и пересекают третью систему связей ближайших соседей и все системы связей со вторыми ближайшими. Грани ромбододекаэдра (110) параллельны одной системе связей с ближайшими соседями и одной системе связей со следующими за ближайшими соседями. Вклад в их поверхностное натяжение дают пересекаемые системы связей с ближайшими соседями (две системы) и со следующими за ближайшими соседями (три системы). В плоскости граней (111) октаэдра не лежит ни одна система связей с ближайшими соседями, а только система связей со вторыми ближайшими соседями. Три системы связей с ближайшими соседями, естественно, пересекаются этой гранью, и она характеризуется наибольшим поверхностным натяжением. В общем случае оценить величину поверхностного натяжения (поверхностной энергии) достаточно сложно, поскольку соотношение тех или иных связей к секущей i плоскости не всегда можно осуществить однозначно.

Для граней, содержащих две системы связей с ближайшими соседями, поверхностная плотность атомов является наибольшей, поэтому эти грани называют плотноупакованными. Для кубической решетки плотноупакованной является грань (100). Она же обладает и наименьшим поверхностным натяжением (табл.). Для других граней поверхностное натяжение может отличаться в 2–3 раза, так что среднее ее значение будет близким по величине к полученному нами результату.

Возможности увеличения светоотдачи люминесцентных ламп

В настоящее время информационно-измерительные приборы и системы на базе компактных люминесцентных ламп (КЛЛ) находят широкое применение в различных областях жизни и деятельности человека: в промышленном производстве, транспорте, энергетике, вычислительной технике, космическом приборостроении, в банковском деле и многих других областях. Современные потребности в КЛЛ составляют несколько сотен миллионов штук в год. Однако существующие КЛЛ не полностью удовлетворяют современным техническим и эксплуатационным требованиям из-за недостаточно высоких светотехнических характеристик и надежности, ограниченного срока службы, а также низкого уровня экологической безопасности как самих КЛЛ, так и технологии их производства [13].

Современное интенсивное развитие ИПП постоянно требует уменьшения геометрических размеров КЛЛ, расширения спектральной области излучения и увеличения его интенсивности, расширения диапазона питающего напряжения постоянного или переменного тока, расширения температурного рабочего диапазона, увеличения срока службы и уменьшения стоимости КЛЛ [13].

Уменьшение геометрических размеров увеличивает радиационную нагрузку на люминофор, снижая светоотдачу КЛЛ.

Рассмотрим возможные пути повышения эффективности люминофора. Некоторые критерии выбора эффективных люминофоров рассмотрены нами в работе [14]. Поверхностная энергия Гиббса

$G = \sigma \cdot S$, и из формулы (4) следует, что увеличение энергии активации безызлучательного перехода пропорционально поверхностному натяжению люминофора. Это означает, что, увеличивая поверхностное натяжение люминофора, можно увеличить светоотдачу люминесцентных ламп.

Это возможно путем введения неактивных добавок в люминофор, которые не изменяют спектрального состава и которые имеют большое поверхностное натяжение. Из таблицы видно, что поверхностное натяжение окиси магния на порядок выше, чем у других кристаллов.

Введение неактивных добавок проводилось нами на промышленных люминофорах ЛГ 1–2 и Л 45. Основу этих люминофоров составляет галофосфат кальция, который является одной из разновидностей апатита. Последний формируется в большую группу весьма распространенных в природе и синтетических кристаллов, имеющих общую формулу $M_{10}(XO_4) Y_2$, где М — положительный двухвалентный ион (например, Са, Рb, Мn); XO_4 — группа типа PO_4 , VO_4 ; Y — ион галоида (F, Cl) или ОН. Наиболее распространен фторапатит ($Ca_{10}(PO_4)_6F_2$). Структура такого кристалла обладает гексагональной симметрией и относится к группе $P 6_{3/m}$.

Результаты проведенных нами экспериментов представлены на рисунках 3 и 4. Из рисунков видно, что яркость люминофора действительно возрастает при введении неактивных добавок, увеличивающих поверхностное натяжение. Затем начинается спад, что связано с уменьшением числа центров люминесценции в единице объема.

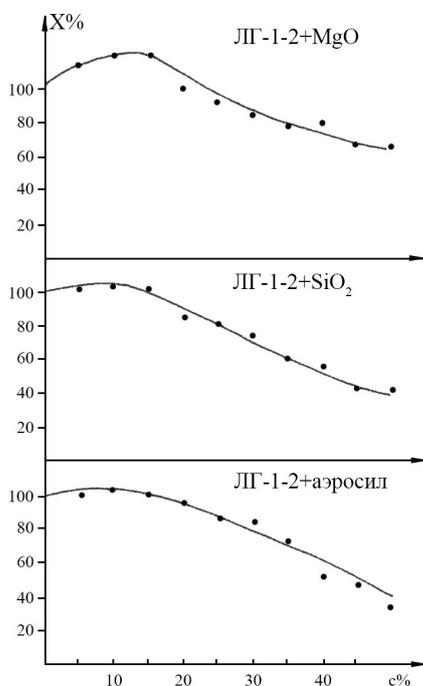


Рисунок 3. Зависимость яркости люминофора ЛГ1–2 от концентрации добавки

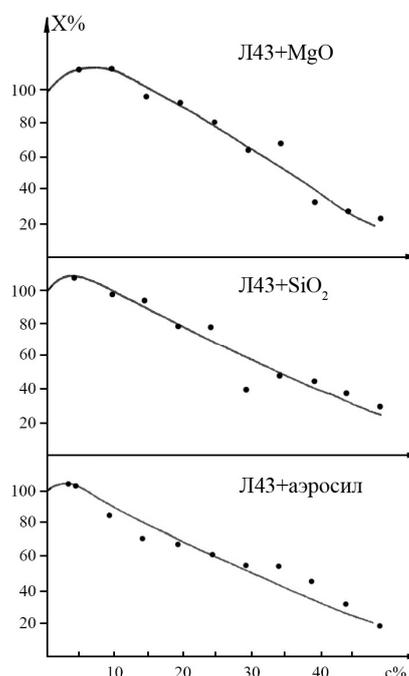


Рисунок 4. Зависимость яркости люминофора Л43 от концентрации добавки

Наибольший эффект, как и следовало ожидать, достигается при введении окиси магния.

Заключение

В настоящей статье был затронут только один аспект повышения эффективности люминесцентных ламп. В дальнейшем мы подробно рассмотрим вопросы старения люминофоров, цветопередачи и т.д. Немаловажную роль играют и вопросы экологии, поскольку большинство люминесцентных ламп содержат (хоть и миллиграммы) ртуть, которая относится к особо ядовитым веществам.

References

- 1 Aleksandrov L.N., Zolotkov V.D., Mordjuk V.S. Growth and radiating defects of phosphor crystals or light sources. — Novosibirsk: Nauka, 1986. — 183 p.

- 2 *Devjatyh E.V., Dadonov V.F.* Luminescent lamps. Phosphors and phosphor coverings. — М.: Nauka, 2007. — 344 p.
- 3 *Butler K.H., Homer H.H.* Improvement in fluorescent lamp efficiency from particle size control of phosphore // *Illum. Engin.* — 1960. — Vol. 25. — № 7. — P. 396–403.
- 4 *Aluker E.D., Lysis D.M., Chernov S.A.* Electronic of excitation and a radio luminescence of alkali halides crystals. — Riga: Zinatne, 1979. — 251 p.
- 5 *Aleksandrov A.B., Aluker E.D., Vasiliev I.A. et al.* Introduction in radiating of physical chemistry of alkali halides crystals. — Riga: Zinatne, 1989. — 244 p.
- 6 *Jurov V.M.* Thermodynamics of luminescing systems // *Vestnik KarGU. Ser. Physics.* — 2005. — № 3 (39). — P. 13–15.
- 7 *Jurov V.M., Eshchanov A.N., Kuketaev A.T.* Way of measurement of a superficial tension of firm bodies // Patent RK № 57691. It is published. 15.12.2008. The bulletin. № 12.
- 8 *Hochstein A.J.* A superficial a tension of firm bodies and adsorption. — М.: Nauka, 1976. — 256 p.
- 9 *Jurov V.M.* Way of measurement of a superficial tension of phosphors // The Positive decision on delivery of patent RK from 18.11.2010 the Demand № 2009/1701.1.
- 10 *Jurov V.M., Murzahmetov M.K., Kuketaev T.A.* Concentration effects in temperature suppression of a luminescence of dopid centres // *Optics and spectroscopy.* — 1989. — Vol. 67. — № 6. — P. 1398–1399.
- 11 *Roldugin V.I.* Surface physical chemistry. — Dolgoprudny: the Publishing House «Intellect», 2008. — 568 p.
- 12 *Vorobev A.A.* Physical propert's sparrows ionic crystals. — Tomsk: TGU, 1960. — The Book 1. — 332 p.
- 13 *Holzer V.* New generation of economic lamps. The past, the present and the future of compact economic lamps // *Light engineering.* — 1998. — № 1. — P. 9–11.
- 14 *Jurov V.M.* Methodical bases of synthesis of new phosphors // *News of Science of Kazakhstan.* — 2008. — № 3. — P. 23–28.

В.М.Юров

Беттік керілу және люминофорлардың қасиеті

Мақалада люминофорлар беттік күйінің люминесценттік лампалардың жарықтық қасиетіне және люминесценциялық эффективтілігіне әсері қарастырылады. Кристалдық негіздің Гиббс энергиясы арқылы люминесценция қарқындылығына арналған формула алынды. Беттік керілудің люминесценция процестеріндегі ролі көрсетілді. Люминофорлардың беттік керілуін анықтаудың әдістері ұсынылды.

V.M.Jurov

Superficial tension and properties of phosphors

In the work the questions of influence of phosphors surface state on efficiency of a luminescence and light return of luminescent lamps are considered. The formula for intensity of a luminescence through Gibbs energy of a crystal basis is received. The role of a superficial tension in luminescence processes is shown. Methods of definition of a superficial tension of phosphors are offered.

АСПАПТАР ЖӘНЕ ЭКСПЕРИМЕНТ ТЕХНИКАЛАРЫ ПРИБОРЫ И ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

УДК 537.533.34

А.О.Саулебеков¹, Д.Венос², А.А.Трубицын³, Ж.Т.Камбарова¹

¹Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова (E-mail: saulebekov@mail.ru);

²Институт ядерной физики АН Чешской Республики, Прага;

³Рязанский государственный радиотехнический университет, Россия

Расчет аппаратной функции электронного спектрометра типа двухкаскадного цилиндрического зеркала

В работе исследована модель двухкаскадного цилиндрического зеркального анализатора посредством численных расчетов. Проведен траекторный анализ движения заряженных частиц в данной электронно-оптической системе. Численно рассчитаны электронно-оптические параметры анализатора. С целью оптимизации диафрагм и пропускных окон во внутреннем цилиндрическом электроде анализатора впервые построены аппаратные функции спектрометра в случаях точечного и протяженного источников, что позволило оценить разрешение прибора. Отмечено, что спектрометр дает возможность измерять электроны, испускаемые радиоактивными источниками в области 0,1–20 кэВ с инструментальным энергетическим разрешением 0,1–1 %.

Ключевые слова: модель, двухкаскадный анализатор, электронно-оптические параметры, спектрометр, аппаратные функции, точечный источник, цилиндрический электрод.

В Институте ядерной физики Академии наук Чешской Республики (г. Ржеж под Прагой) был построен и длительное время эксплуатировался электронный спектрометр типа двухкаскадного цилиндрического зеркала с фокусировкой второго порядка для применения в ядерной спектроскопии и атомной физике. На данный момент остро встал вопрос о модернизации этого прибора. В связи с этим возникла необходимость расчета аппаратной функции данного прибора, которая ранее никогда не рассчитывалась, с целью оптимизации диафрагм и пропускных окон во внутреннем цилиндрическом электроде.

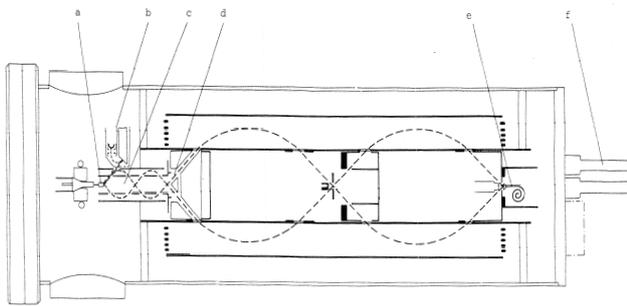
Аппаратная функция является одной из основных характеристик как аксиальных электростатических энергоанализаторов, так и многих других электронно- и ионно-оптических приборов [1–3]. Аппаратная функция (кривая пропускания, приборная линия, инструментальная функция, функция отклика) аксиального электростатического энергоанализатора пропорциональна зависимости моноэнергетического электронного потока, проходящего через выходную щель энергоанализатора, от энергии электронов [1, 2].

Если известна аппаратная функция, то не составляет труда определить разрешающую способность и пропускание. В электронной оптике существует метод, имеющий название «траекторный», в результате применения которого можно получить основные характеристики изучаемого энергоанализатора.

Электронный спектрометр типа двухкаскадного цилиндрического зеркала с фокусировкой второго порядка был построен для применения в ядерной спектроскопии и атомной физике [4]. Энергетический диапазон электронного спектрометра лежит в области от 100 эВ до 20 кэВ. Разрешение можно плавно регулировать в пределах от 0,2 до 2 %, без нарушения вакуума. Лучшее разрешение, полученное с помощью замедляющего объектива перед входом в спектрометр, от 0,04 % при 1,4 кэВ

при 93 % запаздывания. В статье [4] рассмотрена конструкция и дано подробное описание спектрометра, а также даны примеры проведенных на нем измерений.

Схема сечения анализатора показана на рисунке 1. Разрешение может быть скорректировано с помощью двух регулируемых кольцевых щелей: одна из них является входной, другая расположена перед детектором.



а — образец, b — рентгеновская трубка,
c — электронный усилитель, d — тормозящий объектив, e — детектор, f — винтовой микрометр

Рисунок 1. Схема поперечного сечения спектрометра, рентгеновской трубки и электронного усилителя

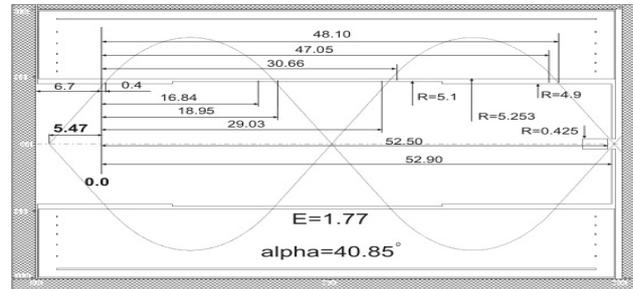


Рисунок 2. Продольное сечение верхней части конструкции

Двухкаскадный прибор имеет преимущество: значительно уменьшается количество рассеянных электронов, т.е. при этой конфигурации только третья часть рассеянных электронов может достичь детектора, а также имеет оптимальные диаметры относительно к длине коаксиальных цилиндров.

Кольцевая входная щель, выступающая в качестве виртуального электронного оптического объекта, вместе с большими размерами анализатора позволяет использовать источники с большой площадью. Это имеет важное значение для низкоэнергетической электронной спектроскопии радиоактивных образцов. Форма источника может быть либо в виде диска диаметром 6–8 мм, либо цилиндра длиной и диаметром 6–8 мм. Электроны, испускаемые в неаксиальной плоскости, фильтруются щелью во внутреннем цилиндре. Диафрагма расположена в центре спектрометра.

Тормозящий объектив состоит из конических электродов. Они размещаются между источником (образец) и входной щелью. Лучшее разрешение, полученное в ходе корректировки спектрометра, $1,6 \times 10^{-3}$ без задержки, а также 4×10^{-4} с задержкой.

На первом этапе работы проведено моделирование электронно-оптической схемы двухкаскадного цилиндрического зеркала с помощью программы «Фокус» моделирования аксиально-симметричных систем корпускулярной оптики с произвольной геометрией электродов. Программа позволяет в графическом режиме осуществить ввод и модификацию конструкции, вычислить распределение потенциала в выделенной области и провести траекторный анализ системы [5].

На рисунке 2 представлено продольное сечение конструкции двухкаскадного цилиндрического анализатора. Схема конструкции построена в масштабе 1:10. Параметры спектрометра, размеры, радиусы щелей и диафрагм соответствуют данным статьи [4]. Как видно из рисунка 2, частица с энергией $E=1,77$ (точнее E/V , где V — потенциал внешнего цилиндра) из точечного источника под центральным углом $40,85^\circ$ пролетает сквозь середины всех апертур.

Рисунок 3 представляет ход траекторий заряженных частиц в указанной электронно-оптической схеме. Точечный источник расположен на оси энергоанализатора. Диапазон начальных углов — от $38,85^\circ$ до $42,85^\circ$. Отношение энергии заряженной частицы к потенциалу электрода — 1,77. Положение источника в используемой для расчетов системе координат — $x = 1,23$; $y = 0$, т.е. оптимальное положение источника относительно левого края входной апертуры Z (ист.) = $-54,7$ мм. Потенциал внешнего цилиндрического электрода равен 1. При расчетах шаг изменения угла был равен $0,2^\circ$. Пучок заряженных частиц выходит из точечного источника, расположенного на оси симметрии, дважды отражается в поле зеркала и фокусируется в точечное изображение. Линейная дисперсия составляет $D=250$, разрешение диафрагмы $R = \Delta E / E=0.0113$.

На рисунке 4 показано увеличенное изображение траекторий движения частиц при прохождении выходной диафрагмы.

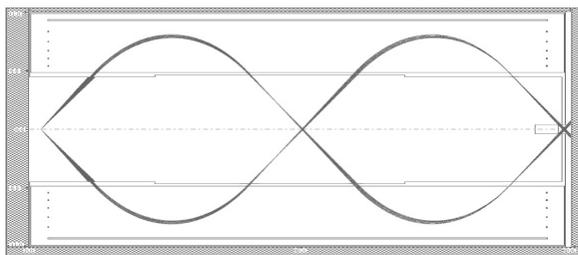


Рисунок 3. Траектории движения заряженных частиц в энергоанализаторе

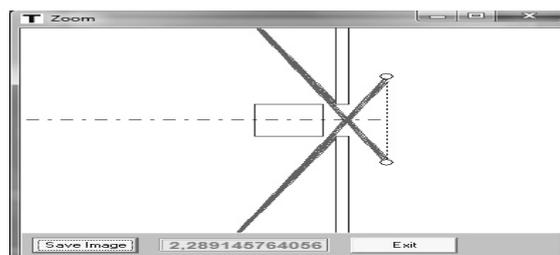


Рисунок 4. Увеличенное изображение траекторий движения частиц при прохождении выходной диафрагмы

На рисунке 5 представлена конструкция в трехмерном виде, полученная с помощью программы AutoCAD 2010.

Для расчета аппаратной функции системы запускаются частицы из точечного источника в диапазоне начальных углов $38,85\text{--}42,85^\circ$ и в диапазоне энергий (а точнее E/V) $1,75\text{--}1,79$. На рисунке 6 показаны траектории заряженных частиц в указанных диапазонах углов и энергий.

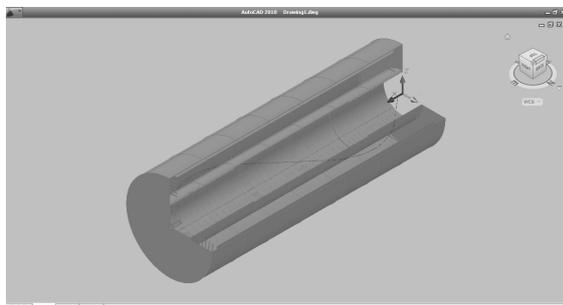


Рисунок 5. 3D — вид конструкции двухкаскадного цилиндрического зеркального энергоанализатора

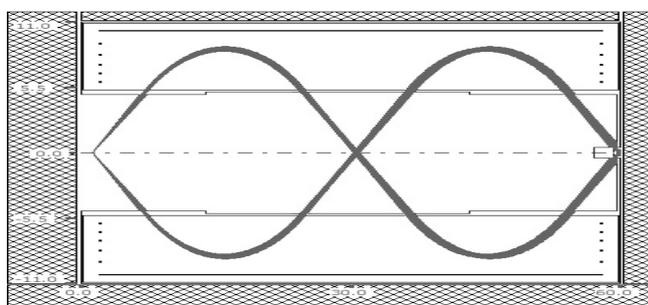


Рисунок 6. Траектории движения заряженных частиц

На рисунке 7 представлена аппаратная функция системы при точечном источнике. Относительное энергетическое разрешение на полувысоте аппаратной функции анализатора составляет $0,9\%$ при светосиле $\Omega/2\pi=2,2\%$.

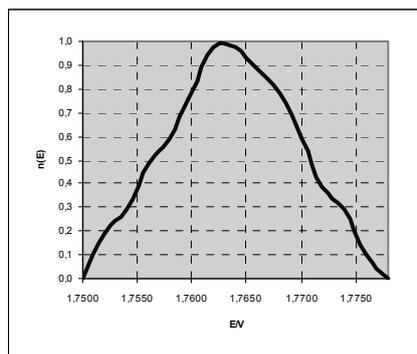


Рисунок 7. Аппаратная функция двухкаскадного цилиндрического зеркального энергоанализатора при точечном источнике

Цилиндрическое зеркало является двухступенчатым, поэтому для вычисления аппаратной функции при протяженном источнике была введена промежуточная диафрагма в центре спектрометра. Для этого при точечном источнике в диапазоне начальных углов $38,85\text{--}42,85^\circ$ и в диапазоне энергий (а точнее E/V) $1,75\text{--}1,79$ измерили ширину пучка в пересечении всех траекторий частиц в центре спектрометра. Таким образом, выяснили размеры промежуточной диафрагмы: радиус $0,33$, ширина $0,65$. Далее запустили частицы из протяженного источника в виде диска в диапазоне начальных углов $39,95\text{--}41,85^\circ$ и в диапазоне энергий (а точнее E/V) $1,75\text{--}1,78$. На рисунке 8 приведены траектории за-

ряженных частиц в указанных диапазонах углов и энергий. Диапазоны начальных углов были изменены, так как только при начальных углах $39,95\text{--}41,85^\circ$ частицы долетают до детектора.

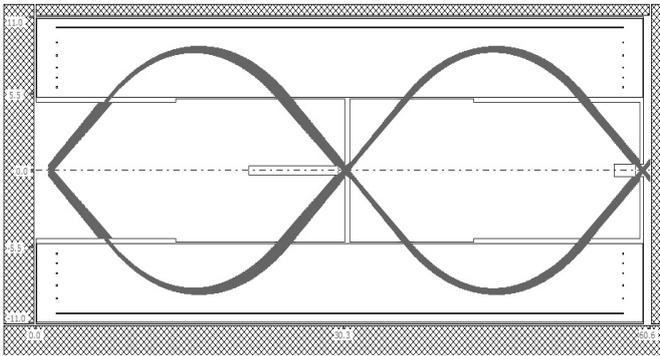
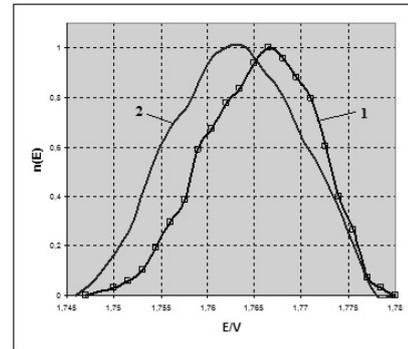


Рисунок 8. Траектории движения заряженных частиц при расчете аппаратной функции



1 — диск диаметром 4 мм; 2 — диск диаметром 8 мм

Рисунок 9. Аппаратные функции двухкаскадного цилиндрического зеркального энергоанализатора при протяженных источниках в виде дисков

На рисунке 9 представлены аппаратные функции двухкаскадного цилиндрического зеркального энергоанализатора при протяженных источниках в виде дисков диаметрами 4 мм и 8 мм.

Относительное энергетическое разрешение на полувысоте аппаратной функции анализатора при протяженных источниках в виде дисков диаметрами 4 и 8 мм составляет соответственно 0,86 и 1,03 %.

Таким образом, получена численная модель двухкаскадного цилиндрического зеркального анализатора. Рассчитаны аппаратные функции анализатора при точечном и протяженных источниках. Параметры данного спектрометра удовлетворяют противоречащим требованиям двух различных областей применения по сравнению с другими спектрометрами типа цилиндрического зеркала с фокусировкой второго порядка, ранее известных в литературе. Спектрометр дает возможность измерять электроны, испускаемые радиоактивными источниками в области 0,1–20 кэВ с инструментальным энергетическим разрешением 0,1 — 1 %.

References

- 1 Afanassyev V.P., Yavor S.Ya. Electrostatic energy analyzers (Review) // *Tech. phys. J.* — 1975. — Vol. 45. — № 6. — P. 1137–1169.
- 2 Kozlov I.G. Modern problems of Electron spectroscopy. — М.: Atom publ., 1978. — 248 p.
- 3 Yavor M. Optics of Charged Particle Analyzer // *Advances in Imaging and Electron Physics.* Elsevier, 2009. — Vol. 157. — P. 677.
- 4 Varga D., Kadar I., Kover A., Kover L. and Morik G.Y. An electron spectrometer of double-pass cylindrical mirror type for Nuclear spectroscopy and Atom physics // *Nuclear Instruments and Methods.* — 154 (1978). — P. 473–483.
- 5 Trubitsyn A.A. The software «FOCUS» to simulate axi-symmetrical and planar electron (ion) optical systems // *Charged Particle Optics: 8th International conference handbook.* — Singapore, 2010. — P. 208.

А.О.Сәулебеков, Д.Венос, А.А.Трубицын, Ж.Т.Қамбарова

Екікаскадты цилиндрлік айна типті электрондық спектрометрдің аппараттық функциясын есептеу

Мақалада екікаскадты цилиндрлік айналық анализатордың моделі сандық есептеулер көмегімен зерттелген. Берілген электронды-оптикалық жүйеде зарядталған бөлшектер қозғалысының траекториялық талдауы жүргізілген. Анализатордың электронды-оптикалық параметрлері сандық түрде есептелген. Анализатордың ішкі цилиндр электродындағы диафрагмалар мен өткізуші терезешелерін оптимизациялау мақсатында нүктелік пен созылыңқы көздер жағдайларында спектрометрдің аппараттық функциялары алғашқы рет құрылып алынған, ал бұл аспаптың ажыратуын

бағалауға мүмкіндік берді. Спектрометр құрылғы энергиялық ажырату 0,1–1 % құраған жағдайда 0,1–20 кэВ облыста радиоактивті көздерден ұшып шығатын электрондарды өлшеуге мүмкіндік береді.

A.O.Saulebekov, D.Venos, A.A.Trubitsyn, Zh.T.Kambarova

Calculation of instrumental function of the electron spectrometer of double-pass cylindrical mirror type

We have studied the model of double-pass cylindrical mirror analyzer by numerical calculations. A trajectory analysis of the motion of charged particles in the electron-optical system is done. The electron-optical parameters of the analyzer are numerically calculated. To optimize the diaphragms and crossing windows in the inner cylindrical electrode of analyzer, there were firstly built the instrumental functions of the spectrometer in the case of point and continuous sources, which allowed us to estimate resolution of the instrument. The spectrometer allows to measure the electrons emitted by radioactive sources in the field of 0.1–20 keV with an instrumental energy resolution of 0.1–1 %.

ФИЗИКАНЫҢ ӘДІСТЕМЕСІ

МЕТОДИКА ФИЗИКИ

УДК 165(075), 530.1

К.М.Арынгазин, И.Ф.Васильева

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова (E-mail: aryngazin_k_m@mail.ru)

Современные методы геометрических идей в теоретической физике

В статье рассмотрена геометризация теоретической физики, как один из современных методов описания состояния и взаимодействия систем. На различных примерах показано преимущество геометрических принципов, которые позволяют определить форму взаимодействий, независимо от их физической природы. Для доказательства использованы методы Эйнштейна, Миллса, Янга, Утиямы, Сакурая, Хиггса, Тейлора, Славнова и других. Подробно проанализирована теория суперструн как современный вариант единой теории фундаментальных взаимодействий. Обоснована необходимость понятия «темной энергии», которая расширяет Вселенную отталкивающим действием.

Ключевые слова: геометризация, теоретическая физика, взаимодействие, геометрические принципы, «темная энергия», теория суперструн.

Мы не всегда встречаем живое, непринужденное сотрудничество истинно глубоких физических и формально-математических, взаимодополняющих и обогащающих друг друга идей. Раскрытие их сущности имело бы не только научно-методическое, но и познавательное значение. Например, нам известно, что рождение и уничтожение материи из вакуума, и не только из вакуума, всегда сопровождается рождением и уничтожением пространств — времени, которые служат фундаментом для построения физической теории.

Следовательно, наша задача — на лекциях раскрыть роль геометризации физического мышления и на примерах показать, как геометрические идеи воплощаются в известных физических явлениях. При этом выяснить, как и что заложено в основе этих теорий. В качестве примера рассмотрим один из методов квантовой теории поля (КТП), предложенный Фейнманом, — так называемый геометрический подход континуального интеграла.

В этом методе основные величины в теоретической физике выражаются через фейнмановские интегралы [1]. Этот интеграл можно записать в следующей, привычной для студентов форме:

$$\langle A \rangle = \int A(\psi) \exp(iS(\psi)) D(\psi).$$

Это символическая запись, содержание которой подлежит физической и геометрической интерпретации. В уравнении ψ — поле материи, A — поле взаимодействия, $S(\psi)$ — функционал действия, который определяется выражением

$$S(\psi) = \int L(\psi) d^4x,$$

где $L(\psi)$ — плотность Лагранжиана, $\exp[iS(\psi)]D(\psi)$ — символ некоторой меры на функциональном пространстве полей материи. Эта мера в математическом смысле редко определяется. Раскрытие ее смысла имело бы большое научно-методическое и познавательное значение.

Известно, что выражение

$$\delta S(\psi) = \delta \int L(\psi) d^4x = 0$$

называется уравнением движения и его смысл может быть истолкован различным образом.

Например, функция ψ в классической физике играет роль «поля сил» вне источника. Если состояние системы материальных точек характеризуется функцией ψ в классическом смысле и движение происходит в евклидовом пространстве, то мы получим знаменитую механику Ньютона, если в конфигурационном — то механику Лагранжа, а если в фазовом пространстве — то механику Гамильтона. Классическая теория гравитации (ОТО) является нелинейной геометрической теорией искривленных четырехмерных многообразий (Риманова геометрия), и если ψ учитывает это искривление, то получим механику Эйнштейна, а в пространстве Минковского — СТО с принципом постоянства скорости.

В применении к квантовой теории поля ψ принято рассматривать как набор функций на пространстве–времени, снабженных тензорами, спинорами и внутренними индексами (теория внутренних симметрий). Рассмотрев ψ в пространстве векторов состояния, мы получим механику Шредингера–Гейзенберга, в спинорном пространстве — механику Дирака, а если ψ — поле дираковской частицы, то решение уравнений движения может истолковываться квантово-механически, как волновые функции частицы. С некоторыми оговорками ψ интерпретируются как определенные решения уравнений Максвелла в электродинамике (как волновые функции фотонов).

Лагранжиан в квантовой теории поля

$$L(A_\mu, \psi) = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + i\bar{\psi}\gamma^\mu \partial_\mu \psi - m\psi\bar{\psi} - e\bar{\psi}\gamma^\mu \psi A_\mu,$$

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu,$$

где γ^μ — матрица Дирака; m — масса; e — заряд, можно рассматривать как сокращенную запись списка основных полей и взаимодействий, заложенных в теорию. Из квадратичной части извлекаются пропагаторы свободных полей. $-e\bar{\psi}\gamma^\mu \psi A_\mu$ является членом взаимодействия A_μ и ψ или называется «вершиной» в диаграммах Фейнмана, и амплитуды процесса записываются через них.

Из этой аналогии видно, что физическая теория развивается в двух взаимодополняющих друг друга направлениях: теоретико-полевом и геометрическом, и становится ясным, что геометризация физики, начавшаяся с эйнштейновской идеи связать гравитацию с кривизной пространства–времени, заложила основу сотрудничества физики и геометрии. Она, нам кажется, будет еще эффективнее, если удастся построить супергравитационные, суперструнные и супермембранные теории, опираясь на геометрические величины расширенных бозонов и фермионов. Две эти проблемы — суперсимметрия и геометризация динамики в терминах суперпространства, думается, проблемы ближайшего будущего. Ответ может быть найден либо в теории $SU(5)$, либо в теории $SU(10)$, либо в какой-то более фундаментальной теории, но при этом становится загадкой, почему природа должна выделить одну из множеств допустимых симметрий и их геометрий.

В качестве примера рассмотрим и другие теории, и в дальнейшем постараемся дать ответ на последний, очень непростой вопрос, почему геометризация подыгрывает физике.

Изучение теоретической физики показывает, что она сегодня страдает пренебрежительным отношением к законам геометрии и геометрическим идеям. Мы видим, что от этого больше страдает сама теоретическая физика, нежели геометрия. Опыт показывает, как только математиками и физиками-теоретиками выдвигаются новые геометрические идеи, теоретическая физика начинает преобразовываться, появляется внутренняя логика, а сама она оживает и начинает бурно развиваться. Мы знаем, что геометрия пространства и времени сама по себе не существует, она определяется взаимодействием тел, внутренней структурой, иными словами, каждый вид взаимодействий создает свою собственную геометрию, соответствующую своей природе. Следовательно, аппарат геометрии есть и аппарат физики.

В последние годы, с теориями элементарных частиц и фундаментальных взаимодействий сложилась аналогичная ситуация, как с квантовой механикой до 1925 г. Существует множество прекрасных частных теорий, но еще нет единой теории, охватывающей все стороны картины мира. Однако нельзя сказать, что эта проблема не волнует физиков. Об этом когда-то мечтал и Эйнштейн, но первый настоящий шаг был сделан в 1964 г. Янгом, Миллсом, Утиямой и Сакураей [2], где учитывались внутренние симметрии объекта локального характера. Это дало возможность внести в теорию новый физический объект — калибровочное поле, подобно электромагнитному, взаимодействие с которым обеспечивало инвариантность теории относительно локальной группы симметрии. Этот подход ока-

зался глубоким физическим принципом, позволяющим вводить взаимодействие чисто геометрически, определяя его форму в соответствии со свойствами симметрии теории. Правда, начало было заложено еще Эйнштейном в ОТО в виде локальной инвариантности и развил его Вейль для электромагнитного поля.

Однако в этом подходе еще не хватало одного механизма, приводящего в движение всю систему фундаментальных взаимодействий. Таким механизмом оказалось спонтанное образование массы (спонтанное нарушение симметрии), предложенное Хиггсом [3] и работами Тофта [4], Тейлора [5] и Славнова [6]. Результаты этих работ позволили Вайнбергу, Саламу [7, 8] и Глэшоу объединить электромагнитное и слабое взаимодействия в электрослабое, а другим в эту модель включить и сильные взаимодействия.

Преимущество этого геометрического принципа в том, что он определяет форму почти всех взаимодействий, независимо от их физической природы и допускает чисто геометрическую интерпретацию. Иными словами, смысл последних в том, что геометрия и геометрические идеи приобретают динамический характер, и четырехмерное пространство–время делается лишь частным случаем возможных динамических геометрий. Возникшая в результате применения этого принципа единая теория всех взаимодействий оказывается геометрической теорией, как ОТО. Описание движения частиц в терминах геометрических понятий, таких как коэффициенты связности, тензоры кривизны расслоенного пространства, делает их движения свободными, т.е. устраняет разделение движений на инерциальные и неинерциальные, и, главное, позволяет проверить геометрию экспериментально. Например, с помощью метода соединения множества плоскостей с коэффициентами связности можно получить сферу, а плоского пространства с гравитационным полем — кривизну. Это позволяет отождествить коэффициенты связности (геометрическое понятие) с гравитацией (физическое понятие), т.е. определяет геометрию гравитации. Об этом подходе Н.П.Коноплева и В.И.Попов пишут: «... Можно считать, что пространство плоское и все тела подвергаются взаимодействию универсального всепроникающего поля или что никакого поля нет, но пространство кривое. В таком случае вопрос о геометрии пространства в целом оказывается эквивалентным вопросу о поведении физических полей на произвольно больших расстояниях от источника. Свойства симметрии пространства становятся свойствами симметрии взаимодействий. Топология пространства в целом также отражается в свойствах взаимодействий. Так смыкаются геометрия и физика» [9]. Далее авторы пишут, что «... и другие виды взаимодействий, а именно те, которые осуществляются калибровочными полями, также допускают чисто геометрическую интерпретацию. Только в этом случае локальными становятся внутренние симметрии элементарных частиц».

Нами упомянуто вкратце о нарушении симметрии. Остановимся более подробно на нем, так как оно стало поворотным пунктом в теории объединения фундаментальных взаимодействий.

Так как всякое нарушение связано с воздействием на систему некоторой силы, и этот процесс позволяет наблюдать его, то эта наблюдаемость говорит о том, что в процессе происходит переход микроскопической симметрии в макроскопическую, т.е. перестройка геометрической структуры системы. Также этот процесс позволяет определить природу перестраивающей силы. Этот метод был заложен еще при построении теории сверхпроводимости, сверхтекучести и теории лазеров. И благодаря ему мы воочию увидели эту перестройку, т.е. переход микроскопических процессов в макроскопические.

В этих процессах роль «силы» играет понятие коэффициентов связности расслоенного пространства, а траектории — кривая на плоскости. Расслоенное пространство получается из обычного пространства–времени, если предположить, что его точки имеют внутреннюю структуру, действующую внутри слоев (внутренних пространств). Примером обычного и расслоенного пространств может служить орбитальное и собственное вращение электрона в атоме. Если орбитальное вращение электрона описывается обычным пространством–временем, то собственное вращение — расслоенным пространством. Отсюда видно, что они не могут быть отождествлены между собой. Это отражает независимость квантовых чисел, соответствующих внутренним симметриям и определяющих, например, правила запрета в реакциях элементарных частиц от их пространственно-временных характеристик. Геометрия расслоенного пространства обобщает риманову геометрию и включает ее как свой частный случай.

Можно заметить, что возможен переход от плоского к искривленному пространству и наоборот. Это осуществляется через коэффициенты связности, например, Ричча или Кристоффеля. Эти коэффициенты могут быть геометрически интерпретированы как вектор-потенциал калибровочных полей,

траектории частиц, как свободные. А это позволяет избавиться от понятия силы (как физического понятия). Расстояние между траекториями двух произвольных частиц или тел, называемое геодезическим отклонением, пропорционально тензору кривизны пространства–времени. Через такое определение можно интерпретировать и тензоры кривизны.

Следовательно, в основе, как мы отметили, каждой физической теории лежат постулат о геометрических свойствах пространства–времени и геометрические идеи, причем они находят свое выражение в принципе относительности теории. «Законы физики не могут быть выражены без помощи геометрии, хотя геометрия, взятая сама по себе, не соответствует никаким опытам, никакой опытной науке», — писал Кант [10]. Таким образом, геометрические идеи в физической теории отражают выбор средств, метод описания и форму наглядности, с помощью которых эта теория может быть раскрыта и проверена.

Значит, цель каждого геометрического подхода к взаимодействиям состоит в отыскании такого пространства, в котором изучаемые поля стали бы стандартными геометрическими объектами. Это позволяет применить хорошо разработанные методы геометрии, алгебры и топологии для изучения свойств решений классических уравнений движения и поля.

Таким образом, геометрические описания взаимодействий позволяют аксиоматизировать физику, естественным образом объединяя внутренние и пространственно-временные симметрии, выдвигая критерии выбора Лагранжианов взаимодействий и обосновывая алгебраические свойства полей. Кроме того, теория калибровочных полей нашла общий подход к объединению не только полей движения, но и таких направлений в теоретической физике, как дисперсионные соотношения, высшие симметрии, кварки, партоны, алгебра токов, черные дыры, очарованные частицы, струны, солитоны, мембраны и т.д.

Вошедшие в последние 50 лет в теоретическую физику геометрические идеи; суперсимметрия и их локальное обобщение — супергравитация, идея возможности дополнительных измерений пространства–времени и определения его размерности из требования непротиворечивости выбираемой квантово-полевой модели, представление о суперструнах и супермембранах как фундаментальных физических объектах совершают сейчас такие открытия, которые не представлялись раньше. Они дали новый толчок в построении современной картины мира.

Таким образом, мы продемонстрировали на примерах и предложенных Фейнманом в КТП принципах применение геометрических методов и идей в современной теоретической физике. Здесь показана общая черта, скелет этого метода, принципы на примере теории геометрических идей. При этом нами использованы методы Эйнштейна, Вейля, Миллса, Янга, Утиямы, Сакурая, Хиггса, Тейлора, Славнова и других.

Теперь рассмотрим теорию суперструн. Мы не будем останавливаться на теории Вайнберга-Глэшоу-Салама о теории электрослабого взаимодействия, поскольку, во-первых, доказано, что она является физической теорией, полученной применением геометрии и алгебры, во-вторых, она является частным случаем теории суперструн и, в-третьих, она хорошо изложена во многих учебниках и монографиях на языке геометрических идей.

Теория суперструн — это современный вариант единой теории фундаментальных (электромагнитных, сильных, слабых и гравитационных) взаимодействий. Она затрагивает самые глубокие вопросы мировоззрения и является наиболее разработанной современной попыткой ответа на вопросы о природе фундаментальных взаимодействий. Теория суперструн основана на представлении о пространстве–времени как гладком вещественном многообразии, где много геометрических тонкостей.

В семидесятых годах так называемые дуальные модели сильных взаимодействий предсказывали большое количество безмассовых частиц, ни одна из которых не существует в мире адронов. И этот недостаток не давал возможности построить разумную объединяющую гравитацию и материю теории. Задача было в том, как избавиться от этого недостатка. Выход пришел неожиданно. В 1974 г. Весс [11] и Зумино [12] выдвинули идею пространственно-временной симметрии как четырехмерное обобщение симметрии двумерной поверхности в струнной модели Рамона-Неве-Шварца [13]. Она оказалась удачным понятием в перенормируемых лагранжевых теориях поля.

В лекции, прочитанной на Восьмом международном семинаре по теоретической физике (Саламанка, Испания, 13–14 июня 1977 г.), один из авторов этой теории Весс говорил, что «построение моделей супергравитации продолжает оставаться искусством и в то же время тяжелой работой. В этих лекциях я буду придериваться геометрического подхода, поскольку он мне кажется самым последо-

вательным...» [11]. Он показал образцы построения суперсимметричной теории методом геометрических идей.

Таким образом, появилась на свет новая геометрическая идея — теория суперструн, в некоторой степени объединяющая все фундаментальные взаимодействия, включая и гравитацию. Однако это было всего лишь первым приближением к решению задач о фундаментальных взаимодействиях. Рассмотрим эту теорию с новой точки зрения, с особым подходом, т.е. с точки зрения появления темной материи и темной энергии.

Сначала рассмотрим сущность суперструнной теории. Струна — однородный объект, кривая. Она, распространяясь в пространстве и времени, замечает мировую поверхность, являющуюся обобщением мировой линии точечной частицы. Мировая поверхность описывается функцией $\chi(\sigma, \tau)$ — положением струны при данных значениях σ и τ , или их объединенным вектором $\sigma^\alpha = d\sigma d\tau$. Если еще ввести новую переменную $n_{\alpha\beta}$, которая является матричным тензором мировой поверхности струны, то формула для площади струны в пространстве Минковского будет следующим выражением:

$$S = \frac{T}{2} \int d^2\sigma h^{1/2} h^{\alpha\beta} \eta_{\mu\nu} \partial_\alpha \chi^\mu \partial_\beta \chi^\nu, \quad (1)$$

где T — натяжение струны; $h^{1/2}$ — квадратный корень из абсолютного значения определителя матрицы $h_{\alpha\beta}$, а $h^{\alpha\beta}$ — обратная $h_{\alpha\beta}$.

Уравнение (1) описывает распространение струны в пространстве Минковского любой размерности. Стандартной и удобной параметризацией мировой поверхности является $h_{\alpha\beta} e^\varphi = \eta_{\alpha\beta}$ — матрица, где e^φ — неизвестный множитель, т.е. конформная калибровка. Если представить, что $h^{1/2} \sim e^\varphi$, а $h_{\alpha\beta} \sim e^{-\varphi}$, то площадь определяется уравнением

$$S = -\frac{T}{2} \int d^2\sigma \eta_{\mu\nu} \eta^{\alpha\beta} \partial_\alpha \chi^\mu \partial_\beta \chi^\nu,$$

и оно отвечает следующим условиям:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \frac{\partial^2}{\partial \sigma^2} \right) \chi^\mu = 0, \quad \frac{\delta S}{\delta h_{\alpha\beta}} = 0. \quad (2)$$

(2) — уравнение связи.

Поскольку для (1+1)-мерной КТП тензор энергии-импульса

$$T_{\alpha\beta} = -\frac{2\pi}{\sqrt{h}} \cdot \frac{\delta S}{\delta h^{\alpha\beta}},$$

то $T_{\alpha\beta} = 0$. Тогда $T_{\alpha\beta} |\varphi\rangle = 0$, подобно уравнению Шредингера для струны, и функция действия примет вид:

$$S = \int d^D x \left(-\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{i}{2} \bar{\psi} \Gamma_\mu D^\mu \psi \right), \quad (3)$$

где $F_{\mu\nu}$ — тензор напряженности поля для неабелева вектор-потенциала A_μ ; D — символ янг-милловской ковариантной производной; Γ_μ — матрица Дирака.

Присутствие матрицы Дирака в уравнении (3) подсказывает, что в действии, кроме гравитации, присутствует и антигравитация, антигравитационное поле, т.е. имеется темная энергия, которая расширяет Вселенную отталкивающим действием. Она проявляет себя в определенных условиях, когда расстояние между взаимодействующей материей достигает размера нескольких световых лет для Вселенной и зависит от гравитационной массы, когда другие взаимодействия исчерпали себя.

Проявление этого эффекта подобно соотношению между нерелятивистским и релятивистским, электрическим и магнитным. Гравитация и антигравитация — это единое свойство материи. Например, совпадение форм законов Кулона и всемирного тяготения — это не случайность.

Все это говорит о том, что единая теория природы находится в стадии становления и развития, хотя мы утверждаем, что теория суперструн является всеохватывающей теорией. Она, нам кажется, станет действительно таковой в том случае, когда приобретет глобальную геометрическую интерпретацию, найдет свою геометрию, как ОТО, как другие разделы теоретической физики для своего объекта. Суперструна, супермембрана и другие геометрические объекты пока остаются всего лишь геометрическими идеями, они еще не превратились в метод описания природы. Кроме того, в этих теориях имеется еще множество недостатков. Нам известно, что даже одно опровержение, несоответствие с опытом, может вычеркнуть любую красивую теорию, могут оказаться за бортом любые прекрасные идеи.

Мы далеки от мысли о том, что физику надо излагать только языком геометрии, это увело бы физику от физической реальности. Мы за то, что найти ту реальную середину, чтобы не сделать теоретическую физику чисто математической или чисто физической теорией. Опыт показывает, что и то и другое не раскрывает всю природу физических явлений по отдельности. Когда-то Лагранж писал, что «пока алгебра и геометрия шли раздельными путями, их развитие было медленным, а приложения ограниченными. Когда же эти науки соединились, они стали черпать друг из друга новую жизненную силу и быстрыми шагами устремились к совершенству» [14]. И физика и геометрия должны раскрывать красоту природы совместно.

Надо отметить, что в последние годы проведено множество исследований, относящихся к геометрии пространства–времени в других направлениях. К ним относится геометродинамика и сверхпространство Уиллера, теория пространственного и вакуумного коллапса и черных дыр, решение уравнений Эйнштейна, переменная топология, сверхпространства Гротендика и другие с переменной метрикой римановых многообразий.

References

- 1 Feynman R. Quantum mechanics. — М.: Mir, 1978. — 524 p.
- 2 Yang I.N., Mills R.A. Elementary particles and compensating fields. — М.: Mir, 1964. — 299 p.
- 3 Higgs P.W. Broken symmetries and the masses of gauge bosons // Phys. Rev. Lett., 1964. — Vol. 12. — P. 132.
- 4 't Hooft G. Renormalization of Massless Yang-Mills Fields // Nucl. Phys. — 1971. — Vol. 1335. — P. 173–199.
- 5 Taylor J.C. Ward identities and charge renormalization of the Yang-Mills field // Nucl. Phys. B. — 1971. — Vol. 33. — P. 436–444.
- 6 Slavnov A.A. Ward's identities in Yang and Mills theory // Theoretical and mathematical physics. — 1972. — T. 10. — P. 99–112.
- 7 Weinberg S.A. Model of Leptons // Phys. Rev. Lett. — 1967. — Vol. 19. — P. 1264–1266.
- 8 Salam A. Proc. 8-th Nobel Symposium., Stockholm. — 1965. — P. 367.
- 9 Konopleva N.P., Popov V.I. Gauge fields. — М.: Atomizdat, 1986. — 240 p.
- 10 Kant I. Critique of Pure Reason. Coll. Cit. — Vol. 3. — М.: Mysl, 1964. — 799 p.
- 11 Wess J., Zumino B. Superspace formulation of supergravity // Phys. Lett. B. — 1977. — Vol. 66. — P. 361.
- 12 Zumino B. Model Estimates and Results // Proc 17-th Intern. Conf. on High Energy Physics. — 1974. — P. 1243–1250.
- 13 Ramond P. and Schwarz J. Classification of dual model gauge algebras // Phys. Lett. B. — 1976. — Vol. 64. — P. 75–77.
- 14 Lagrange J.L. Analytical Dynamics. — L.: GITTL, 1950. — Vol. 1, 2. — 594 p.

К.М.Арынгазин, И.Ф.Васильева

Теориялық физикадағы геометриялық идеялардың қазіргі заманғы әдістері

Мақалада теориялық физиканың геометризациясы жүйелердің өзара әсерлері мен күйін сипаттаудың қазіргі заманғы әдісі ретінде қарастырылады. Әр түрлі мысалдарда өзара әсерлердің пішінін олардың физикалық табиғатына тәуелсіз анықтауға болатын геометриялық принциптердің ерекшеліктері көрсетілген. Оған дәлел ретінде Эйнштейннің, Миллстың, Янгтың, Утияманың, Сакурайдың, Хиггстың, Тейлордың, Славновтың және тағы басқалардың әдістері қолданылған. Ғажайып ішек теориясы фундаменталды өзара әсерлер теориясының қазіргі замандық тәсілі ретінде жан-жақты тұжырымдалады. Кеңістікте кері итеруші әсермен кеңейтілген «қара энергия» түсінігінің қажеттілігі негізделеді.

K.M.Aryngazin, I.F.Vassilieva

The modern methods of geometrical ideas in theoretical physics

In this article the geometrization of theoretical physics is considered as one of the modern method for description of system state and interaction. By the different examples the advantage of geometrical principles which allow the form of interaction determining independently of their physical nature is shown. For proof ones the methods of Einstein, Mills, Yang, Utiyama, Sakuraya, Higgs, Teilor, Slavnov and others are used. The theory of superstrings as a modern variant of the unify theory of fundamental interactions is analyzed. The necessity of «dark energy» definition which expands the universe by repulsive action is substantiated.

Л.Ф.Ильина, Д.К.Тажибаева

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова (E-mail: l_191137@mail.ru)

Использование интерактивных технологий в процессе изучения явления электромагнитной индукции и практического применения элементов теории Максвелла в курсе общей физики

В статье показано, что процесс усвоения информации и процесс интеллектуального развития личности в наше время требуют интенсификации и использования новых подходов и технологий. Прежде чем понять суть теории макроскопической электродинамики, необходимо расширить и углубить понятие материи. В классическом варианте имеется в виду лишь один вид материи — вещество, именно в электродинамике вводится другая форма материи — полевая, т. е. электромагнитное поле — нетрадиционный, достаточно сложный раздел, поэтому его освоение без применения современных интерактивных технологий затруднительно. В работе приведены результаты апробации приемов на основе использования инновационных технологий и электронных образовательных ресурсов при изучении явления электромагнитной индукции и элементов теории Максвелла.

Ключевые слова: информация, теория Максвелла, электродинамика, формы материи, макроскопическая электродинамика, инновационные технологии, электронные образовательные ресурсы.

Раздел «Электричество и магнетизм» — один из наиболее сложных разделов физики. Его логическая структура: формирование понятия электрического заряда и электромагнитного поля; изучение взаимодействия поля и вещества, электрического и магнитного полей и т.д.

Именно в электродинамике, творцом которой был Дж. К.Максвелл, логично вводится вторая форма материи — полевая, т.е. электромагнитное поле.

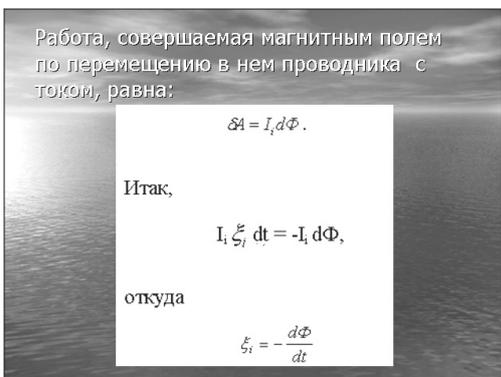
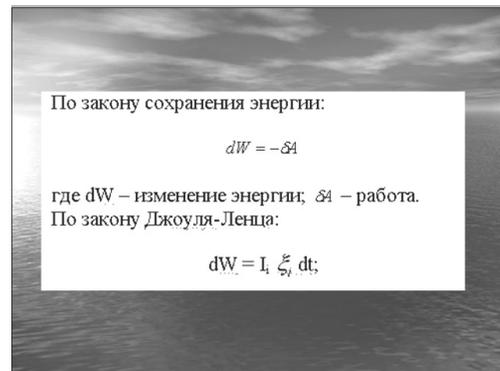
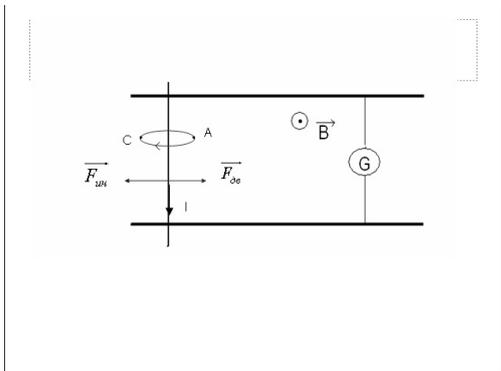
На кафедре общей и теоретической физики КарГУ им. Е.А.Букетова в течение многих лет работает научно-методический семинар «Дидактические принципы и сравнительный анализ методики преподавания физики в школе и вузе», направление работы которого определяется на каждый учебный год и планируется на основе научно-исследовательской работы кафедры, координируемой Академией педагогических наук Казахстана.

В 2009–2010 учебном году семинар был посвящен использованию интерактивных технологий при изучении раздела «Электричество и магнетизм». По этому разделу выполняются дипломные работы, которые оформляются актами внедрения в учебный процесс гимназии № 93 г. Караганды, являющейся филиалом кафедры, и университета, причем не только в курсе общей физики, но и в спецкурсах. Содержание спецкурсов рассчитано не только на базовые, но и на профильные программы, что особенно актуально в условиях неизбежного перехода на 12-летнее среднее образование в РК [1].

Следует отметить, что в преподавании соответствующих спецкурсов используется опыт работы одного из авторов доклада в качестве учителя физики (по совместительству) в физико-математических классах школы-гимназии № 93 г. Караганды. Работа велась по авторским программам, и многие вопросы, связанные именно с магнетизмом, рассматривались с помощью нетрадиционных методов. Например, такое очень важное явление, как электромагнитная индукция, связывающая электрическое и магнитное поля, традиционно рассматривается на основе эксперимента (закон Фарадея); подчеркивается, что электромагнитная индукция — это явление инерционное, а вот почему, совершенно неясно [2]. Закон электромагнитной индукции можно вывести на основе закона сохранения энергии и закона инерции. Такого подхода нет ни в одном, как вузовском, так и в школьном, учебнике. При рассмотрении этого вопроса использовалась презентация, подготовленная авторами.

Пусть в горизонтальной плоскости расположены два рельса, на них положен легкий проводник, система замкнута через гальванометр и помещена в однородное магнитное поле, перпендикулярное к плоскости указанного контура. Будем двигать проводник, прикладывая к нему движущую силу $\vec{F}_{ос}$. В силу всеобщего закона инерции (в данном случае речь идет не о механической, а об электромагнитной инерции) должна возникнуть сила инерции $\vec{F}_{ин} \uparrow \downarrow \vec{F}_{ос}$, а это возможно лишь в том случае, если в проводнике пойдет ток такого направления, чтобы его собственное поле справа от проводника было параллельно внешнему и усиливало его, а слева было антипараллельно внешнему и ослабляло

его. Используя правило буравчика, указываем направление тока (слайды 1–3). Ток и должен возникнуть, так как меняется магнитный поток, пронизывающий контур, частью которого является перемещающийся проводник, и гальванометр это зафиксирует [3].



Слайды 1–3. Вывод закона электромагнитной индукции

Слайд 4. Иллюстрация правила Ленца

Закон электромагнитной индукции в такой форме был предложен Максвеллом и называется электродинамическим законом Фарадея-Максвелла.

Знак «-» учитывает направление индукционного тока, определяемое правилом Ленца (слайд 4):

Индукционный ток всегда имеет такое направление, что его собственное магнитное поле препятствует тем изменениям, которые его вызывают.

Известны три определения электромагнитной индукции: два — по Фарадею (через силовые линии и через магнитный поток) и одно — по Максвеллу (слайды 5–9). Традиционно сначала вводится вектор магнитной индукции как характеристика магнитного поля, через него — магнитный поток, а затем ЭДС индукции — через скорость изменения магнитного потока. Причем в школьном курсе физики вводится единственная векторная характеристика магнитного поля — вектор магнитной индукции (с точки зрения методики непонятно, почему он так называется) [4].

Пусть в некой точке O создается электрическое поле напряженности \vec{E} (слайд 10).

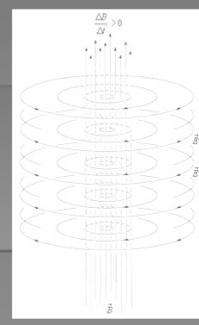
Если оно ничем не поддерживается, то оно убывает, причем $\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \uparrow \downarrow \vec{E}$ и создает «ток смещения». «Ток смещения» создает магнитное поле. Магнитное поле создается вокруг «тока смещения».

Существование электромагнитных волн было теоретически предсказано великим английским физиком Дж. Максвеллом в 1864 году. Максвелл проанализировал все известные к тому времени законы электродинамики и сделал попытку применить их к изменяющимся во времени электрическому и магнитному полям. Он обратил внимание на асимметрию взаимосвязи между электрическими и магнитными явлениями. Максвелл ввел в физику понятие вихревого электрического поля и предложил новую трактовку закона электромагнитной индукции, открытой Фарадеем в 1831 г.:

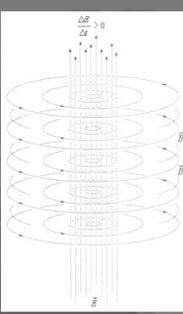
Всякое изменение магнитного поля порождает в окружающем пространстве вихревое электрическое поле, силовые линии которого замкнуты.

Максвелл высказал гипотезу о существовании и обратного процесса:

Изменяющееся во времени электрическое поле порождает в окружающем пространстве магнитное поле.

Закон электромагнитной индукции в трактовке Максвелла.



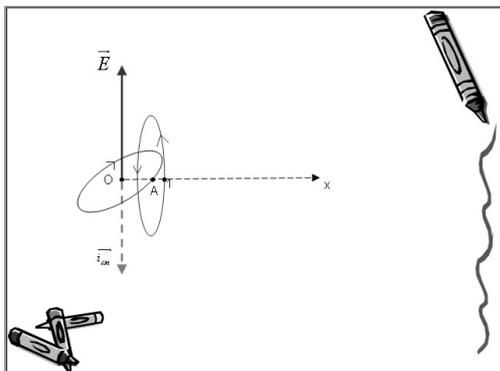
Гипотеза Максвелла.
Изменяющееся электрическое поле порождает магнитное поле.

Гипотеза Максвелла была лишь теоретическим предположением, не имеющим экспериментального подтверждения, однако на ее основе Максвеллу удалось записать непротиворечивую систему уравнений, описывающих взаимные превращения электрического и магнитного полей, т. е. систему уравнений электромагнитного поля (уравнений Максвелла).

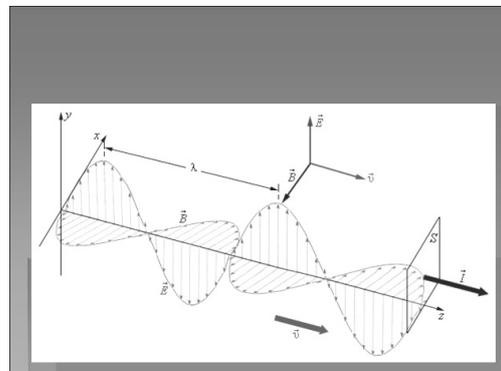
Из теории Максвелла вытекает следующее:

Существуют электромагнитные волны, то есть распространяющееся в пространстве и во времени электромагнитное поле. Электромагнитные волны поперечны – векторы \vec{E} и \vec{H} перпендикулярны друг другу и лежат в плоскости, перпендикулярной направлению распространения волны.

Слайды 5–9. Элементы теории Максвелла



Слайд 10. Возникновение электромагнитной волны



Слайд 11. Электромагнитная волна — волна поперечная

Выберем произвольное направление, с которым совместим ось x . В точке пересечения силовой линии магнитного поля с осью x вектор \vec{H} направлен на наблюдателя, но магнитное поле тоже ничем не поддерживается, значит, тоже убывает и создает вихревое электрическое поле, направленное так, чтобы создаваемое им вторичное магнитное поле в названной точке поддерживало вторичное, т.е. было направлено на нас же. И так, на первичное электрическое поле в точке O накладывается вторичное электрическое поле, противоположное ему по направлению. Поля в точке O компенсируют друг друга, но в выбранном направлении электрическое поле создается в точке 1 и т.д. [5].

Таким образом, **электромагнитное поле распространяется в пространстве, создавая электромагнитную волну.**

Очевидно, что $\vec{H} \perp \vec{E}; \vec{v} \perp \vec{E}; \vec{v} \perp \vec{H}$, т.е. электромагнитная волна — волна поперечная (слайд 11). Электромагнитные волны распространяются в веществе с конечной скоростью

$$v = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0\mu\mu_0}}$$

Скорость электромагнитных волн в вакууме ($\varepsilon = \mu = 1$) равна скорости света.

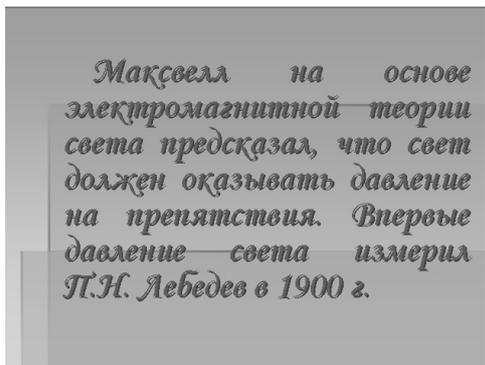
Скорость распространения электромагнитных волн в вакууме является одной из фундаментальных физических постоянных.

Вывод Максвелла о конечной скорости распространения электромагнитных волн находился в противоречии с принятой в то время теорией дальнего действия, в которой скорость распространения электрического и магнитного полей принималась бесконечно большой. Поэтому теорию Максвелла называют теорией близкого действия.

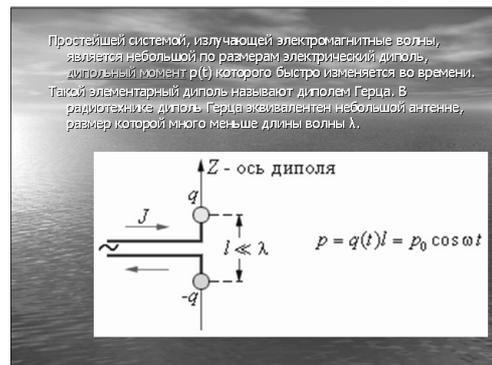
В электромагнитной волне происходят взаимные превращения электрического и магнитного полей. Эти процессы идут одновременно, и электрическое и магнитное поля выступают как равноправные «партнеры».

Электромагнитные волны переносят энергию. Поток энергии в электромагнитной волне можно задавать с помощью вектора, называемого вектором Пойнтинга.

Давление электромагнитного излучения объясняется тем, что под действием электрического поля волны в веществе возникают слабые токи, т.е. упорядоченное движение заряженных частиц. На эти токи действует сила Ампера со стороны магнитного поля волны, направленная в толщу вещества. Эта сила и создает результирующее давление. Обычно давление электромагнитного излучения ничтожно мало. Так, например, давление солнечного излучения, приходящего на Землю, на абсолютно поглощающую поверхность, составляет примерно 5 мкПа. Первые эксперименты по определению давления излучения на отражающие и поглощающие тела, подтвердившие вывод теории Максвелла, были выполнены П. Н. Лебедевым (1900 г.). Опыты Лебедева имели огромное значение для утверждения электромагнитной теории Максвелла (слайд 12).



Слайд 12. Давление электромагнитных волн



Слайд 13. Элементарный диполь

Таким образом, электромагнитное поле обладает всеми признаками материальных тел — энергией, конечной скоростью распространения, импульсом, массой. Это говорит о том, что электромагнитное поле является одной из форм существования материи.

Первое экспериментальное подтверждение электромагнитной теории Максвелла было дано примерно через 15 лет после создания теории в опытах Г. Герца (1888 г.). Герц не только эксперимен-

тально доказал существование электромагнитных волн, но впервые начал изучать их свойства — поглощение и преломление в разных средах, отражение от металлических поверхностей и т. п. Ему удалось измерить на опыте длину волны и скорость распространения электромагнитных волн, которая оказалась равной скорости света.

Опыты Герца сыграли решающую роль для доказательства и признания электромагнитной теории Максвелла. Через семь лет после этих опытов электромагнитные волны нашли применение в беспроводной связи (А. С. Попов, 1895 г.).

Электромагнитные волны могут возбуждаться только ускоренно движущимися зарядами. Цепи постоянного тока, в которых носители заряда движутся с неизменной скоростью, не являются источником электромагнитных волн. В современной радиотехнике излучение электромагнитных волн производится с помощью антенн различных конструкций, в которых возбуждаются быстропеременные токи (слайд 13).

Следует обратить внимание на то, что максимальный поток электромагнитной энергии излучается в плоскости, перпендикулярной оси диполя. Вдоль своей оси диполь не излучает энергии. Герц использовал элементарный диполь в качестве излучающей и приемной антенн при экспериментальном доказательстве существования электромагнитных волн.

Трудно переоценить практическое значение электромагнитных волн. Одним из самых замечательных технических применений электромагнитных волн является их использование для целей связи.

Сформулируем только основные физические принципы радиосвязи:

1) колебательный контур превращает ток проводимости в ток смещения, для передачи которого на расстояние не нужны провода;

2) переход от закрытого колебательного контура к открытому позволяет получить электромагнитные волны большой частоты (до 10^8 Гц), что обеспечивает их большую интенсивность;

3) модуляция колебаний, т.е. получение таких высокочастотных колебаний, амплитуда или фаза которых меняется со звуковой частотой;

4) усиление при приеме;

5) демодуляция [4].

Изучение свойств электромагнитных волн, теоретически предсказанных М.Фарадеем и Д.Максвеллом и практически доказанных Г.Герцем, приводило к мысли о возможности их использования для организации беспроводной связи. Несколько исследователей попытались решить эту задачу. Добились успеха русский ученый А.С.Попов и итальянец Г.Маркони.

Впервые А.С.Попов продемонстрировал работу своего «прибора для обнаружения и регистрирования электрических колебаний» на заседании Русского физико-химического общества в ходе обстоятельного доклада 7 мая 1895 г. Прибор откликался на посылки волн от «герцевого вибратора», возбуждаемого катушкой Румкорфа, на расстоянии 25 метров. Это была демонстрация первого в мире радиоприёмника, открывшего эру радио (слайды 14–17).

А.С.Попов использовал удачный индикатор электромагнитных волн, основанный на использовании металлических опилок. Свойство металлических порошков менять свои электрические свойства под действием электромагнитных волн было использовано в приборе, который назывался когерер: в стеклянную трубочку насыпаны мелкие опилки и сделаны металлические выводы из нее [5].

На II и IV курсах физического факультета по специальности 050110 — «Физика» был проведен педагогический эксперимент. IV курсу физического факультета (группа ФОР-401) в рамках спецкурса «Методика преподавания нетрадиционных разделов физики в средней школе» был предложен физический диктант в двух вариантах по 10 вопросов в каждом на тему «Магнитное поле и его характеристики. Электромагнитная индукция. Теория Максвелла».

Результаты оценивались в баллах, в буквенных эквивалентах (в соответствии с кредитной технологией обучения) и традиционными оценками. Результаты таковы (диаграмма 1): 75 % оценок «отлично», 25 % оценок «хорошо» (буквенные эквиваленты А, А-, В; баллы — 4,0; 3,67; 3,0). Результат считаем закономерным, так как студенты владеют не только теорией, но и большими практическими навыками в написании физических диктантов. После прохождения каждого раздела спецкурса в группе проводился физический диктант.



Первая в мире смысловая радиограмма, осуществленная 7 марта 1895 года А.С. Поповым, содержала всего два слова: "Генрих Герц" как дань уважения памяти великого ученого, открывшего дверь в мир радио.

Слайды 14–17. Радиосвязь. Приемник А.Попова

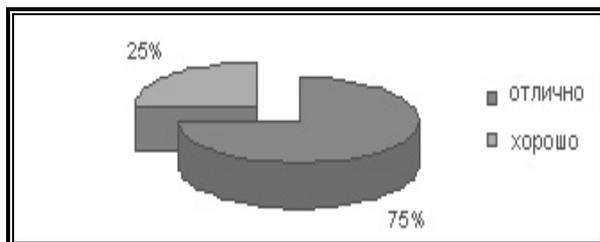


Диаграмма 1. Результаты написания физического диктанта. IV курс

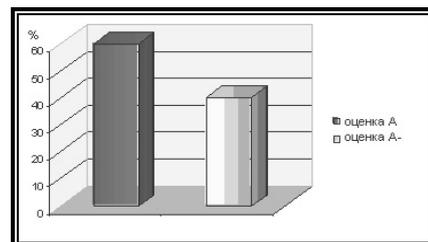


Диаграмма 2. Результаты тестирования. IV курс

Тесты включали 20 вопросов, из которых 13 — задачи. Тем не менее результаты тестирования оказались даже выше, чем результаты физических диктантов (диаграмма 2): 60 % студентов получили оценку «отлично» (4,0 балла; буквенный эквивалент А); 40 % студентов также получили оценку «отлично», но с меньшим количеством баллов (3,67 балла; буквенный эквивалент А-). Это вполне объяснимо: в тестах предлагаются варианты ответов; работая с тестами, студенты чувствуют себя более раскованно; система проверки с помощью тестов студентам более знакома и привычна. Считаем, однако, при всем сказанном выше, что уровень тестов был достаточно высок.

В контрольной работе студентам было предложено по четыре задачи в двух вариантах, из них три аналитических и одна качественная. Результаты контрольной работы ниже, чем результаты других форм контроля (диаграмма 3): 34 % студентов получили оценку «отлично» (4,0 и 3,67 балла; буквенные эквиваленты А и А-), 66 % — оценку «удовлетворительно» (2,33 балла, буквенный эквивалент С+). Считаем, что причин таких результатов несколько: во-первых, две задачи из четырех были повышенной сложности; во-вторых, к сожалению, студенты плохо решают качественные задачи, так как недостаточно владеют навыками методического анализа содержания и решения задач. Основной причиной, с нашей точки зрения, является общепринятая тестовая система контроля уровня подготовки и учащихся, и студентов, которая не способствует приобретению соответствующих навыков. Поэтому, если в аналитических задачах этот недостаток можно скомпенсировать, если есть достаточные навыки в математических преобразованиях, то при решении качественных задач остается только физический анализ существа дела.

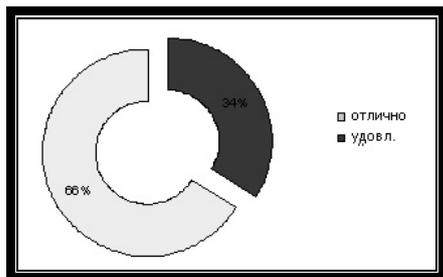
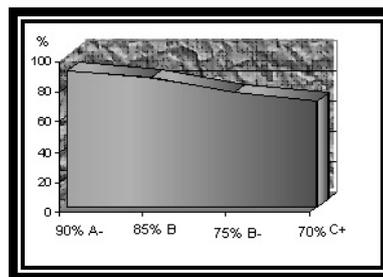


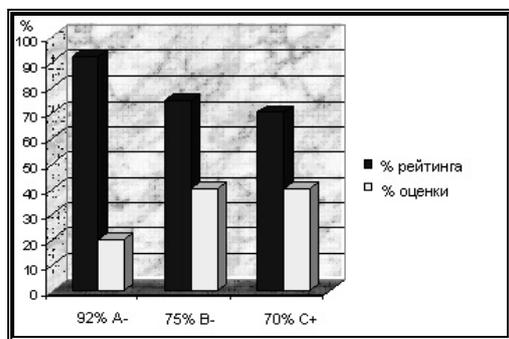
Диаграмма 3. Результаты контрольной работы. IV курс



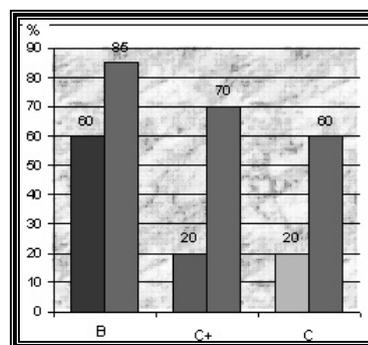
Гистограмма 1. Разброс в рейтинге при написании контрольной работы. II курс

Наиболее серьезные навыки в решении задач студенты приобретают на младших курсах. Подтверждение этому — результаты контрольной работы на II курсе. Студентам II курса (группа ФОР-201) было предложено четыре задачи, причем две из них — повышенной сложности (на электромагнитную индукцию). Что касается первой и второй задач (на силу Ампера и силу Лоренца), то и их решение требовало глубокого владения материалом. Результаты таковы: 34 % студентов получили оценку «отлично» (3,67 балла; буквенный эквивалент A-), 51 % — «хорошо» (3,0 и 2,67 балла; буквенные эквиваленты B и B-), 15 % — «удовлетворительно» (2,33 балла; буквенный эквивалент C+). Считаем положительным тот факт, что разброс в рейтинге сравнительно небольшой: от 90 до 70 % (гистограмма 1), а это свидетельствует о том, что группа II курса достаточно сильная и ее студенты мало отличаются по уровню подготовки.

Той же группе студентов был предложен физический диктант из двух вариантов по 12 вопросов в каждом. Результаты таковы: 20 % студентов получили оценку «отлично» (3,67 балла; буквенный эквивалент A-), 40 % — оценку «хорошо» (2,67 балла; буквенный эквивалент B-), 40 % — оценку «удовлетворительно» (2,33 балла; буквенный эквивалент C+). Более низкие результаты физического диктанта по сравнению с контрольной работой объясняем тем, что у студентов курса нет навыков в написании физических диктантов. Тем не менее разброс в рейтинге по группе невелик: от 92 до 70 % (гистограмма 2).



Гистограмма 2. Разброс в рейтинге при написании физического диктанта. II курс



Гистограмма 3. Разброс в рейтинге при тестировании. II курс

Тесты в двух вариантах включали по 20 вопросов каждый. Результаты тестирования: 60 % получили оценку «хорошо» (3,0 балла; буквенный эквивалент B) и 40 % — «удовлетворительно» (2,33 и 2,0 балла; буквенные эквиваленты C+ и C). Разброс в рейтинге и здесь невелик — от 85 до 60 % (гистограмма 3). И хотя навыки в тестировании у студентов, безусловно, есть, но, во-первых, тесты по содержанию были достаточно сложными, а, во-вторых, студенты неразумно распределили время на написание физического диктанта и на тестирование (оба вида контроля проводились в течение 50 минут). Обращает на себя внимание и тот факт, что студенты правильно ответили на сложные вопросы, связанные, например, с током смещения, уравнениями Максвелла, и допустили ошибки в ответах на гораздо более простые вопросы, что подтверждает наше предположение о том, что студенты уделали больше внимания сложным вопросам, а на простые вопросы у них просто не хватило времени.

Выводы

1. В данной статье предлагается логический переход от явления электромагнитной индукции к теории Максвелла и ее практическому применению к анализу электромагнитных волн с использованием интерактивных технологий. Особого внимания заслуживает вывод закона электромагнитной индукции (в формулировке Максвелла) на основе законов сохранения энергии и инерции и анализ основных свойств электромагнитных волн без использования весьма сложного математического аппарата.

2. Предлагаемый материал иллюстрируется с помощью фрагментов презентации, подготовленной авторами диаграмм и гистограмм.

3. Приводятся результаты педагогического эксперимента на II и IV курсах физического факультета КарГУ им. Е.А.Букетова по специальности 050110 — «Физика».

4. Содержание статьи базируется на использовании опыта работы авторов как в вузе, так и в школе. Поэтому изложенный в ней материал может быть полезен в преподавании курсов общей физики и спецкурсов в университете и в физико-математических классах средней школы.

References

- 1 Ilyina L.F., Tazhibayeva D.K. The using of interactive technologies during «Electricity and magnetism» part study in general physics course // Present-day tendencies of higher and education system development Release of Republic guidance conference. — Karaganda: State Industrial University. Ser. Physics. — 2010. — 5 Nov. — P. 171–174.
- 2 Ilyina L.F., Tazhibayeva D.K. The using of innovation technologies during magnetic phenomenon study // Vestnik KarGU. Ser. Physics. — 2010. — № 3 (59). — P. 84–89.
- 3 Ilyina L.F., Nursultanova A.H. Teaching technique of electromagnetism principles in secondary school with using of interactive technologies // Vestnik KarGU. Ser. Physics. — 2009. — № 4 (56). — P. 81–85.
- 4 Physics e-book. <http://ultra.lan>.
- 5 Ilyina L.F. Technical guidelines by the «Electricity and magnetism» part. — Karaganda: KarSU publ., 1991. — 224 p.
- 6 References of «Radiomuseum» website (radiomuseum.ur.ru).

Л.Ф.Ильина, Д.К.Тәжібаева

Электромагниттік индукция құбылысын зерттегенде және жалпы физика курсында Максвелл теориясының элементтерін практикалық қолдануда интерактивтік технологияларды қолдану

Қазіргі кезде ақпаратты ұғу процесі мен адамның интеллектуалдық даму процесі жана жолдар мен технологияларды жасау мен интенсификациялауды мәжбүр етеді. Макроскопиялық электродинамика теориясын түсінуге дейін, материяның табиғаты мәселесін кеңейту қажет. Сондықтан электродинамикада материяның басқа түрі енгізіледі, өрістік материя, демек, электромагниттік өріс. Бұл бөлімнің оқытылуы өте қиын, сондықтан оны қазіргі заманның интерактивті технологияларынсыз оқып үйрену мүмкін емес. Бұл жағдаймен сәйкес «Электрлік күші мен магнетизм» бөлімін өткенде инновациондық технологиялар мен электрондық білім беру ресурстар қолдануда әдістерді тексеру жүргізілді.

L.F.Ilyina, D.K.Tazhibayeva

The using of interactive technologies during electromagnetic induction phenomena study with practical using of Maxwell's theory elements in physics of general course

Information's learning process and process of person intellectual development demand intensification and using of new methods and technologies at present time. Before understanding the heart of macroscopic electrodynamics theory it is necessary to widen and extend matter concept. Just one kind of matter — substance has in view in the classical variant. Another form of matter — field substance, i.e. electrodynamics field, is introduced exactly in electrodynamics. Section not traditional, difficult enough, therefore its development without application of modern interactive technologies inconveniently. In this article in conformity with it the approbation of methods on basis of innovation technologies and electronic educational resources using was carried out.

АВТОРЛАР ТУРАЛЫ МӘЛІМЕТТЕР СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

- Arkhipov V.V.** — candidate of phys.-math. sciences, Associate Professor, Karaganda State University named after E.A.Buketov.
- Aryngazin K.M.** — doctor of ped. sciences, Professor, Karaganda State University named after E.A.Buketov.
- Baltabekov A.S.** — PhD student, Karaganda State University named after E.A.Buketov.
- Bazanov A.V.** — candidate of technical sciences, research fellow, Chemistry Institute of Solutions at the Russian Academy of Sciences.
- Dikhanbayev K.K.** — candidate of phys.-mat. sciences, Senior Researcher, Laboratory of semiconducting optoelectronics and nanophotonics, Scientific Research Institute of Experimental and Theoretical Physics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty.
- Guchenko S.A.** — junior research fellow, Karaganda State University named after E.A.Buketov.
- Ilyina L.F.** — candidate of phys.-math. sciences, Associate Professor, Karaganda State University named after E.A.Buketov.
- Jurov V.M.** — candidate of phys.-mat. sciences, Associate Professor, Senior Researcher, Karaganda State University named after E.A.Buketov.
- Kambarova Z.T.** — master of science, PhD student, Karaganda State University named after E.A.Buketov.
- Karstina S.G.** — candidate of phys.-math. sciences, Associate Professor, Division Head, Karaganda State University named after E.A.Buketov, Postgraduate Education Department and International Programmes.
- Kim L.M.** — doctor of phys.-math. sciences, Professor, Karaganda State University named after E.A.Buketov.
- Koketaitegi T.A.** — doctor of phys.-math. sciences, Professor, Karaganda State University named after E.A.Buketov.
- Kolt M.V.** — student, Karaganda State University named after E.A.Buketov.
- Kudusov A.S.** — candidate of phys.-math. sciences, Head of General and Theoretical Physics Department, Karaganda State University named after E.A.Buketov.
- Kuketayev A.T.** — manager-analyst, Primatics Financial, McLean, VA, USA.
- Padohin V.A.** — doctor of phys.-math. sciences, Professor, Head of a Laboratory, Chemistry Institute of Solutions at the Russian Academy of Sciences, Ivanovo, Russia.
- Salkeeva A.K.** — candidate of phys.-math. sciences, Associate Professor, Karaganda State Technical University, chair of physics.
- Saulebekov A.O.** — doctor of phys.-math. sciences, Associate Professor, Dean of Physical Faculty, Karaganda State University named after E.A.Buketov.
- Shunkeev K.S.** — doctor of phys.-math. sciences, Professor, Pro-rector on Educational and Methodical Work, Aktobe State Pedagogical Institute, Aktobe.
- Tagaeva B.S.** — candidate of phys.-math. sciences, Senior Lecturer, Karaganda State University named after E.A.Buketov.
- Tazhibayeva D.K.** — bachelor, Postgraduate student, Karaganda State University named after E.A.Buketov.

- Trubitsyn A.A.** — doctor of phys.-math. sciences, Professor, Director of Scientific Educational Center of innovational technologies in electronics, Ryazan State Radiotechnical University, Russia.
- Vassilieva I.F.** — master of science, Senior Lecturer, Karaganda State University named after E.A.Buketov.
- Venos D.** — PhD, research fellow, Nuclear Physics Institute ASCR, Rez. near Prague, Czech Republic.
- Vertiyagina E.N.** — candidate of phys.-math. sciences, Senior Lecturer, L.N.Gumilyov Eurasian National University, Department of Nuclear physics, New materials and Technologies, Astana.
- Zhanturina N.N.** — master of science, teacher, Aktobe State Pedagogical Institute, The chair of theoretical and experimental physics, Aktobe.