

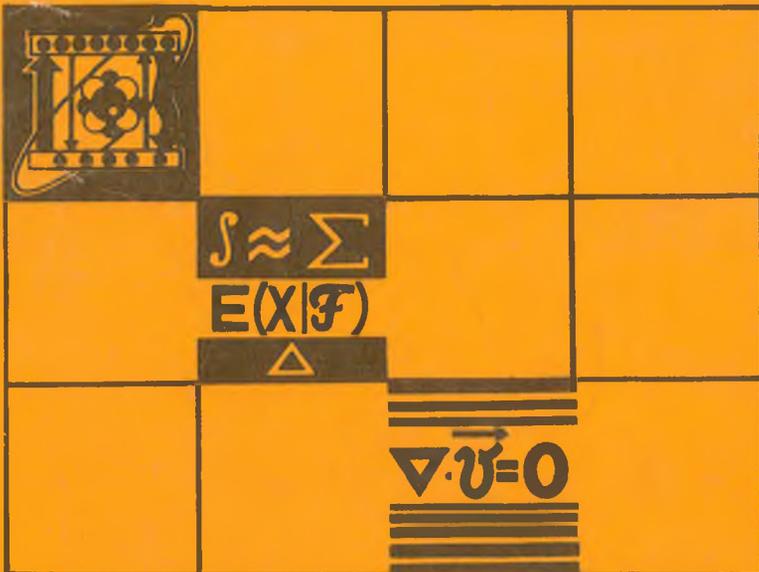
ВЕСТНИК

Белорусского государственного
университета

СЕРИЯ 1

Физика
Математика
Механика

2'93



СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

24	Феранчук И. Д., Ли Суан Хай (СРВ). Операторный метод в задаче о взаимодействии системы двухуровневых атомов с одномодовым квантовым полем	3
22	Сирота Н. Н. Третий закон термодинамики. II	7
8	Грузинский В. В., Кухто А. В., Хон Бен И. (КНДР). Генерационные и спектрально-люминесцентные свойства некоторых новых производных нафталимида	17
5	Бойков В. Н., Журавлева Ю. В., Коява В. Т., Красовский А. Н., Шалаховская Г. В., Умрейко Д. С. Корреляции в положении и форме линий низкотемпературных спектров люминесценции ураниловых кристаллов с островной структурой	21
21	Последович М. Р., Эль-Нассер Х. (Иордания). Спектроскопические свойства безводных дисульфатоуранилатов щелочных металлов	26
20	Новиков А. П., Урбанович А. И., Нгуен Ван Конг (СРВ), Хадарина О. С. Температурные поля в полупроводниковых кристаллических пластинах при ионной имплантации	32
28	Попечиц В. И. Химическая устойчивость растворов трикарбоцианиновых красителей	36
13	Зенченко С. А., Лешкевич С. В. Резонатор для многопучкового лазера	41
9	Грушевская Г. В., Хмельницкий А. И. Протекание диффузионных процессов в пространственно-распределенных системах типа антиген—антитело	44

МАТЕМАТИКА, МЕХАНИКА

2	Абдурахимов А. О. Оптимизация линейной системы по принципу получения гарантированного результата	48
11	Нгуен Дык Хиеу (Вьетнам). Адаптивный метод решения сепарабельных задач кусочно-линейного программирования	51
7	Громак В. И., Луцевич Ж. А. Нелинейное уравнение, связанное с уравнением Sine-Gordon, и третье уравнение Пенлеве	55
11	Мататов В. И., Сабынич Л. В. Исследование подвижных особенностей неавтономных систем Гамильтона с кубическими нелинейностями	59
25	Третьякова Л. Г. К задаче о двоякопериодических решениях квазилинейного телеграфного уравнения	63
74	Кулешов А. А., Мухаммад Шами Хассо. Классическая проблема моментов и некоторые задачи теории линейных самосопряженных операторов	67
10	Исаченко А. Н., Феденя О. А. Многогранник разрезов графа	71
17	Зверович В. Э., Зверович И. Э., Орлович Ю. Л. Каталог связанных 4-регулярных локальносвязных графов	74
22	Размыслович Г. П. К проблеме построения решения линейной регулярной системы	76

ВЕСТНИК

Белорусского государственного
университета

НАУЧНО-ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Издается с января 1969 года
один раз в четыре месяца

СЕРИЯ 1

Физика
Математика
Механика
2'93

МАЙ



МИНСК
„УНИВЕРСИТЕТСКОЕ”

Главный редактор В. Г. РУДЬ

Ответственный секретарь П. Н. БАРАНОВСКИЙ

Редакционная коллегия серии:

*А. И. КОМЯК (ответственный редактор),
Л. М. БАРКОВСКИЙ (зам. ответственного редактора),
В. Г. БАРЫШЕВСКИЙ, А. М. БЕЛЬСКИЙ (ответственный
секретарь), В. В. БОБКОВ (зам. ответственного редактора),
Е. С. ВОРОПАЙ, Р. Ф. ГАБАСОВ, В. А. ГАЙСЕНКО,
В. В. ГРУЗИНСКИЙ, Э. И. ЗВЕРОВИЧ, Л. Н. КИВАЧ,
Н. И. КОЗЛОВСКИЙ, В. И. КОРЗЮК, П. Д. КУХАРЧИК,
Н. А. ЛЕПЕШИНСКИЙ, Г. А. МЕДВЕДЕВ, В. И. МИРОНЕН-
КО, С. Г. МУЛЯРЧИК, В. Ф. СТЕЛЬМАХ, А. Ф. ЧЕРНЯВ-
СКИЙ, Н. И. ЮРЧУК*

ВЕСТНИК БЕЛОРУССКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

Серия 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

*Редактор А. И. Гуторова
Младший редактор Г. М. Добыш
Художественный редактор Р. В. Кондрад
Технический редактор и корректор Г. И. Хмарун*

Набор и верстка журнала выполнены на издательско-редакционной системе
«Сюэз»

Сдано в набор 28.05.93. Подписано в печать 29.07.93. Формат 70 × 108/16. Бумага
офс. Печать офс. Усл. печ. л. 7,0. Усл.-кр.-отг. 7,52. Уч.-изд. л. 6,87. Тираж 760 экз.
Цена 8 р.

Издательство «Университетское». 220048. Минск, проспект Машерова, 11.
Адрес редакции: 220080. Университетский городок, тел. 20-65-42.

Типография издательства «Белорусский Дом печати». 220041, Минск,
пр. Ф. Скорины, 79.

© Вестник Белгосуниверситета, 1993



УДК 539.12

И. Д. ФЕРАНЧУК, ЛИ СУАН ХАЙ (СРВ)

ОПЕРАТОРНЫЙ МЕТОД В ЗАДАЧЕ О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ СИСТЕМЫ ДВУХУРОВНЕВЫХ АТОМОВ С ОДНОМОДОВЫМ КВАНТОВЫМ ПОЛЕМ

Spectrum of a system of two-level atoms interacting with a single-mode electromagnetic field is calculated by means of the Operator Method without the Rotating-Wave Approximation and with arbitrary thickness of medium.

Рассмотрим квантовомеханическую систему со следующим гамильтонианом ($\hbar = c = 1$) [1]:

$$\hat{H} = \epsilon a^+ a + \sum_j \left\{ \frac{\omega_0}{2} \sigma_j^{(3)} - i \frac{g}{2} (\sigma_j^{(+)} - \sigma_j^{(-)}) (a e^{ikr_j} + a^+ e^{-ikr_j}) \right\}, \quad (1)$$

где $\sigma_j^{(3)}$, $\sigma_j^{(\pm)} = \sigma_j^{(1)} \pm i \sigma_j^{(2)}$ – матрицы Паули, определяющие состояние двухуровневого атома, расположенного в точке r_j и с интервалом ω_0 между энергетическими уровнями; a и a^+ – соответственно операторы уничтожения и рождения фотона с импульсом k и частотой ϵ ; взаимодействие между атомами и полем определяется параметром

$$g = d \sqrt{\frac{2\pi\epsilon}{\Omega}}, \quad (2)$$

причем d – дипольный момент резонансного перехода; Ω – нормировочный объем системы.

Несмотря на то, что после классической работы Дике [2] гамильтониан (1) широко используется для моделирования различных физических процессов в резонансных и инвертированных средах (см., напр., [1, 3] и цитированную литературу), расчеты его собственных функций и собственных значений, а также анализ динамики системы проводятся либо в приближении вращающейся волны (ПВВ), либо в рамках модели Дике (МД). Как известно, каждое из этих приближений имеет ограниченную область применимости: МД можно использовать только для систем с характерным размером a , меньшим длины волны излучения ($ka \ll 1$) [1], а ПВВ, эквивалентное, по существу, резонансному приближению при вычислении квазиэнергий двухуровневого атома в монохроматическом поле [4], становится неприменимым при достаточно большой амплитуде когерентного электромагнитного поля, возникающего в среде при высокой плотности атомов.

Для различных физических приложений представляет большой интерес выход за рамки указанных приближений при исследовании системы с гамильтонианом (1). В настоящей работе мы используем для этой цели операторный метод (ОМ) приближенного решения уравнения Шредингера, впервые введенный в работе [5]. Как было показано на примерах различных физических систем, и в частности для атома во внешнем поле [6] или при описании взаимодействия частицы с квантовым полем [7], уже нулевое приближение ОМ дает такую аппроксимацию для всего спектра решений уравнения Шредингера, которая

остается равномерно пригодной во всем диапазоне изменения параметров гамильтониана, а последующие приближения достаточно быстро сходятся к точным решениям. Как будет показано ниже, аналогичные результаты получаются на основе ОМ и для системы (1).

Итак, рассмотрим уравнение Шредингера

$$\hat{H}|\Psi_\nu\rangle = E_\nu|\Psi_\nu\rangle, \quad (3)$$

где \hat{H} – гамильтониан (1), а $|\Psi_\nu\rangle$ – собственный вектор, соответствующий энергии E_ν , которая зависит от набора квантовых чисел ν .

В соответствии с [5–7] схема применения ОМ включает следующие операции: 1) использование канонического преобразования, которое позволяет ввести в гамильтониан совокупность произвольных параметров, с помощью которых можно описать изменения, происходящие в невозмущенной системе при учете взаимодействия; 2) определенный метод выделения гамильтониана нулевого приближения \hat{H}_0 с известным спектром собственных значений из оператора \hat{H} и выбор оптимальных значений параметров; 3) использование итерационной схемы ОМ для вычисления последующих приближений и получения точного решения.

Из физических представлений о свойствах рассматриваемой системы [1–3] следует, что взаимодействие атомов с электромагнитным полем приводит к переходу каждого из них в некоторую суперпозицию основного и возбужденного состояний, зависящую от координаты атома, что можно описать с помощью соответствующего вращения матриц $\sigma_j^{(\alpha)}$.

С другой стороны, излучение атомов приводит к возникновению отличного от нуля среднего значения операторов поля, что соответствует выделению в них классической компоненты [7]. В результате приходим к следующему каноническому преобразованию;

$$\sigma_j^{(\alpha)} = \gamma_j^{(\alpha)} \bar{\sigma}_j^{(3)} + A_j^{(\alpha)} \bar{\sigma}_j^{(+)} + A_j^{(\alpha)*} \bar{\sigma}_j^{(-)}; \quad \alpha = +, -, 3; \quad (4)$$

$$a = u + b; \quad a^\dagger = u^* + b^\dagger; \quad [b, b^\dagger] = 1, \quad (5)$$

причем u является c -числом, а векторы γ_j и A_j определяют преобразование спиновых матриц j -го атома к такому представлению, где осью квантования является вектор γ_j [8]:

$$\gamma_j^{(\alpha)} = \gamma_j^{(\alpha)*}; \quad \gamma_j^{(3)2} + \gamma_j^{(+)} \gamma_j^{(-)} = 1, \quad (6)$$

$$A_j^{(+)} = \mp e^{i\varphi_j} \frac{(1 + \gamma_j^{(3)})}{2}; \quad A_j^{(3)} = \frac{1}{2} \sqrt{1 - \gamma_j^{(3)2}}; \quad \operatorname{tg} \varphi_j = \frac{\gamma_j^{(2)}}{\gamma_j^{(1)}}.$$

Значения величин u и $\gamma_j^{(\alpha)}$ остаются пока произвольными, а гамильтониан \hat{H} в новом представлении принимает следующий вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V};$$

$$\hat{H}_0 = \epsilon (|u|^2 + b^\dagger b) + \sum_j \left[\frac{\omega_0}{2} \gamma_j^{(3)} - i \frac{g}{2} (\gamma_j^{(+)} - \gamma_j^{(-)}) \times \right. \\ \left. \times (u e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} + u^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}) \right] \bar{\sigma}_j^{(3)}; \quad (7)$$

$$\hat{V} = \sum_j \left\{ \frac{\omega_0}{2} (A_j^{(3)} \bar{\sigma}_j^{(+)} + A_j^{(3)*} \bar{\sigma}_j^{(-)}) - i \frac{g}{2} [(A_j^{(+)} + A_j^{(-)}) \bar{\sigma}_j^{(+)} - \right. \\ \left. - (A_j^{(+)*} + A_j^{(-)*}) \bar{\sigma}_j^{(-)}] [(u + b) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} + (u^* + b^\dagger) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}] - \right. \\ \left. - i \frac{g}{2} (\gamma_j^{(+)} - \gamma_j^{(-)}) (b e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} + b^\dagger e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}) \bar{\sigma}_j^{(3)} \right\} + \epsilon (u^* b + u b^\dagger). \quad (8)$$

В соответствии с [5–7], гамильтониан нулевого приближения ОМ \hat{H}_0 выделяется таким условием, чтобы после проведения канонического преобразования (4, 5) он коммутировал с операторами числа любых возбуждений в рассматриваемой системе. Тогда его собственные векторы и собственные значения очевидны:

$$|\Psi_e^{(0)}\rangle = | \{j^+\}; \{j^-\}, n \rangle \equiv \prod_{j^+} X_j^{(+)} \prod_{j^-} X_j^{(-)} |n\rangle; \quad (9)$$

$$E_e^{(0)} \equiv E_{\{j^+\}, \{j^-\}}^{(0)} = \epsilon (n + |nl|^2) + \sum_{(j^+)} \epsilon_j - \sum_{(j^-)} \epsilon_j,$$

где символ $\{j^{\pm}\}$ определяет совокупность координат атомов, находящихся соответственно в возбужденном $X_j^{(+)}$ или основном $X_j^{(-)}$ состояниях при произвольном пока направлении оси квантования, т. е.

$$\tilde{\sigma}_j^{(3)} X_j^{(\pm)} = \pm X_j^{(\pm)},$$

причем вектор $|n\rangle$ – собственный для оператора $b^+b = \hat{n}$, $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$; $b|0\rangle = 0$, а величины ϵ_j определяются формулой

$$\epsilon_j = \frac{\omega_0}{2} \gamma_j^{(3)} - i \frac{g}{2} (\gamma_j^{(+)} - \gamma_j^{(-)}) (ue^{ikr_j} + u^*e^{-ikr_j}).$$

Искусственно введенные параметры u и γ фактически определяют выбор представления для базисного набора волновых функций системы, поэтому для любого набора квантовых чисел

$$\frac{\partial E_e}{\partial \gamma_j^{(\pm)}} = \frac{\partial E_e}{\partial u} = \frac{\partial E_e}{\partial u^*} = 0.$$

Следовательно, величины $E_e^{(0)}$ (γ_j , u) будут наилучшим приближением для E_e при оптимальном выборе параметров γ_j и u , определяемом уравнениями

$$\frac{\partial E_e^{(0)}}{\partial \gamma_j^{(\pm)}} = \frac{\partial E_e^{(0)}}{\partial u} = \frac{\partial E_e^{(0)}}{\partial u^*} = 0, \quad (10)$$

которые и соответствуют нулевому приближению ОМ [5–7].

Уравнения (10) с учетом связи (6) между величинами $\gamma_j^{(\pm)}$ приводят к следующим результатам:

$$\gamma_j^{(\pm)} = \pm i \frac{2g}{\omega_0} \gamma_j^{(3)} (ue^{ikr_j} + u^*e^{-ikr_j}); \quad (11)$$

$$u = i \frac{g}{2\epsilon} \sum_j (\gamma_j^{(+)} - \gamma_j^{(-)}) e^{-ikr_j};$$

$$E_{(N_+, n)}^{(0)} = \frac{1}{2} \omega_0 \sum_j \gamma_j^{(3)} + \epsilon (-|nl|^2 + n),$$

где введено обозначение

$$\sum_j' = \sum_{j=1}^{N_+} - \sum_{j=N_++1}^{N_0},$$

причем N_0 – полное число атомов, из которых N_+ находятся в возбужденном состоянии.

Пусть ρ_- и ρ_+ – плотности атомов, находящихся соответственно в основном и возбужденном состояниях, а $\rho = \rho_+ + \rho_-$ – полная плотность атомов. Предполагая выполненным условие

$$\rho \pm \lambda^3 \gg 1, \quad \lambda = \frac{2\pi}{k}, \quad (12)$$

можно записать:

$$\sum_j' = (\rho_+ - \rho_-) \int_{\Omega} dr = (2\rho_+ - \rho) \int_{\Omega} dr.$$

Дальнейшие вычисления зависят от формы и геометрических размеров исследуемой системы. Поэтому для определенности примем, что нормировочный объем имеет форму цилиндра с площадью поперечного

сечения S и длиной $L = \lambda \cdot \Delta$ (λ – длина волны излучения, Δ – безразмерная величина), причем ось цилиндра совпадает с осью Z , направленной вдоль волнового вектора k . Тогда с помощью уравнений (6) и (11) находим:

$$\gamma_j^{(3)} = \gamma^{(3)}(z) = [1 + \xi^2 u_0^2 \cos^2(kz + \varphi)]^{-1/2};$$

$$u_0 = -\frac{1}{4} \frac{\omega_0}{\epsilon} \xi^2 u_0 \frac{(2\rho + -\rho)}{\pi \Delta} J_1, \quad (13)$$

где введены следующие обозначения:

$$u = u_0 e^{i\nu}; \quad \xi = 4g/\omega_0;$$

$$\varphi = \pi \left(\frac{1}{2} - \Delta \right) \quad l \in \nu;$$

$$J = \frac{1}{\xi u_0} \left[\frac{1}{\mu} E(\Pi \Delta, \mu) - \frac{\mu}{\xi^2 u_0^2} F(\Pi \Delta, \mu) \right]; \quad (14)$$

$$\mu = \left[1 + \frac{1}{\xi^2 u_0^2} \right]^{-1/2},$$

и функции $F(\psi, k)$ и $E(\psi, k)$ являются неполными эллиптическими интегралами 1-го и 2-го рода соответственно. Как видно из (13), без нарушения общности можно считать $\varphi = 0$.

Энергия системы определяется формулой

$$E^{(0)}(\rho_+, n) = \frac{1}{2} \omega_0 \frac{(2\rho + -\rho)}{\Pi \Delta} \Omega \frac{\mu}{\xi u_0} F(\Pi \Delta, \mu) + \epsilon n -$$

$$- \frac{1}{16} \frac{\omega^2}{\epsilon} \xi^4 u_0^2 \left[\frac{(2\rho + -\rho)\Omega}{\Pi \Delta} \right]^2 J^2. \quad (15)$$

Обсудим теперь качественные особенности рассматриваемой системы, которые вытекают из анализа уравнений (13)–(15), определяющих ее стационарные состояния. Прежде всего заметим, что эти уравнения имеют решение $u = 0$, $\gamma^{(3)} = 1$, которое приводит к энергетическим уровням, совпадающим с уровнями системы без взаимодействия,

$$E_H^{(0)} = \frac{\omega_0}{2} (2\rho + -\rho) \Omega + \epsilon n. \quad (16)$$

Назовем такое состояние системы нормальной фазой (Н-фазой).

Однако наряду с указанной фазой системы возможно и такое ее состояние, при котором возникает отличная от нуля классическая компонента электромагнитного поля, обусловленная коллективным взаимодействием атомов, в результате которого они находятся в некоторой взаимно согласованной суперпозиции состояний. Такая коллективная фаза системы (К-фаза) возникает только при таких параметрах, когда существует отличное от нуля решение следующего уравнения:

$$-\frac{1}{4} \frac{\omega_0}{\epsilon} \xi^2 \frac{(2\rho + -\rho)}{\Pi \Delta} J = 1. \quad (17)$$

При этом можно доказать, что если К-фаза возникает, то она является энергетически более выгодной, чем Н-фаза, т. е.

$$E_K^{(0)}(\rho_+, n) < E_H^{(0)}(\rho_+, n). \quad (18)$$

Следует отметить, что при рассмотрении стационарного уравнения Шредингера нельзя еще говорить о фазовом переходе в системе, который требует анализа термодинамического равновесия. Однако можно утверждать, что при таких параметрах, когда уравнение (17) не имеет решения, энергетические уровни свободной системы (16) устойчивы по отношению к учету взаимодействия, которое в следующих порядках приближения приведет к относительно небольшому сдвигу уровней без существенного изменения их структуры. В то же время при $u_0 \neq 0$ возникает качественная

перестройка уровней, структура которых, в свою очередь, является устойчивой при учете последующих приближений ОМ. Условия указанного перехода можно приближенно найти, если использовать следующие неравенства для эллиптических функций [9]:

$$(1 - k^2)^{1/2} \psi \leq E(\psi, k) \leq \psi; \quad \frac{\psi}{(1 - k^2)^{1/2}} \geq F(\psi, k) \geq \psi.$$

Учитывая (14) и (17), получаем следующее условие на параметры системы:

$$-\frac{1}{4} \frac{\omega_0}{\epsilon} \xi^2 \Omega (2\rho_+ - \rho) \geq 1. \quad (19)$$

Можно показать, что нулевое приближение ОМ, определяемое формулами (13)–(15), дает возможность воспроизвести результаты, полученные в рамках модели Дике (случай $\Delta \ll 1$) либо с помощью приближения вращающейся волны ($\xi^2 \Omega \rho \ll 1$). О равномерной пригодности полученных результатов свидетельствует также то, что поправка второго порядка по оператору V в гамильтониане (7) (поправка первого порядка ОМ по определению равна нулю) оказывается малой по сравнению с $E_0^{(0)}$ во всем диапазоне изменения параметров системы. Более детально указанные результаты, а также анализ термодинамической устойчивости системы будут рассмотрены в последующей работе.

Список литературы

1. Андреев А. В., Емельянов В. И., Ильинская Ю. А. Кооперативные явления в оптике. М., 1988.
2. Dicke R. H. // Phys. Rev. A. 1954. V. 93. № 1. P. 99.
3. Альперин М. М., Клубис Я. Д., Хижняк А. И. Введение в физику двухуровневых систем. Киев, 1987.
4. Зельдович Я. Б. // Успехи физических наук. 1973. Т. 110. № 1. С. 139.
5. Feгапчук I. D., Котагов L. I. // Phys. Lett. A. 1982. V. 88. № 5. P. 212.
6. Feгапчук I. D., Котагов L. I., Несчипор I. V. // Journ. Phys. A. 1987. V. 20. № 12. P. 3849.
7. Feгапчук I. D., Fisher S. I., Котагов L. I. // Journ. Phys. C. 1984. V. 17. № 24. P. 4309.
8. Тябликов С. В. Методы квантовой теории магнетизма. М., 1975.
9. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., 1971.

Поступила в редакцию 14.12.92.

УДК 536

Н. И. СИРОТА

ТРЕТИЙ ЗАКОН ТЕРМОДИНАМИКИ. II

From the analysis of the main statements of the third law of thermodynamics the magnetic and electrocaloric effects, temperature coefficients of the surface energy, energy fluctuations and mean square atomic displacements, thermal conductivity of solids, entropy of solution mixing, elasticities of substance vapours, solutions structure and solubility limits of the compounds near the absolute zero temperature are considered. The reasons for the systems deviations from the third law of thermodynamics near the absolute zero of temperature are analyzed.

В первой части настоящей статьи [1] критически рассмотрены основные положения [2] и некоторые следствия третьего закона термодинамики. В частности, показано, что при $T \rightarrow 0$ детерминант термодинамической устойчивости [3] $D_y \rightarrow \infty$, а все термические коэффициенты обобщенных координат и сил $(\frac{\partial X_i}{\partial T})_{X_j} \rightarrow 0$.

Продолжим рассмотрение следствий третьего закона термодинамики. Направимся линии двухфазного равновесия на фазовой диаграмме X, T однокомпонентного вещества вблизи абсолютного нуля. Из треть-

его закона термодинамики следует, что при приближении температуры к абсолютному нулю линия двухфазного равновесия однокомпонентного вещества в координатах X, T параллельна оси температуры.

Согласно обобщенному уравнению Клаузиуса – Клапейрона, производная по температуре обобщенной силы $\frac{dX_{ik}}{dT}$, соответствующая фазовому равновесию, равна отношению разностей энтропий к разности обобщенных координат, находящихся в равновесии фаз [1, 2] (при постоянстве прочих обобщенных сил):

$$\frac{dX_{ik}}{dT} = \frac{S_1 - S_2}{x_{i1} - x_{i2}}.$$

Поскольку при $T \rightarrow 0$ $S_1 \rightarrow 0$, $S_2 \rightarrow 0$ ($S_1 \equiv S_{1T}$, $S_2 \equiv S_{2T}$), касательная к линии двухфазного равновесия на фазовой диаграмме X, T нормальна к оси ординат.

На фазовых диаграммах однокомпонентного вещества при изменении давления либо напряженности магнитного или электрического полей линии двухфазного равновесия при $T \rightarrow 0$ нормальны к оси OP , OH или OE' соответственно.

Магнито- и электрокалорические эффекты. Величины магнито- и электрокалорических эффектов имеют сложную зависимость от температуры [5 – 7]. Но при приближении к абсолютному нулю температуры величины этих эффектов становятся ничтожно малыми.

Как известно, адиабатические магнито-калорические эффекты широко используются в практике, в том числе для получения низких и сверхнизких температур.

При намагничивании в сильных полях в изотермических условиях происходит упорядочение в спиновой подсистеме парамагнетика, сопровождающееся снижением энтропии и, соответственно, выделением тепла ($\Delta S < 0$, $T = \text{const}$).

При последующем адиабатическом размагничивании ($\Delta S = 0$) разупорядочение спинов сопровождается понижением температуры на ΔT . Работа, совершаемая системой при адиабатических условиях, сопровождается уменьшением ее внутренней энергии $dA_S = -dU$, т. е. $-HdB = dU$, откуда

$$\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_S = -H \left(\frac{\partial B}{\partial T}\right)_S.$$

Так как

$$\left(\frac{\partial U}{\partial H}\right) = M, \quad \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right) = -T, \quad \text{то} \quad \frac{\partial^2 U}{\partial S \partial H} = -\left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_S = \left(\frac{\partial M}{\partial S}\right)_H.$$

Следовательно,

$$\frac{dT}{dH} = -\frac{\left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H}{\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_H}.$$

В пределах возможности замены производной магнитного поля по температуре отношением $\Delta T / \Delta H$, понижение температуры при размагничивании будет

$$\Delta T_s = -\frac{\left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H}{\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_H} \Delta H.$$

Так как

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_H = \frac{c_H}{T}, \quad \text{то} \quad \Delta T_s = -\frac{T}{c_H} \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H \Delta H.$$

Из третьего закона термодинамики следует, что

$$\left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_{H, T \rightarrow 0} \rightarrow 0, \quad \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{H, T \rightarrow 0} \rightarrow 0.$$

С понижением температуры величина магнитокалорического эффекта проходит через максимум и при приближении к абсолютному нулю температуры снижается до нуля. Аналогично, у диэлектриков (сегнетоэлектриков, пьезоэлектриков) величина электрокалорического эффекта пропорциональна отношению термического коэффициента поляризации к термическому коэффициенту энтропии. Учитывая, что

$$\left(\frac{\partial T}{\partial E}\right)_S = -\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{E'},$$

или в приближении

$$\left(\frac{\partial T}{\partial E}\right)_S \approx \frac{\Delta T}{\Delta E},$$

получаем

$$\Delta T_s = -\frac{T}{c_{E'}} \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{E'} \Delta E'.$$

Температурный коэффициент поверхностной энергии. Поверхностную энергию границ раздела фаз в первом приближении можно считать пропорциональной разности свободных энергий соприкасающихся фаз, отнесенной к единице площади поверхности $\gamma = A \frac{F_2 - F_1}{\Gamma}$, где γ – поверхностная энергия, Γ – внутренняя поверхность. Производная поверхностной энергии по температуре $\frac{\partial \gamma}{\partial T} = -\frac{\Delta}{\Gamma} (S_2 - S_1)$ пропорциональна разности энтропий соприкасающихся фаз. При приближении к абсолютному нулю температуры, в соответствии с третьим законом термодинамики,

$$(S_2 - S_1)_{T \rightarrow 0} \rightarrow 0, \text{ следовательно, } \left(\frac{\partial \gamma}{\partial T}\right)_{T \rightarrow 0} \rightarrow 0,$$

Флуктуации энергии и среднеквадратичные динамические смещения атомов. Третий закон термодинамики накладывает ограничения на величину среднеквадратичных динамических смещений и флуктуации энергии системы.

Согласно теореме Гиббса, среднеквадратичные отклонения энергии U системы от ее среднего равновесного значения \bar{E} пропорциональны произведению квадрата температуры на изохорную теплоемкость

$$\overline{(E - U)^2} = \bar{E}^2 - (\bar{E})^2 = kT^2 c_v.$$

Следовательно, при $T \rightarrow 0$ обусловленные температурой флуктуации энергии $\overline{(E - U)^2}$ снижаются до нуля. С возрастанием D_v флуктуации энергии также уменьшаются. Заметим, однако, что при абсолютном нуле температуры имеют место флуктуации, обусловленные нулевой энергией.

В одноатомной конденсированной фазе флуктуация полной энергии (сумма флуктуаций потенциальной и кинетической энергии) пропорциональна среднеквадратичным динамическим смещениям атомов \bar{U}^2 из положения равновесия. Пользуясь теоремой Вириала, можно написать: при $T \rightarrow 0$, $c_v \rightarrow 0$, $(\bar{U}_T^2 - \bar{U}_{00}^2) \rightarrow 0$. При приближении к абсолютному нулю имеют место только не зависящие от температуры среднеквадратичные динамические смещения атомов \bar{U}_{00}^2 , обусловленные нулевыми колебаниями. Термические коэффициенты тепловых среднеквадратичных динамических смещений при $T \rightarrow 0$ уменьшаются до нуля

$$\left(\frac{\partial \bar{U}_T^2}{\partial T}\right)_{T \rightarrow 0} \rightarrow 0.$$

Колебания атомов в кристаллической решетке твердого тела приводят к ослаблению интенсивности I_{hkl} рассеяния рентгеновских лучей. В соответствии с кинематической теорией рассеяния [8],

$$-\ln\left(\frac{I_T}{I_0}\right)_{\text{hkl}} = 16\pi^2 \bar{U}_{T,\text{hkl}}^2 S_{\text{hkl}}^2,$$

где $S = \frac{\sin \nu}{\lambda}$ – вектор рассеяния.

Следовательно, при $T \rightarrow 0$, поскольку

$$\bar{U}_{T,\text{hkl}}^2 \rightarrow 0, \quad \left(\frac{\partial \bar{U}^2}{\partial T}\right)_{\text{hkl}} \rightarrow 0,$$

то

$$\left(\frac{I_T}{I_0}\right)_{\text{hkl}} \rightarrow 1, \quad \left(\frac{\partial I_T}{\partial T}\right)_{\text{hkl}} \rightarrow 0.$$

Касательные к кривым $I_{T,\text{hkl}}(T)$ и $\bar{U}_{T,\text{hkl}}^2(T)$ при $T \rightarrow 0$ нормальны к оси ординат.

Разность теплоемкостей ($c_X - c_x$). Согласно третьему закону термодинамики, по мере приближения к абсолютному нулю температуры теплоемкость при постоянстве обобщенной силы c_X становится равной теплоемкости при постоянстве обобщенной координаты c_x . Поскольку

$$c_{X_i} = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_{X_i} = \frac{\partial(U + X_i X_i)_{X_i}}{\partial T}; \quad c_{x_i} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{x_i},$$

$$c_{X_i} - c_{x_i} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{X_i} + X_i \left(\frac{\partial X_i}{\partial T}\right)_{X_i} - \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{x_i} = \left[\left(\frac{\partial U}{\partial X_i}\right)_T + X_i\right] \left(\frac{\partial X_i}{\partial T}\right)_{X_i}.$$

Так как

$$\left(\frac{\partial U}{\partial X_i}\right)_T = T \left(\frac{\partial S}{\partial X_i}\right)_T - X_i, \quad \left(\frac{\partial S}{\partial X_i}\right)_T = \left(\frac{\partial X_i}{\partial T}\right)_{X_i} - \left(\frac{\partial X_i}{\partial X_i}\right)_T \left(\frac{\partial X_i}{\partial T}\right)_{X_i},$$

то

$$c_{X_i} - c_{x_i} = -T \left(\frac{\partial X_i}{\partial X_i}\right)_T \left(\frac{\partial X_i}{\partial T}\right)_{X_i}^2.$$

Из третьего закона термодинамики следует, что при $T \rightarrow 0$ $\left(\frac{\partial X_i}{\partial T}\right)_{X_i} \rightarrow 0$.

Следовательно, при $T \rightarrow 0$ теплоемкость при постоянной обобщенной силе приближается и при абсолютном нуле становится равной теплоемкости при постоянной сопряженной с этой силой координате. В частности, при $T \rightarrow 0$

$$c_p - c_v = T \frac{\beta^2 \nu}{\kappa} \rightarrow 0, \quad \frac{c_p - c_v}{c_v} = -T \beta \gamma' \rightarrow 0,$$

где

$$\gamma' = -\frac{\beta \nu}{\kappa c_v}; \quad \beta = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p; \quad \kappa = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T.$$

$$c_{II} - c_B = -T \frac{\left(\frac{\partial B}{\partial T}\right)_{II}^2}{\left(\frac{\partial B}{\partial II}\right)_T} \rightarrow 0, \quad c_E - c_D = -T \frac{\left(\frac{\partial D}{\partial T}\right)_E^2}{\left(\frac{\partial D}{\partial E}\right)_T} \rightarrow 0.$$

Характеристические термодинамические функции вблизи абсолютного нуля. Все характеристические термодинамические функции могут быть выражены через теплоемкость или энтропию системы в условиях постоянства обобщенной силы или, соответственно, обобщенной координаты:

$$U_{X_i} = U_{0X_i} + \int_0^T c_{X_i} dT,$$

$$H_{X_i} = H_{0X_i} + \int_0^T c_{X_i} dT,$$

$$F_{x_i} = U_{0x_i} - T \int_0^T \frac{dT}{T^2} c_{x_i} dT,$$

$$G_{x_i} = H_{0x_i} - T \int_0^T \frac{dT}{T^2} c_{x_i} dT.$$

Проблема температурной зависимости теплоемкости, в особенности вблизи абсолютного нуля температуры, имеет не только большое практическое, но и принципиальное значение. Из приведенных выражений видно, что для всех тел, у которых межатомное взаимодействие не равно нулю, величины теплоемкостей при постоянстве обобщенных сил c_{x_i} и обобщенных координат c_{x_i} при $T \rightarrow 0$ стремятся к нулю. Тогда

$$(U_{x_i} - U_{0x_i}) \rightarrow 0; (H_{x_i} - H_{0x_i}) \rightarrow 0; (F_{x_i} - F_{0x_i}) \rightarrow 0; (G_{x_i} - G_{0x_i}) \rightarrow 0.$$

Приведем некоторые примеры. Из закона Ми-Грюнайзена о потенциальной энергии U_{Π} межатомного взаимодействия в функции объема V и, следовательно, межатомного расстояния

$$U_{\Pi} = -\frac{A}{v^m} + \frac{B}{v^n}$$

следует, что

$$\frac{dU_{\Pi}}{dT} = -\beta \left[\frac{mA}{v^m} + \frac{nB}{v^n} \right],$$

где A, B, m, n – постоянные величины.

Так как при $T \rightarrow 0$ $\beta \rightarrow 0$, то, учитывая теорему вириала, $\frac{dU_{\Pi}}{dT} \sim c_p$. Таким образом, при $T \rightarrow 0$ $c_p \rightarrow 0$, $c_v \rightarrow 0$.

Подтверждения третьего закона термодинамики могут быть получены и при анализе потенциалов Морзе, Борна, Ленарди – Джонса и др. как функций температуры.

Из рассмотрения обобщенных уравнений состояний следует, что вблизи абсолютного нуля температуры теплоемкости, обусловленные магнитными и электрическими составляющими в системах, где соответствующий вид межатомного взаимодействия не равен нулю, снижаются до нуля. Вопрос о теплоемкости и энтропии систем не взаимодействующих частиц (идеальных систем) требует более детального дополнительного обсуждения.

Для всех рассматриваемых термодинамических физико-химических систем изменение внутренней энергии определяется произведением средней энергии, соответствующей данной возбужденной степени свободы ξ , вероятности ее возбуждения $f(\xi)$, плотности состояния $g(\xi)$: $dU = g(\xi)\xi f(\xi)d\xi$. Интегрирование производится в пределах от внутренней энергии, соответствующей энергии атомизации покоящихся частиц, составляющих систему U_{00} , до значения внутренней энергии $U(\xi)$, по всем значениям ξ вплоть до ξ_m :

$$U(\xi) = U_{00} + \int_0^{\xi_m} g(\xi)\xi f(\xi)d\xi = \int_0^{\xi_m} g(\xi)\xi(f_T + f_0)d\xi.$$

Здесь $f(\xi) = f_T + f_0$ складывается из температурно-зависимой части f_T и температурно-независимой f_0 , обусловленной нулевой энергией. В этом случае, полагая, что $g(\xi)$ не зависит от температуры, выражение для теплоемкости в первом приближении запишется:

$$c(\xi) = \int_0^{\xi_m} g(\xi) \frac{\partial [\xi f(\xi)]}{\partial T} d\xi.$$

При $T \rightarrow 0$ значение $c(\xi)$ будет определяться изменением вблизи абсолютного нуля производной $\frac{\partial [\xi f(\xi)]}{\partial T}$.

Для всех функций $\xi f(\xi)$ (Бозе – Эйнштейна – Планка, Дирака и др.) при $T \rightarrow 0$ $\frac{\partial [\xi f(\xi)]}{\partial T} \rightarrow 0$. У подобных систем при наличии или отсутствии

вырождения вблизи абсолютного нуля температуры теплоемкость и температурно-зависимые части характеристических термодинамических функций, обусловленные силами химического, магнитного, электромагнитного взаимодействия, при $T \rightarrow 0$ снижаются до нуля.

Вибрационная нулевая энергия и энтропия конденсированных фаз. При абсолютном нуле температуры внутренняя энергия термодинамической системы соответствует энергии атомизации U_0 , которая состоит из потенциальной энергии взаимодействия покоящихся атомов (составляющих систему частиц) U_{00} и кинетической энергии их нулевых колебаний – нулевой энергии E_0 :

$$U_0 = U_{00} + E_0.$$

Поскольку

$$U = U_{00} + \int_0^{\xi_m} g(\xi) (f_T + f_0) \xi d\xi,$$

то при $T = 0$

$$f_T = 0, \quad U_0 = U_{00} + \int_0^{\xi_m} g(\xi) \xi f_0 d\xi.$$

В этом случае энергия нулевых колебаний

$$E_0 = \int_0^{\xi_m} g(\xi) f_0 \xi d\xi.$$

В пределах квантовой теории теплоемкости анизотропных твердых тел число пар степеней свободы Z''_m пропорционально положительной части объема n -мерного энергетического фазового пространства

$$Z''_{\max} = k_\Phi \left(\frac{\xi_m}{\xi_0} \right)^n,$$

нормированного к ξ_0 . Плотность распределения фигуративных точек в этом пространстве $g(\xi) = \frac{\partial z}{\partial \xi}$. Показатели степени n могут изменяться от 1 (одномерное пространство) до $n \geq 3$ (трехмерное пространство и пространство большей мерности).

Принимая наибольшее значение ξ равным ξ_m , для трехмерного пространства

$$\left(\frac{\xi_m}{\xi_0} \right)_x \left(\frac{\xi_m}{\xi_0} \right)_y \left(\frac{\xi_m}{\xi_0} \right)_z k_\Phi = Z''_m.$$

Полагая

$$\left(\frac{\xi_m}{\xi_0} \right)_y = \left(\frac{\xi_m}{\xi_0} \right)_x^\alpha, \quad \left(\frac{\xi_m}{\xi_0} \right)_z = \left(\frac{\xi_m}{\xi_0} \right)_x^\beta,$$

можно записать:

$$Z''_m = k_\Phi \left(\frac{\xi_m}{\xi_0} \right)^{1+\alpha+\beta} = 3N; \quad \xi_0^{1+\alpha+\beta} = \frac{k_\Phi}{3N} \xi_m^{1+\alpha+\beta}; \quad Z = \frac{3N \xi_0^{1+\alpha+\beta}}{\xi_m^{1+\alpha+\beta}}.$$

В твердом теле плотность распределения в общем случае будет

$$g(\xi) = \frac{3N(1+\alpha+\beta)}{\xi_m^{1+\alpha+\beta}} \xi^{\alpha+\beta}.$$

Для трехмерного тела $\alpha = \beta = 1$

$$g(\xi) = \frac{9N\xi^2}{\xi_m^3}, \quad E_{03} = \frac{9N}{8} \xi_m.$$

Считая $\xi_m = k\theta$, $E_{03} = \frac{9N}{8} k\theta$, для двухмерного случая $\alpha = 0, \beta = 1, E_{02} = R\theta$; одномерного $\alpha = 0, \beta = 0, g(\xi) = \frac{3N}{\xi_m}, E_{01} = \frac{3}{4} R\theta$.

Нулевым колебаниям, создающим известную неупорядоченность в

расположении центров атомов, будут соответствовать нулевые энтропии S_{01}, S_{02}, S_{03} , причем $S_0 = \varphi(S_{01}, S_{02}, S_{03})$. Наличие нулевой колебательной энтропии (меры неупорядоченности системы) не противоречит третьему закону термодинамики, поскольку нулевая энтропия не зависит от температуры и не смещает начальную точку отсчета зависящей от температуры энтропии.

Энтропия смешения растворов. Выяснение величины и роли энтропии смешения растворов, в том числе твердых, при абсолютном нуле температуры непосредственно связано с вопросом о разделении веществ на нернстовские и перннстовские тела. Считают, что на первые из них распространяется третий закон термодинамики, а на вторые нет.

Энтропия смешения растворов (конфигурационная энтропия) как мера степени их неупорядоченности определяется термодинамической вероятностью состояния W_T , которая связана с энтропией уравнением Больцмана – Планка $S = k \ln W_T$ (рассматривается единственный N -вырожденный уровень). В таком случае термодинамическая вероятность состояния равна числу возможных комплексов, осуществляющих данное состояние. При наличии i сортов атомов с числом q_i атомов данного сорта $\sum_i q_i = N$. В одном моле i -компонентной системы термодинамическая

$$\text{вероятность состояния } W_T = \frac{N!}{\prod_i q_i!}.$$

При полном упорядочении раствора и единственном невырожденном уровне основного состояния, когда все атомы «сидят» на своих местах и никакие другие равноценные состояния не реализуются. $W_T = 1, S_0 = 0$.

Определение величины энтропии смешения статистико-термодинамическим методом позволяет выявить условия справедливости третьего закона термодинамики к неупорядоченным растворам, в том числе твердым. Удобно рассматривать избыточную энтропию растворов по отношению к их нулевой энтропии смешения при абсолютном нуле, нормируя W_T к W_0 . Обычно считается, что энтропия смешения многокомпонентного идеального раствора не зависит от температуры

$$S_0 = k \ln \frac{N!}{\prod_i (x_i N)!},$$

здесь

$$x_i = \frac{q_i}{N}, \quad \sum_i x_i = 1.$$

В частности, в случае непрерывного идеального двухкомпонентного раствора нулевая энтропия смешения будет: $S_{\text{осм.ид.}} = -R[x \ln x + (1-x) \ln(1-x)]$. Энтропия смешения идеальных растворов для каждого данного состава есть величина постоянная; она сохраняет свое значение и при абсолютном нуле температуры.

Поскольку третий закон термодинамики рассматривает лишь температурно-зависимую часть энтропии, то условие $S_{\text{осм.ид.}} \neq 0$ не противоречит третьему закону термодинамики, ибо нулевая энтропия смешения не является функцией температуры.

При подсчете температурно-зависимой энтропии смешения реальных растворов необходимо учитывать активные концентрации компонентов a_A, a_B, \dots, a_i . В случае двухкомпонентного раствора АВ

$$S_{\text{AB}} = -R[a_A \ln a_A + a_B \ln a_B].$$

Вводя коэффициенты активности $f_i; a_A = f_A x_A, a_B = f_B x_B$, получим:

$$S_{\text{AB}} = -R[f_A x_A \ln(f_A x_A) + f_B x_B \ln(f_B x_B)].$$

В известном приближении активную концентрацию a_i можно представить как отношение числа перемещающихся (перескакивающих), активированных атомов данного компонента q_{iD} к общему числу перескоков атомов моля раствора N_D в единицу времени $a_i = \frac{q_{iD}}{N_D}$. В твердом растворе число перескоков в единицу времени атомов компонента $q_{iD} =$

$$= \theta_i \frac{k}{h} q_i e^{-\frac{u_i}{kT}}.$$

В двухкомпонентном АВ растворе $N_D = q_A \theta_A \frac{k}{h} e^{-\frac{U_A}{kT}} + q_B \theta_B \frac{k}{h} e^{-\frac{U_B}{kT}}$.

Тогда

$$a_A = \frac{1}{1 + \frac{\theta_B q_B}{\theta_A q_A} e^{-\frac{U_B - U_A}{kT}}}; \quad a_B = \frac{1}{1 + \frac{\theta_A q_A}{\theta_B q_B} e^{-\frac{U_A - U_B}{kT}}};$$

$$S_{см,в} = R \left\{ \frac{1}{1 + \frac{\theta_B q_B}{\theta_A q_A} e^{-\frac{U_B - U_A}{kT}}} \ln \left(1 + \frac{\theta_B q_B}{\theta_A q_A} e^{-\frac{U_B - U_A}{kT}} \right) + \frac{1}{1 + \frac{\theta_A q_A}{\theta_B q_B} e^{-\frac{U_A - U_B}{kT}}} \times \right.$$

$$\left. \times \ln \left(1 + \frac{\theta_A q_A}{\theta_B q_B} e^{-\frac{U_A - U_B}{kT}} \right) \right\},$$

при $T \rightarrow 0$ $S_{см,в} \rightarrow 0$.

При определении энтропии смешения, исходя из теоремы Больцмана – Планка, следует, по-видимому, подсчитывать число действительно реализующихся комплексий состояния в единицу времени, учитывая реально вероятности и частоты перемещения атомов и молекул. Существенным является также определение числа перемещений атомов и, следовательно, комплексий состояния, зависящих и не зависящих от температуры. Нулевые колебания обуславливают независимую от температуры часть колебательной энтропии. При оценке числа возможных перескоков атомов в решетке кристалла в единицу времени следует учитывать энергию нулевых колебаний.

Учет энергии нулевых колебаний существен как при оценке равновесной энтропии системы, так и при рассмотрении кинетики процессов – диффузии и самодиффузии, фазовых превращений и др., поскольку при $T \rightarrow 0$ имеет место процесс диффузии, обусловленный нулевыми колебаниями.

Теплопроводность твердых тел вблизи абсолютного нуля. Процесс переноса тепла в рамках термодинамики необратимых процессов описывается уравнением, связывающим поток с градиентом свободной энергии Гиббса $\Delta Q = -k \frac{\partial G}{\partial T}$, с градиентом температуры при постоянном давлении, составе, теплоемкости: $\Delta Q = -\lambda \text{grad} T$. Согласно теории Дебая, коэффициент теплопроводности λ решетки пропорционален произведению теплоемкости c_V , скорости распространения фононов $V = 1/\tau$, средней длине их свободного пролета l : $\lambda = \frac{1}{3} c_V V l$.

Обратные величины длины и соответственно времени τ свободного пролета пропорциональны сумме среднеквадратичных смещений атомов из положений равновесия в решетке кристалла, обусловленных тепловым движением U^2_T , статическими дефектами $U^2_{ст}$, нулевыми колебаниями U^2_{00} и др.: $1/\tau \approx k(U^2_{00} + U^2_T + U^2_{ст})$.

В идеальном кристалле при абсолютном нуле температуры $1/\tau_0$ (τ_0 – время релаксации) является конечной величиной, обусловленной среднеквадратичными смещениями атомов вследствие нулевых колебаний: $1/\tau_0 = k U^2_{00}$. Однако, так как при $T \rightarrow 0$ $c_V \rightarrow 0$, фононная теплопроводность кристаллов в соответствии с третьим законом термодинамики снижается до нуля, $\lambda_{T \rightarrow 0} \rightarrow 0$.

При повышении температуры от абсолютного нуля коэффициент теплопроводности возрастает, проходя через сравнительно острый максимум

$$\left(\frac{\partial \lambda}{\partial T} \right)_m = 0, \quad \left(\frac{\partial l}{\partial T} \right)_m - \left(\frac{\partial \ln c_V}{\partial T} \right)_m,$$

затем снижается по закону, близкому к гиперболическому.

Упругости паров веществ и третий закон термодинамики. Экспериментальные методы определения упругости паров конденсированных фаз основаны на использовании второго и третьего законов термодинамики.

При $T \rightarrow 0$ $p \rightarrow p_{00}$ и температурно-зависимая часть упругости паров снижается до нуля, $p_{T, T \rightarrow 0} \rightarrow 0$, при этом $(\frac{\partial p}{\partial T})_{T \rightarrow 0} \rightarrow 0$.

При абсолютном нуле температуры сохраняется известная температурно-независимая равновесная упругость паров p_{00} , обусловленная существованием нулевой энергии колебания ионов конденсированной фазы. При приближении к абсолютному нулю температуры

$$p_{T \rightarrow 0} - p_{00} = A e^{-\frac{U_0}{E_{00}}}$$

Величины U_0 , E_{00} определенным образом связаны между собой.

В равновесной замкнутой системе при $T \rightarrow 0$ упругость паров $p \rightarrow 0$ конденсированной фазы есть конечная величина, во многом определяющая ее свойства.

Структура растворов и пределы растворимости вблизи абсолютного нуля. Все реальные твердые растворы в условиях равновесия при приближении температуры к абсолютному нулю разделяются на химические соединения и компоненты, обладающие наибольшей степенью упорядоченности и наименьшей возможной растворимостью примесей.

В зависимости от величины и знака энергии межатомного взаимодействия ϵ_{AA} , ϵ_{AB} при $T \rightarrow 0$ твердые растворы распадаются преимущественно на соединения и компоненты или на компоненты. Например, двухкомпонентные растворы при энергии взаимодействия $|\epsilon_{AB}| > |\epsilon_{AA}|$ распадаются на соединения $A_m B_n$ и, возможно, на компоненты; при $|\epsilon_{AB}| < |\epsilon_{AA}|$ — только на компоненты. При приближении к абсолютному нулю растворимость одного компонента в другом в равновесных условиях снижается до минимального значения, обусловленного степенью разупорядоченности компонента или соединения под воздействием энергии нулевых колебаний.

Как следствия третьего закона термодинамики могут быть рассмотрены принципы недостижимости абсолютной очистки вещества от растворимых примесей и недостижимости идеального (бездефектного) строения кристалла.

Энтропия неупорядоченных систем при $T \rightarrow 0$. При абсолютном нуле неравновесные состояния будут иметь различные, не равные нулю значения нулевой энтропии ($S_0 > 0$). Нулевая энтропия тел, в том числе в состояниях, существенно отклоняющихся от равновесного, в значительной мере определяется взаимосвязанными величинами энергий и амплитуд неупорядоченных нулевых колебаний, энергетического порога атомных перемещений.

Если при изменении температуры вблизи абсолютного нуля степень упорядочения, структурные, электронные и магнитные соотношения остаются практически неизменными, не зависящими от температуры ($S_0 \approx \text{const}$), и температурные изменения теплоемкости и энтропии обусловлены лишь тепловым возбуждением колебательных процессов, то в этих случаях справедлив третий закон термодинамики: при $T \rightarrow 0$ $c_p \rightarrow 0$, $S_T \rightarrow 0$.

Характер температурной зависимости теплоемкости и энтропии неупорядоченных систем вблизи абсолютного нуля определяется их вибрационными плотностями состояния, фононными спектрами.

Отклонения от третьего закона термодинамики. Согласно изложенным в настоящей статье представлениям, третий закон термодинамики, обобщая имеющиеся экспериментальные и теоретические данные, утверждает, что при приближении к абсолютному нулю температуры теплоемкость, температурно-зависящие части энтропии и характеристических термодинамических функций и их производные стремятся к нулю. Указанные факторы поясняют справедливость третьего закона термодинамики по отношению ко многим термодинамически неравновесным состояниям, метастабильным фазам, к стеклам, твердым и жидким растворам, квантовым жидкостям.

Существуют, однако, условия, ограничивающие применение третьего закона термодинамики. Например, воздействия энергии нулевых колебаний. Примером подобного рода может служить возбуждение системы слабо взаимодействующих частиц до состояния, близкого к идеальному неконденсированному газу. Аналогичные состояния могут возникать в расположении магнитных моментов ионов, ядер, в ориентации молекул.

Например, теплоемкость квазиидеального газа элементарных возбуждений под действием нулевой энергии может достигнуть конечных, достаточно высоких значений. Обусловленные ею процессы изменения степени упорядочения диффузии сопровождаются при $T \rightarrow 0$ температурно-зависимыми колебаниями внутренней энергии и энтропии.

Отклонения от третьего закона термодинамики могут наблюдаться у тел, находящихся при «отрицательных» температурах в возбужденном состоянии, если величина порога релаксации сопоставима с энергией нулевых колебаний или меньше их.

В системах, в которых энергия взаимодействия между частицами заметно превышает нулевую энергию, третий закон термодинамики соблюдается.

Поскольку при температурах, близких к абсолютному нулю, имеют место весьма малые изменения измеряемых величин, то очевидно, что границы этих изменений лежат вблизи пределов, определяемых принципами неопределенности. Уже одно это обстоятельство свидетельствует о существовании ограничений, накладываемых на третий закон термодинамики.

Третий закон термодинамики и время. В термодинамике равновесных процессов (термостатике) в явном виде время не фигурирует. Однако в неявном виде оно присутствует во всех соотношениях и играет существенное значение.

Как уже отмечалось, второй закон термодинамики указывает направление течения термодинамических процессов и соответственно времени, определяя знак его изменения. В реальных условиях время течет только в одном направлении.

В термодинамике необратимых процессов в развитии второго закона время вводится в явном виде.

Особо существенное значение имеет время в разъяснении третьего закона термодинамики. Именно учет времени позволяет отчетливо выявить его физические основы.

В качестве примера рассмотрим в пределах теории Дебая энтропии двух веществ S_1, S_2 при температурах $T \ll \theta$, различающихся характеристическими температурами θ_1 и θ_2 , которые связаны с граничными частотами соотношениями

$$\theta_1 = \frac{h\nu_{m1}}{k}, \quad \theta_2 = \frac{h\nu_{m2}}{k}.$$

Теплоемкости этих веществ запишутся: $c_{v1} = a_1 T^3$, $c_{v2} = a_2 T^3$, где

$$a_1 = \frac{12}{5} \pi^4 \frac{R}{\theta_1^3}, \quad a_2 = \frac{12}{5} \pi^4 \frac{R}{\theta_2^3}.$$

Тогда

$$\frac{c_{v1}}{c_{v2}} = \frac{\theta_2^3}{\theta_1^3} = \frac{\nu_{m2}^3}{\nu_{m1}^3} = \frac{S_1}{S_2}.$$

Так как граничные частоты равны обратным величинам периодов колебаний атомов

$$\frac{\nu_{m1}}{\nu_{m2}} = \frac{\tau_{m2}}{\tau_{m1}}, \quad \text{то} \quad \frac{S_1}{S_2} = \frac{\tau_{m1}^3}{\tau_{m2}^3} = \frac{\tau_{m1x} \tau_{m1y} \tau_{m1z}}{\tau_{m2x} \tau_{m2y} \tau_{m2z}}.$$

Следовательно, отношение энтропий двух веществ при одной и той же температуре, если $T \ll \theta$, в рассматриваемом приближении пропорционально отношению кубов граничных периодов колебаний атомов. Каждый из периодов колебаний можно рассматривать как время между двумя статическими испытаниями, при которых реализуется данное состояние.

Третья степень времени испытания в вышеприведенной формуле соответствует трехмерному пространству, в котором вероятность состояния определяется произведением времени τ_i по каждому из направлений i осей координат.

При наличии нескольких j -энергетических уровней энтропия системы при низких температурах определяется суммой произведений вероятности реализации данного энергетического уровня на логарифм термодинамической вероятности W состояния, соответствующего данному уровню: $S = k \sum \ln W_j$. Термодинамическая вероятность состояний каждого уровня определяется плотностью реализации их во времени и временем испытаний.

Как следует из соотношений кинетической теории материи, изменения энтропии идеального газа в интервале температур от T_1 до T_2 при $V = \text{const}$ пропорционально логарифму обратного отношения соответствующих средних времен пробега молекул: $\Delta S_{T_1 T_2} = -2 \ln \frac{\tau_1}{\tau_2}$, находящихся в очевидной зависимости от импульсов молекул и интеграла «действия».

Приведенные примеры свидетельствуют о непосредственной связи термодинамики со временем и принципом наименьшего действия [10 – 13].

Проблема «термодинамика – время» приобретает особый интерес в связи с третьим законом термодинамики.

Список литературы

1. Сирота Н. Н. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1991. № 2. С. 6.
2. Клейн М. // Термодинамика необратимых процессов. М., 1962.
3. Семенов В. К. Избр. главы Теоретической физики. М., 1966. 2-е изд. С. 396.
4. Смирнова Н. А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М., 1982.
5. Лоуносмаа О. В. Принципы и методы получения температур ниже 1 К. М., 1977.
6. Вонсовский С. В. Магнетизм. М., 1971.
7. Белов К. П. Магнитосиловые явления в редкоземельных магнетиках. М., 1990.
8. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М., 1950.
9. Терлецкий Я. П. Статистическая физика. М., 1966.
10. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 1. Механика. М., 1988.
11. Планк М. Единство физической картины мира. М., 1966.
12. Богуславский С. А. Избр. труды по физике. М., 1961.
13. Шапаронов М. И. // ЖФХ. 1979. Вып. 12. Т. 53. С. 3043; Термодинамика необратимых процессов. М., 1987. С. 87.
14. Гибс Д. В. Основные принципы статистической механики, излагаемые со специальным применением к рациональному обоснованию термодинамики. М., 1946.

Поступила в редакцию 25.12.92.

УДК 621.377.8

В. В. ГРУЗИНСКИЙ, А. В. КУХТО, ХОН БЕН И (КНДР)

ГЕНЕРАЦИОННЫЕ И СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА НЕКОТОРЫХ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ НАФТАЛИМИДА

Absorption and luminescence spectra, quantum yields and fluorescence lifetimes and lasing characteristics of four new naphthalimide derivatives in solutions are investigated. It is found that lasing efficiency depends on wavelength of pumping radiation.

Исследование взаимосвязи между строением, спектрально-люминесцентными и генерационными свойствами сложных органических соединений позволяет осуществить целенаправленный синтез новых соедине-

ний с заранее предусмотренными свойствами и с более высокими параметрами генерации. На ряде производных нафталимида были созданы активные среды [1–4], отличающиеся низким порогом генерации, высокой фотостойкостью и эффективностью. Синтез новой группы нафталимидов стимулировал изучение их спектрально-люминесцентных и генерационных характеристик. Нами изучены этанольные растворы 4-амино-N-(п-бутилфенилено)-1,8-нафталимида (I); 4-метиламино-N-(о-толил)-1,8-нафталимида (II); 4-морфолино-N-(о-толил)-1,8-нафталимида (III); 4-(п-бензинламино)-N-(п-нитрофенилено)-1,8-нафталимида (IV).

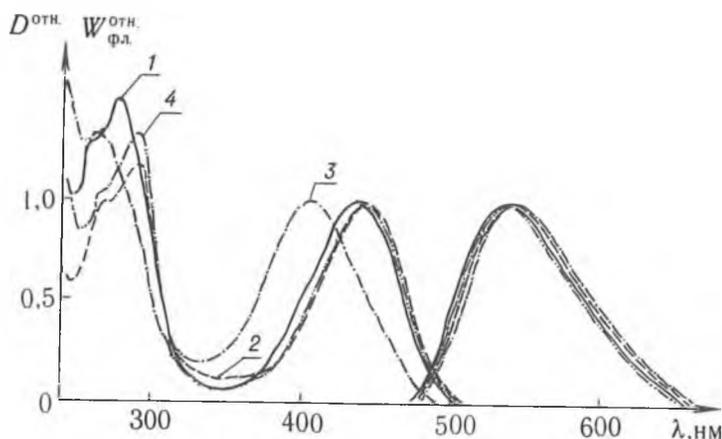


Рис. 1. Спектры поглощения и флуоресценции нафталимидов в этаноле: I(1), II(2), III(3), IV(4)

Спектрально-люминесцентные и генерационные характеристики нафталимидов в этаноле

Соединения	$\lambda_{\text{погл. макс}}$, нм	$\lambda_{\text{фл. макс}}$, нм	γ	$\lambda_{\text{ген. макс}}$, нм	$\Delta\lambda_{\text{ген}}$, нм	КПД, %
I	436	538	0,55	557	547—567	7,4
II	440	542	0,59	542	539—545	14,9
III	407	544	0,09	558	548—568	3,7
IV	442	530	0,63	559	554—564	26,3

Спектры флуоресценции измерены на спектрофлуориметре СДЛ-2, спектры поглощения – на спектрофотометре КСВУ-12. Квантовый выход флуоресценции γ измерен относительным методом путем сравнения с $\gamma = 0,62$ 3-аминофталимида, характеризующегося постоянным значением в различных работах и измеренным прямым методом [5]. Генерация осуществлялась в кварцевой плоскопараллельной кювете толщиной 2 мм. Резонатор был неоптимизированным и состоял из двух широкополосных диэлектрических зеркал. Использовались поперечная и продольная схемы накачки. Для увеличения плотности мощности накачки применялась кварцевая цилиндрическая линза.

Источником накачки служил лазер на АИГ: Nd^{3+} с приставкой на сапфире с титаном, вторая гармоника которого обеспечивала плавное перестраиваемое излучение в диапазоне 360... 490 нм с частотой повторения импульсов до 50 Гц, при максимальной мощности в импульсе ~100 кВт и длительности импульса до 15 нс.

Энергия генерации измерялась с помощью измерителя ИМО-2Н, спектр генерации – спектрографа ИСП-51 на фотопленку РФ-3 с последующим микрофотометрированием, длительность импульса – коаксиального фотоэлемента ФЭК-11СПУ и осциллографа С9-4А.

Спектрально-люминесцентные и генерационные характеристики изученных соединений приведены в таблице, а спектры поглощения и флуоресценции – на рис. 1. Видно, что исследованные соединения обладают широкой бесструктурной длинноволновой полосой поглощения. Можно полагать по аналогии с ранее исследованными производными нафталимида [6], что эта полоса связана с внутримолекулярным переносом заряда, обусловленным электронным взаимодействием заместителей в положении 4 нафталинового цикла с карбонильной группой. В более коротковолновой области спектра на λ -255 и 280 нм, как и у нафталина [7], имеется структурная полоса примерно такой же интенсивности, что благоприятно при накачке широкополосным излучением лампы и ультрафиолетовым излучением эксимерных лазеров. Естественно по аналогии с фталимидами предположить связь формирования этой полосы с нафталиновым ядром.

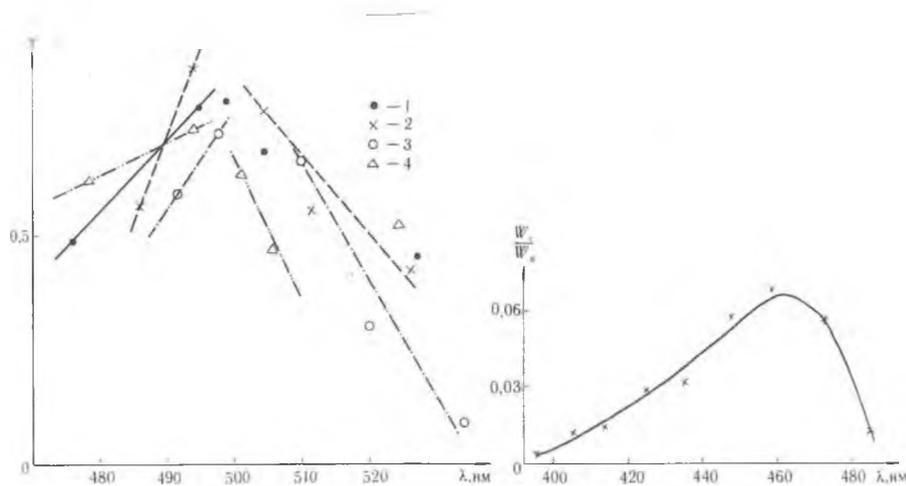


Рис. 2. Зависимость квантового выхода γ от положения максимума спектра флуоресценции исследуемых нафталимидов в различных растворителях: I(1), II(2), III(3), IV(4)

Рис. 3. Зависимость КПД генерации соединения I в этаноле от длины волны накачки.

Спектры флуоресценции этих соединений также бесструктурны и широки. Несмотря на используемый набор различных заместителей, спектры поглощения и флуоресценции расположены примерно в одном и том же спектральном диапазоне. Обращает на себя внимание большой стоксов сдвиг между спектрами поглощения и флуоресценции, достигающий у соединения III 137 нм. В связи с этим следует ожидать малой величины потерь на перепоглощение генерации в канале $S_0 \rightarrow S_1$, а также слабой зависимости положения полосы генерации от концентрации раствора.

Квантовый выход изученных нафталимидов достаточно высок, $\gamma = 0,55 \div 0,63$, кроме соединения III, когда $\gamma = 0,09$, что обусловлено, по-видимому, действием морфолинозаместителя.

Кроме этанольного, использовались также растворы исследуемых соединений в диэтиловом эфире, толуоле, циклогексаноне и 1,2-дихлорэтане. Оказалось, что для всех соединений выполняется обнаруженная для других производных нафталимида [4, 8]. характерная зависимость

квантового выхода флуоресценции от положения максимума спектра флуоресценции, изменяющихся в различных растворителях (рис. 2). Для нафталимида III γ изменяется от 0,09 в этаноле до 0,72 в диэтиловом эфире. Диапазон изменения квантового выхода остальных соединений несколько меньший.

Для исследованных нафталимидов наблюдается значительное влияние растворителя на положение спектров поглощения и флуоресценции, причем большее влияние оказывается на спектры флуоресценции, чем поглощения. Наиболее длинноволновое положение спектров имеет место в этаноле, меньший сдвиг вызывает циклогексанон, дихлорэтан, диэтиловый эфир и толуол (расположены по мере уменьшения сдвига). Наименьший сдвиг как спектров поглощения, так и спектров флуоресценции имеет место у соединения III.

Следует отметить значительное уширение спектров поглощения и флуоресценции всех соединений в этаноле и в меньшей степени в циклогексаноне, что связано, по-видимому, с наличием специфических взаимодействий.

При накачке указанным выше методом на длине волны $\lambda = 415$ нм, т. е. практически в максимуме длинноволновой полосы поглощения, получена генерация излучения растворов всех соединений в этаноле. Оптическая плотность на λ_n составила 1+1,3 на 1 мм длины. Видно (см. таблицу), что максимумы полос генерации близки и расположены в области 542–562 нм, т. е. на длинноволновом крыле спектров флуоресценции. КПД генерации достаточно высок, даже у соединения III с малым квантовым выходом. Не наблюдается корреляции между величиной квантового выхода флуоресценции исследуемых нафталимидов и КПД генерации, хотя для соединения III, имеющего наименьший квантовый выход, КПД генерации минимальный, а у соединения IV КПД генерации и квантовый выход наибольшие. Наиболее вероятно, что генерационная способность соединений I и II определяется, главным образом, не величиной квантового выхода, а наведенным перепоглощением излучения генерации в синглетном или триплетном канале. Это подтверждается также различным значением разности между длинами волн максимумов спектров флуоресценции и генерации, изменяющимися от 2 нм у соединения II до 29 нм у соединения IV.

Перестройка лазера накачки по длинам волн в пределах рабочего диапазона показала, что КПД генерации нафталимидов существенно зависит от длины волны накачки λ_n (рис. 3). Максимум этой зависимости находится на длинноволновом крыле спектра поглощения. Возможно, что различие $\lambda_{ген}^{max}$ и λ_n^{max} обусловлено наведенным перепоглощением излучения накачки в системе высоковозбужденных синглетных уровней.

В работе [9] было показано, что в условиях достаточно интенсивной накачки КПД генерации η определяется формулой

$$\eta = \frac{\nu_r}{\nu_n} \left[1 - \frac{k_{пот} \left(1 + \frac{k_{32}}{k_{23}} \right)}{N_0 \sigma_{13}(\nu_n)} \right], \quad (1)$$

где ν_r и ν_n – частоты генерации и накачки, $k_{пот}$ – коэффициент потерь, k_{32} и k_{23} – константа синглет-триплетной и триплет-синглетной конверсии, N_0 – концентрация невозбужденных молекул, $\sigma_{13}(\nu_n)$ – сечение поглощения из основного состояния. Подобная формула для вычисления КПД

генерации сложных молекул (более универсальная и громоздкая) была выведена и в работе [10].

Из формулы (1) следует, что зависимость от частоты накачки имеется в двух ее частях. Длинный хвост уменьшения КПД генерации с увеличением частоты накачки обусловлен в какой-то степени первым сомножителем, связанным с наличием стоксовых потерь. Контур спектра поглощения в знаменателе второго сомножителя обеспечивает быстрый рост КПД генерации на длинноволновом крыле. В результате наблюдаемая экспериментально зависимость КПД генерации от длины волны накачки обусловлена как универсальными (стоксовые потери, спектр поглощения накачки), так и специфическими (синглет-синглетное и (или) триплет-триплетное перепоглощение излучения накачки) причинами.

Таким образом, полученные новые лазерные активные среды на основе производных нафталимида оказались достаточно эффективными для данной области спектра. Авторы приносят благодарность Леониду Яковлевичу Малкесу за предоставление и очистку веществ.

Список литературы

1. Грузинский В. В., Давыдов С. В. // ЖПС. 1979. Т. 30. № 1. С. 156.
2. Крымова А. И., Петухов В. А., Попов М. Б. // Квантовая электроника. 1985. Т. 12. № 10. С. 2163.
3. Грузинский В. В., Ким У Хен, Кухто А. В. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1989. № 3. С. 67.
4. О н и ж е // Лазерная и оптико-электронная техника. Мн., 1990. С. 65.
5. Алленцев М. И. // ЖЭТФ. 1951. Т. 21. № 2. С. 133.
6. Красовицкий Б. М., Болотин Б. М. Органические люминофоры. М., 1984.
7. Карер. Полициклические углеводороды. М., 1971. Т. 1.
8. Викторова Е. Н., Переяслова Д. Г., Юшко Э. Г. // Журн. физ. хим. 1966. Т. 40. № 8. С. 1783.
9. Пржонская О. В., Тихонов Е. А., Шпак М. Т. Оптимизация активных сред на основе полиметиновых красителей для лазеров ближней ИК-области спектра. Киев, 1978. Препринт № 10 ИФ АН УССР.
10. Степанов Б. И. Методы расчета оптических квантовых генераторов на органических красителях при монохроматическом возбуждении. 4.1. Мн., 1968. Препринт ИФ АН БССР.

Поступила в редакцию 01.12.92.

УДК 535.37

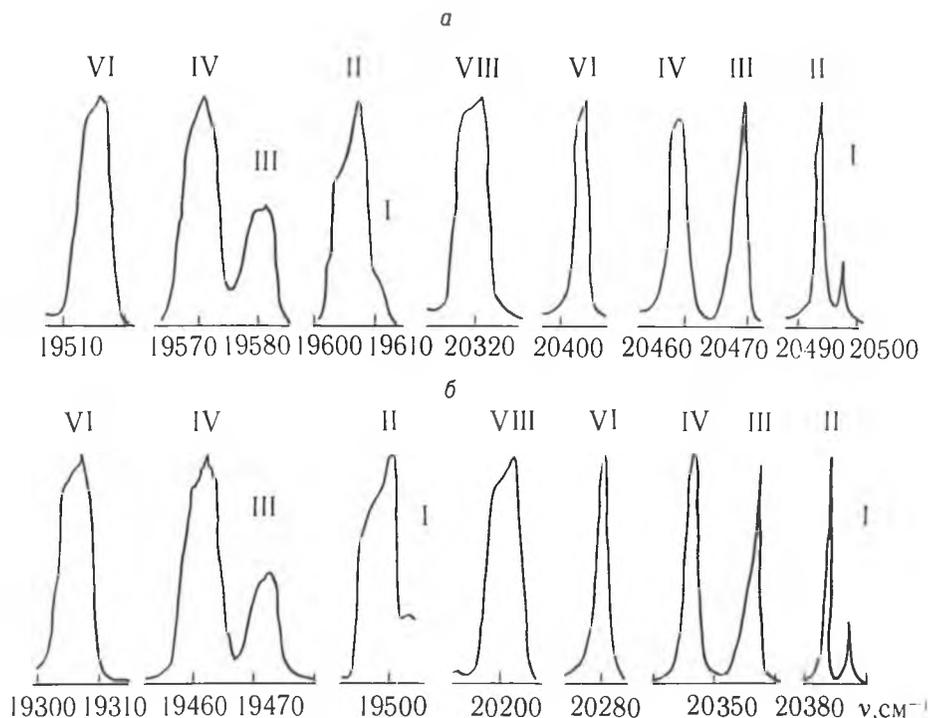
*В. Н. БОЙКОВ, Ю. В. ЖУРАВЛЕВА, В. Т. КОЯВА,
А. Н. КРАСОВСКИЙ, Г. В. ШАЛАХОВСКАЯ, Д. С. УМРЕЙКО*

КОРРЕЛЯЦИИ В ПОЛОЖЕНИИ И ФОРМЕ ЛИНИЙ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СПЕКТРОВ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ УРАНИЛОВЫХ КРИСТАЛЛОВ С ОСТРОВНОЙ СТРУКТУРОЙ

The contours and bandwidths of luminescence and Raman spectra of uranyl crystals with an island structure at $T = 15$ K in the region of optical transitions on valency vibration levels of UO_2^{2+} — ions and vibration levels of ligands have been studied. It is concluded, that widening of luminescence bands in the null region and their shift relative to Raman frequencies are.

determined by a considerable contribution of interior vibration resonance with the participation of low-frequency phonon conditions.

Малая величина неоднородного уширения – благоприятное условие для исследования закономерностей формирования линий спектров люминесценции кристаллов ураниловых соединений. В [1–3] проведен анализ контуров и ширины флуоресцентных линий низкотемпературных спектров кристаллов тринитратоуранилатов в областях оптических пере-



Участки спектров люминесценции кристаллов $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$ (а) и $\text{CsUO}_2(\text{NO}_3)_3$ (б) при 15 К в области переходов на подуровни $\nu_{\text{кол.}}(\text{NO}_3^-)$ и $\nu_1(\text{UO}_2^{2+}) + \nu_{\text{кол.}}(\text{NO}_3^-)$

ходов на валентные полностью симметричные $\nu^s(n)$ и антисимметричные $\nu^a(n)$ колебательные уровни ионов уранила. Показано, в частности, что максимальная ширина линии ν^s с отчетливой асимметрией в первой полосе (группе) спектра ($n=1$) обусловлена межмолекулярным резонансным взаимодействием полностью симметричных валентных колебаний $\nu_1(\text{UO}_2^{2+})$, причем в формировании контура существенна роль низкочастотных фононных состояний.

Указанное взаимодействие, вероятно, в гораздо меньшей мере сказывается на линии $\nu_1(\text{UO}_2^{2+})$ комбинационного рассеяния света (КР), полуширина которой более чем на порядок меньше соответствующей флуоресцентной [2]. Представляют интерес дальнейшие экспериментальные исследования в данном направлении с привлечением других оптически активных колебаний в кристалле (проявляющихся в люминесценции и КР).

В данной работе люминесценция свежеприготовленных кристаллов ураниловых соединений при 15 К возбуждалась линией 21837 см^{-1} , КР – линией 19435 см^{-1} аргонового лазера. Спектры регистрировались на установке, описанной в работах [1, 4]. Частоты максимумов линий определены с погрешностью $\leq 0,3 \text{ см}^{-1}$, полуширины – от 10 % (люминесценция) до 50 % (наиболее узкие линии КР).

Частоты внутримолекулярных колебаний ($\nu_{\text{кол.}} = 700\text{—}960 \text{ см}^{-1}$) и полуширины (Δ) линий, найденные из спектров люминесценции (для $n = 0, 1, 2, 3$) и КР тринитратных соединений уранила (верхняя строка цифр—РН, нижняя—ЦН)

№ п/п	Люминесценция				КР	Отнесение
	$\nu_{\text{кол.}}(\Delta), \text{ см}^{-1}$				$\nu_{\text{кол.}}(\Delta)\text{см}^{-1}$	
I	709,4(0,9); 708,3(0,7);	—	709,6(3,5); 707,8(3,0);	709,6(1,1) 707,8(1,1)		
II	713,6(1,1); 712,7(0,8);	713,6(6,0); 712,7(5,6);	713,6(3,9); 712,2(2,7);	713,6(1,5) 712,8(1,0)	713,6(0,2) 712,7(0,3)	
III	738,2(1,6); 739,0(1,2);	740,0(6,1); 739,5(5,9);	739,2(4,0); 738,9(3,3);	738,6(2,2) 738,8(1,3)	738,5(0,2) 739,2(0,4)	$\nu_{\text{кол.}} (\text{ONO}_2^-)$
IV	748,4(3,1); 749,2(2,6);	749,6(6,2); 749,3(6,0);	748,6(4,9); 748,8(3,7);	748,6(3,7) 748,7(2,4)	~746,2 ~747,0	
V	749,5*(6,2); 750,3*(6,2);	749,0*(3,7); 749,8*(3,0);	748,6*(3,7) 748,9*(2,7)		746,5(0,3) 747,7(0,5)	
VI	803,0(1,9); 804,9(1,9);	804,8(5,9); 805,0(5,7);	804,0(4,1); 804,4(3,6);	804,0(3,0) 804,2(1,8)		
VII		856,0(0,6); 853,0(0,4);	853,5(0,4); 849,9(0,4);	849,9(0,4) 846,5(0,4)	856,0 853,5	
VIII		886,6(6,1); 882,8(5,8);	885,0(3,7); 881,5(3,0);	882,2(1,4) 878,4(1,0)	884,0(0,1) 881,2(0,1)	$\nu_1 (\text{UO}_2^{2+})$
IX	960,7(5,1); 956,4(6,8);	956,6(2,1); 953,1(1,7);	951,8(2,0) 948,0(1,2)			$\nu_3 (\text{UO}_2^{2+})$

*—Частота комбинирует с ν^a .

Согласно [3, 5], положения линий, отвечающих вибронным переходам с участием ν_1 и ν_3 (UO_2^{2+}) исследуемых кристаллов, приближенно описываются выражениями:

$$\nu^s(n) = \nu_0 - n\nu_1^{01} + \frac{n-1}{2}n\delta;$$

$$\nu^a(n) = \nu^s(n) - \nu_3^{01} + fn\delta.$$

Здесь ν_0 — частота чисто электронного перехода, ν_1^{01} и ν_3^{01} отвечают значениям частот переходов с нулевого на первый колебательный подуровень UO_2^{2+} в основном электронном состоянии, n — колебательное квантовое число валентного полностью симметричного колебания иона UO_2^{2+} , $\delta = 2,7 \text{ см}^{-1}$ — поправка на аангармоничность. Комбинирующие с $\nu^s(n)$ и $\nu^a(n)$ прочие кристаллические колебательные частоты $\nu_{\text{кол.}}^i$ не обнаруживают зависимости от номера n спектральной полосы.

Полученные в настоящей работе значения ν_1 и ν_3 (UO_2^{2+}), $\nu_{\text{кол.}} (\text{NO}_3^-)$, а также полуширины линий гомологических излучательных переходов вплоть до третьей полосы для изоструктурных соединений $\text{CsUO}_2(\text{NO}_3)_3$ (ЦН) и $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$ (РН) представлены в таблице 1; здесь же приведены частоты и полуширины соответствующих линий спектра КР. Некоторые из изученных контуров флуоресцентных линий иллюстрируются рисунком. Выделенные области спектров выгодно отличаются от других отсутствием наложения различных излучательных переходов друг на друга. Исключение составляют лишь переходы $\nu^a(n)$, для которых

возможно проявление резонанса, обязанного комбинации $\nu^s(n+1)$ с решеточными колебаниями [3]. Видно, что различные флуоресцентные линии отличаются как по ширине, так и по форме контура. Лишь наиболее узкие из них под номерами $i = I, II, VII$, описывающие переходы на подуровни $\nu_{\text{кол.}}(\text{NO}_3^-)$ и $\nu_1(\text{U}^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{2+})$, имеют симметричный контур, сравнительно широкая линия IV характеризуется в среднем более пологим спадом интенсивности в коротковолновую, остальные – в длинноволновую сторону от максимума.

В качестве величины неоднородного уширения в кристаллах можно принять полуширину линии ν_0 ионов $\text{U}^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{2+}$ ($0,4 \text{ см}^{-1}$), практически не искаженной реабсорбцией и не сужающейся при понижении температуры вплоть до $4,2 \text{ К}$. Значительное уширение большинства флуоресцентных линий в нулевой полосе, даже за вычетом указанной величины неоднородного уширения, по отношению к линиям КР приводит к заключению о решающем вкладе межионного резонанса колебаний по аналогии с вышеупомянутым механизмом формирования линии $\nu^s(1)$.

С более благоприятствующими условиями для резонанса при меньшем значении постоянной кристаллической решетки [7, 8], по-видимому, связан тот факт, что при несомненном коррелировании формы контуров для одинаковых типов колебаний близкой частоты флуоресцентные линии РН в $1,1 - 1,7$ раза шире, чем ЦН. С другой стороны, они еще более ощутимо уширены по сравнению с тетранитратоуранилатами (табл. 2), в кристаллической решетке которых расстояния между ионами уранила еще больше; к тому же у них имеется 2 типа неэквивалентных NO_3^- групп (с би- и монодентатной координацией к U). Поскольку симметрия окружения UO_2^{2+} в кристаллах тетранитратоуранилатов цезия и рубидия ниже, чем в ЦН и РН [9], спектры их люминесценции представлены оптическими переходами с двух возбужденных электронных уровней (см. [10]). Для описания указанных переходов с каждого из упомянутых уровней пригодны формулы (1), (2) и разности $\nu^s(n) - \nu_{\text{кол.}}^i, \nu^s(n) - \nu_{\text{кол.}}^j$, отличающиеся лишь значением ν_0 . Соответствующий энергетический зазор составляет $1,8 \text{ см}^{-1}$ для $\text{Cs}_2\text{UO}_2(\text{NO}_3)_4$ (ЦТН) и $0,6 \text{ см}^{-1}$ для $\text{Rb}_2\text{UO}_2(\text{NO}_3)_4$. Он строго выдерживается по спектру ввиду одинаковой формы линий компонент расщепления и сравнимой их интенсивности. Это особенно хорошо видно на примере первого соединения, для которого подавляющее число дублетов четко разрешено, что позволило определять значения $\nu_{\text{кол.}}^i$ с наибольшей точностью.

Следует отметить также, что если полученные из нулевой полосы колебательные частоты как разности частот максимумов для узких ($\leq 1,5 \text{ см}^{-1}$) флуоресцентных линий, включая и $\nu_1(\text{U}^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{2+})$, практически совпадают с частотами КР*, то для сравнительно широких линий $\nu^s(1)$ они существенно больше. Это подтверждается на примере еще одного изученного нами соединения островной структуры – $\text{Cs}_2\text{UO}_2\text{Cl}_4$, для которого из люминесценции найдено $\nu_1^{\text{OI}} = 836,2 \text{ см}^{-1}$, $\Delta\nu^s(1) = 5,7 \text{ см}^{-1}$, величина дублетного расщепления линий – $1,6 \text{ см}^{-1}$, в то время как из КР света $\nu_1(\text{UO}_2^{2+}) = 833,0 \text{ см}^{-1}$, $\Delta\nu_1 \sim 0,1 \text{ см}^{-1}$.

Поскольку частота КР должна определять положение бесфононной линии [6], последний факт, по-видимому, отражает участие в рассматриваемом резонансном взаимодействии низкочастотных фононных состояний.

Межионный резонанс колебаний $\nu_1(\text{UO}_2^{2+})$ сказывается и на контурах линий $\nu^s(1) - \nu_{\text{кол.}}^i$, приводя к выравниванию их полуширин с $\Delta\nu^s(1)$ и подобию форм. Хорошо коррелируют также ширины и контура $\nu^s(n)$ и $\nu^s(n) - \nu_{\text{кол.}}^i$ при $n = 2$ и 3 , $i = I$ и II (РН, ЦН); I, III и V (ЦТН). Частотные интервалы между максимумами линий $\nu_{\text{кол.}}^i$ для этих гомологических переходов в разных полосах спектра с точностью эксперимента совпадают.

* В таблицу не вошли серии относительно интенсивных перекрывающихся линий с $\nu_{\text{кол.}} - 806 \text{ см}^{-1}$.

Частоты внутримолекулярных колебаний ($\nu_{\text{кол.}} = 680 - 940 \text{ см}^{-1}$) и полуширины (Δ) линий, найденные из спектров люминесценции (для $n = 0, 1, 2, 3$) и КР тетранитратоуранилата цезия

№ п/п	Люминесценция	КР	Отнесение	
	$\nu_{\text{кол.}}(\Delta), \text{см}^{-1}$	$\nu_{\text{кол.}}(\Delta), \text{см}^{-1}$		
I	682,9(0,6); 683,1(4,0*); 682,8(1,7); 683,8(0,8)	683,5(0,2)	$\nu_{\text{кол.}} (\text{ONO}_2^-)$	
II	683,9**(4,0*0); 683,5**(1,0); 683,3**(0,8);			
III	709,6(0,6); 710,0(4,0*); 709,3(-2,5); 709,2(0,8)	711,6(0,3)		
IV	711,6(-0,6); — Δ ; — Δ ; — Δ			
V	731,6(0,6); 732,3(4,5*); 732,5(1,6); 732,4(0,7)			
VI	734,4(0,5); — Δ ; — Δ ; 733,8(-1,0)	733,8(0,4)		
VII	733,9**(4,6*); 735,2**(1,2); 734,3**(1,0);			
VIII	750,6(1,2); 751,3(5,0*); 752,4(-2,6*); 751,7(1,2)	755,2(0,3)		
IX	755,6(1,1); 756,3(-3,0*); 755,3(1,2); 755,1(1,0)			
X	755,3**(4,4*); 755,7**(1,3); 755,5**(1,2)			
XI	824,1(1,8); 824,6(4,4*); 825,1(1,9*); 824,4(-1,6)	854,7(0,1)		$\nu_1 (\text{UO}_2^{2+})$ $\nu_3 (\text{UO}_2^{2+})$
XII	855,8(4,0*); 854,3(2,0*); 851,2(0,7)			
XIII	934,7(4,4*); 928,8(0,7); 924,5(0,6)			

*—Приводятся полуширины суммарного контура дублетов линий;

**—Частота комбинирует с ν^a ;

Δ —Данные не приведены в связи с перекрыванием соседних линий.

Несколько иная картина наблюдается для линий III, IV и VI (РН, ЦН); VIII и XI (ЦТН) с существенно большими полуширинами в нулевой полосе. Указанные линии $\nu^s(n) - \nu_{\text{кол.}}(n = 2, 3)$ представляют собой своеобразную свертку соответствующих контуров $\nu^s(n)$ и $\nu_0 - \nu_{\text{кол.}}$. Их полуширины больше, чем $\Delta\nu^s(n)$, но меньше суммы $\Delta\nu^s(n) + \Delta(\nu_0 - \nu_{\text{кол.}})$. Такая закономерность формирования контуров приводит к тому, что, в частности, для РН частотный интервал $\nu_{\text{кол.}}$ в первой полосе существенно больше, чем в других полосах спектра. Это не противоречит выводу о сохранении постоянными значений колебательных частот NO_3^- групп в разных полосах и объясняется слабовыраженным «узким» максимумом линии $\nu^s(1)$, смещенным в низкочастотную сторону от частоты, разделяющей ее контур на две части равной интенсивности (см. рисунок).

Как видно из табл. 1 и 2, в меньшей степени коррелируют параметры контуров линий $\nu^a(n)$ и $\nu^a(n) - \nu_{\text{кол.}}^1$, что можно связать также с вышеупомянутым влиянием резонанса, обязанного решеточным колебаниям.

Список литературы

1. Шалаховская Г. В., Бойков В. Н., Красовский А. Н., Умрейко Д. С. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1985. № 2. С. 23.
2. Они же // Оптика и спектроскопия. 1985. Т. 58. № 2. С. 456.
3. Бойков В. Н., Красовский А. Н., Шалаховская Г. В. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1989. № 1. С. 11.
4. Красовский А. Н., Бойков В. Н., Умрейко Д. С. // ЖПС. 1984. Т. 40. № 3. С. 441.
5. Бойков В. Н., Киреева Ю. В., Красовский А. Н., Умрейко Д. С. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1990. № 2. С. 26.
6. Иванов И. Е., Наумова Т. М., Копраненков В. Н. // Современные аспекты тонкоструктурной и селективной спектроскопии. М., 1984. С. 90.
7. Barclay G. A., Sabine T. M., Taylor J. C. // Acta Crystall. 1965. V. 19. P. 205.

8. Бойков В. Н. // ЖПС. 1985. Т. 43. № 5. С. 763.

9. Капшук И. И., Волков Ю. Ф., Москвичев Е. П., Лебедев И. А., Яковлев Г. Н. // Журн. структ. хим. 1971. Т. 12. № 1. С. 94.

10. Бойков В. Н., Красовский А. Н., Умрейко Д. С. // ЖПС. 1988. Т. 49. № 3. С. 491.

Поступила в редакцию 08.12.92.

УДК 535.33

М. Р. ПОСЛЕДОВИЧ, Х. ЭЛЬ-НАССЕР Х. (ИОРДАНИЯ)

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БЕЗВОДНЫХ ДИСУЛЬФАТОУРАНИЛАТОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

IR-absorption and low-temperature (77 °K) luminescence spectra of crystalline powders of alkali-metals disulphate uranylates have been studied. It has been demonstrated that a complex structure of vibrational and vibronic spectral bands is due to the presence of uranyl-sulphate complexes, that are compositionally different in elementary cells of the compounds studied.

Значительная информативность спектрально-люминесцентных исследований кристаллических ураниловых соединений достигнута благодаря тонкой структуре полос их электронно-колебательных спектров при низких температурах [1].

В работе [2] с помощью кинетических измерений было установлено, что низкотемпературные спектры люминесценции ураниловых соединений обусловлены переходами из нескольких возбужденных состояний, разделенных небольшими ($\approx 10 \text{ см}^{-1}$) энергетическими интервалами. Предположение о том, что эти состояния принадлежат разным центрам (различным ионам уранила), означает, что кристаллы ураниловых соединений содержат несколько типов (центров) свечения, а их сложные спектры представляют собой суперпозицию спектров отдельных центров.

В данной работе приведены результаты исследования низкотемпературных спектров люминесценции и инфракрасного поглощения безводных дисульфатоуранилатов щелочных металлов, в которых исключается конкурирующее влияние других структурных групп (воды, органических молекул), которые могут входить в координационную сферу иона уранила наряду с сульфатными группами. Спектры данных соединений интерпретировались до настоящего времени на основе одноцентровой модели, вследствие чего ряд усложнений спектральных линий не нашел достаточно аргументированного объяснения.

Запись спектров ИК поглощения в интервале $1300 - 400 \text{ см}^{-1}$ осуществлялась на двухлучевом спектрофотометре Specord 75-IR. Спектры люминесценции при температуре кипения жидкого азота (77 К) исследовались на установке, собранной на базе двойного дифракционного монохроматора ДФС-12. Спектральные ширины входной и выходной щелей устанавливались в пределах $(0,4 - 1,0 \text{ см}^{-1})$. В качестве возбуждающего света служило излучение ртутной лампы ДРШ-1000 на длине волны 365 Нм.

На рис. 1, а приведен спектр ИК поглощения $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$. Из рисунка видно, что этот спектр достаточно сложен в зарегистрированном спектральном интервале. Здесь, наряду с колебаниями сульфатных групп, проявляются валентные колебания ураниловой группы. Сравнение с данными низкотемпературных спектров люминесценции, где возможно однозначное определение частот валентных колебаний иона уранила, позволило отнести две частоты 842 и 855 см^{-1} инфракрасного спектра к полносимметричным колебаниям группы UO_2^{2+} . Для линейной и симметричной групп уранила это колебание запрещено в инфракрасном поглощении. Проявление его в ИК спектре говорит об искажении этой группы и в связи с этим о нарушении правил отбора. Наличие двух полос, принадлежащих данному колебанию, можно объяснить двумя причинами: дипольным взаимодействием различно ориентированных в элементарной ячейке искаженных групп UO_2^{2+} или наличием двух неэквивалентных по геометрическим параметрам таких ионов. По нашему мнению,

первая причина является менее вероятной. Доказательством тому могут служить следующие соображения. При симметричном колебании ν_1 иска-

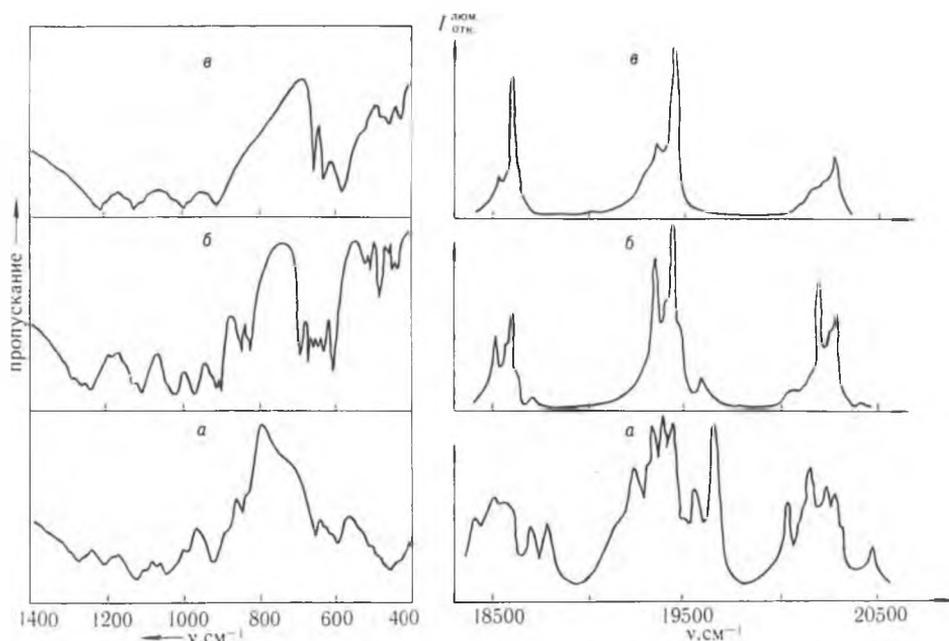


Рис. 1. Спектры инфракрасного поглощения:

а) $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$; б) $\text{K}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$; в) $\text{Rb}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$

Рис. 2. Низкотемпературные (77 К) спектры люминесценции:

а) $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$; б) $\text{K}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$; в) $\text{Rb}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$

женной группы UO_2^{2+} величина изменения дипольного момента будет незначительной. Кроме того, дипольное взаимодействие различно ориентированных ионов UO_2^{2+} не приведет к появлению перпендикулярной составляющей дипольного момента при колебании ν_1 . Суммарные дипольные моменты различно ориентированных ураниловых групп будут очень мало отличаться по направлению для синфазных и антифазных колебаний ν_1 различных групп UO_2^{2+} . Наличие дипольного взаимодействия в наибольшей степени должно проявиться для антисимметричного колебания $\nu_3\text{UO}_2^{2+}$, так как при этом результирующие дипольные моменты при синфазном и антифазном колебаниях будут взаимно перпендикулярны и следует ожидать наибольшей величины расщепления.

В ИК спектре $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$ антисимметричное колебание $\nu_3\text{UO}_2^{2+}$ также проявляется двумя компонентами 925 и 914 см^{-1} . Причем вторая компонента проявляется в виде перегиба на интенсивном максимуме 925 см^{-1} . Сравнение величин расщепления показывает, что для полностью симметричных колебаний эта величина больше (13 см^{-1}) по сравнению с разнесением компонент антисимметричного колебания (11 см^{-1}). Как уже указывалось, величина расщепления колебания $\nu_3\text{UO}_2^{2+}$ должна быть больше, чем для $\nu_1\text{UO}_2^{2+}$. Данный факт служит основанием для объяснения проявления валентных колебаний иона уранила двумя компонентами наличием неэквивалентных по геометрическому строению ураниловых групп в элементарной ячейке $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$.

В области валентных и деформационных колебаний сульфатных групп в спектре ИК поглощения имеется богатый набор линий. Количество проявляющихся линий, принадлежащих сульфатным группам, превышает число аналогичных линий в спектре ИК поглощения модельного соединения Na_2SO_4 , для которого наблюдается полное снятие вырождения с вырожденных колебаний [3]. Если предположить, что для

Частоты колебаний (см^{-1}) дисульфатуранилатов
щелочных металлов и их отнесение

$\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$		$\text{K}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$		$\text{Rb}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$		Отнесение
КР[з]	ИК	КР[з]	ИК	КР[з]	ИК	
420		418		400		$\nu_2(\text{E})\text{SO}_4^{2-}$
440	445	426	425	430	435	
464	465	434	435	458	465	
474	500	444	465	468		
		466	490			
		488	513			
		500	526			
602	605	613	590	590	585	$\nu_4(\text{F}_2)\text{SO}_4^{2-}$
634	624	633	610	610	630	
650	645	640	625	622	650	
670	655	647	635	642		
716	740	660	650	714		
		675	665			
		686				
840	842	853	838	832		$\nu_1\text{UO}_2^{2+}$
848		866	850	854		
856	855			866		
864						
	914		910	930	920	$\nu_3\text{UO}_2^{2+}$
	925		920	946		
			927			
980	982	968	960	978	1000	$\nu_1(\text{A}_1)\text{SO}_4^{2-}$
996	995	979	975	994	1020	
		1007	988	1010		
1018	1014	1034	1035	1034		$\nu_3(\text{F}_2)\text{SO}_4^{2-}$
1022	1045	1087	1105	1050		
1046	1085	1098	1140	1063		
1059	1118	1150	1170	1076		
	1120	1170	1240	1108	1135	
	1210			1120	1220	

сульфатных групп в $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$ также наблюдается полное снятие вырождения с вырожденных колебаний, то, исходя из числа компонент расщепления, наблюдаемых в ИК спектре (табл. 1), можно предположить наличие не менее двух неэквивалентных сульфатных групп в указанном соединении. Причем по числу наблюдаемых компонент для вырожденных колебаний SO_4^{2-} можно заключить, что симметрия сульфатных групп в решетке данного соединения не выше C_{2v} . Таким образом, на основе исследований спектров КР [3] и ИК $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$ и Na_2SO_4 можно заключить, что в решетке имеется не менее двух неэквивалентных по геометрическому строению ионов уранила и не менее двух различающихся групп SO_4^{2-} , которые входят в координационную сферу UO_2^{2+} .

Ураниловые соединения с тетраэдрическими ионами в координационной сфере атома урана относятся к соединениям с пентагональной координацией центрального атома-комплексобразователя и полимерной слоистой структурой [4]. К атому урана в таких соединениях координируют неэквивалентные по числу координационных связей тетраэдрические группы. Одни из них связаны двумя атомами кислорода с ионами уранила, другие – тремя и определяются соответственно как бидентатно-мостиковые и тридентатно-мостиковые тетраэдрические группы.

Проявление в ИК спектре $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$ различных сульфатных групп связано, по-видимому, с различием их координации и дает основание для предположения о наличии в решетке кристалла $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$ бидентатно- и тридентатно-координированных мостиковых ионов SO_4^{2-} , которые будем обозначать соответственно SO_4^{2-} II и SO_4^{2-} I. Тогда в спектре ИК поглощения частоту 995 см^{-1} можно отнести к $\nu_1(\text{A})\text{SO}_4^{2-}\text{II}$, а частоту 982 см^{-1} – к $\nu_1(\text{A})\text{SO}_4^{2-}\text{I}$. Меньшее значение частот валентных колебаний групп SO_4^{2-} связано с ослаблением внутренних связей за счет образования трех координационных связей с ионами уранилов. Для $\text{SO}_4^{2-}\text{II}$ координационных связей две, и внутренние связи менее ослаблены, что обуславливает более высокое численное значение частот их валентных колебаний. В области дважды вырожденных деформационных колебаний сульфатных групп в спектре ИК поглощения $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$ наблюдались линии с частотами 455 и 465 см^{-1} , которые мы отнесли к $\nu_2(\text{E})\text{SO}_4^{2-}\text{I}$ и $\nu_2(\text{E})\text{SO}_4^{2-}\text{II}$.

Подобные исследования были выполнены для $\text{K}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$. В отличие от спектра $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$ инфракрасный спектр калийуранилдисульфата, приведенный на рис. 1, б, обладает четко разрешенной структурой колебательных полос. Как видно из рис. 1, б и табл. 1, в ИК поглощении указанного вещества со средней интенсивностью двумя компонентами 835 и 850 см^{-1} проявляется полностью симметричное колебание и частотами 910 , 920 и 927 см^{-1} – антисимметричное колебание иона уранила. Отнесение указанных частот основано на хорошем совпадении их численных значений с данными спектрально-люминесцентных исследований. Эти особенности проявления валентных колебаний иона уранила позволяют на основе соображений, высказанных при обсуждении ИК спектра $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$, предположить наличие не менее двух неэквивалентных по строению нелинейных групп UO_2^{2+} в решетке $\text{K}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$.

Аналогичный вывод можно сделать на основе анализа ИК спектра рубидийуранилдисульфата, хотя последний обладает не такой ярко выраженной структурой полос (рис. 1, в). Однако перегибы на полосах и их уширение позволяют сделать заключение о перекрытии нескольких компонент.

Изучение спектральных полос в области проявления валентных и деформационных колебаний сульфатных групп (см. табл. 1) также подтверждает наличие в решетках $\text{K}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$ и $\text{Rb}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$ неэквивалентных сульфатных групп, координирующих своими атомами кислорода к центральному атому комплексобразователю.

Таким образом, изучение спектров ИК поглощения кристаллических порошков дисульфатуранилатов щелочных металлов Na, K, Rb пока-

зало, что в элементарных ячейках этих веществ имеются неэквивалентные по геометрическому строению уранилсульфатные комплексы. Центральным ион уранила имеет форму, отличную от линейной и симметричной, симметрия сульфатных групп значительно отличается от тетраэдрической.

Различия в спектрах ИК поглощения при переходе от одного соединения к другому в исследуемом ряду указывают также на влияние размеров вторичных катионов (Na^+ , K^+ , Rb^+) на строение кристаллической решетки и на характер взаимодействия между составляющими элементарной ячейки.

Установленные на основе изучения инфракрасных спектров особенности строения кристаллических решеток дисульфатуранилатов щелочных металлов находят независимое подтверждение в информативных низкотемпературных спектрах люминесценции, приведенных на рис. 2. Из анализа этих спектров можно заключить, что они подчиняются общим закономерностям формирования спектров люминесценции ураниловых соединений и состоят из нескольких гомологичных групп линий, повторяющихся с частотой полносимметричного валентного колебания иона уранила [1].

Следует отметить, что электронно-колебательные полосы, принадлежащие полносимметричному и антисимметричному колебаниям ионов уранила, во всех спектрах обладают сложной структурой и состоят из нескольких близкорасположенных линий различной интенсивности. Аналогичная структура возникает в области проявления электронного перехода. Сопоставление ее со структурой в области проявления полносимметричного валентного колебания $\nu_1\text{UO}_2^{2+}$ позволяет сделать вывод об их сходстве. Это дает возможность предположить, что структура полосы в области электронного перехода обусловлена несколькими близкорасположенными электронными переходами, принадлежащими различным центрам. Так, в приведенном на рис. 2, а наиболее структурированном спектре люминесценции $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$ интенсивную коротковолновую полосу можно отнести на основе анализа разностей частот к чисто электронному переходу. Из спектра видно, что эта полоса состоит как минимум из трех, сильно перекрывающихся линий, две из которых проявляются в виде перегибов на третьем интенсивном максимуме.

Учитывая сложную структуру линий чисто электронного перехода и полос, принадлежащих валентным колебаниям иона уранила, можно сделать предположение о существовании нескольких центров свечения в $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$. В первом центре в комбинации с частотой чисто электронного перехода 20487 см^{-1} одной из самых интенсивных линий спектра проявляется полносимметричное валентное колебание иона уранила. Частота этого колебания 850 см^{-1} для первой гомологичной группы, 855 см^{-1} для второй и 825 см^{-1} для третьей. Частоты $\nu_1\text{UO}_2^{2+}$ в первой гомологичной полосе хорошо совпадают с частотой полносимметричного валентного колебания $\nu_1\text{UO}_2^{2+}\text{II}$ в спектре ИК поглощения. Для второго центра частоты полносимметричного валентного колебания комбинируют с частотой чисто электронного перехода 20480 см^{-1} и составляют 850 , 854 , 830 см^{-1} для трех гомологичных групп. Так же в каждой из гомологичных линий проявляются антисимметричные валентные колебания $\nu_3\text{UO}_2^{2+}$.

В спектре излучения первого центра $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$ проявляется полносимметричное валентное колебание $\nu_1(\text{A})\text{SO}_4^{2-}$, частота которого в первой полосе спектра люминесценции 1042 см^{-1} . В другой гомологичной группе это колебание проявляется с частотой 1060 см^{-1} . Структура полос, принадлежащих колебаниям сульфатных групп в спектре люминесценции, не проявилась, но, основываясь на вышеприведенных результатах изучения инфракрасных спектров, можно говорить о наличии в решетке кристалла $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$ неэквивалентных групп SO_4^{2-} .

Проведенные исследования спектра люминесценции $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2$ подтверждают сделанные ранее предположения о наличии неравноценных с точки зрения пространственного строения уранил-сульфатных комплексов в решетке этого кристалла. Небольшое отличие частот

Частотные интервалы в спектрах люминесценции ($T = 77K$)
дисульфатоуранилатов щелочных металлов и их отнесение
(в скобках приведены относительные интенсивности линий)

$Na_2UO_2(SO_4)_2$	$K_2UO_2(SO_4)_2$	$Rb_2UO_2(SO_4)_2$	Отнесение
ПЕРВЫЙ ЦЕНТР			
20487(66)	20286(118)	20279(92)	ν_{0-0}
208(150)			$\nu_2 UO_2^{2+}$
439(113)			$\nu_2 (E) SO_4^{2-}$
850(212)	840(140)	835(390)	$\nu_1 UO_2^{2+}$
935(124)	927(206)	912(110)	$\nu_3 UO_2^{2+}$
1042(170) 1091(180)			$\nu_1 (A_1) SO_4^{2-}$
1157(176)			$\nu_3 (F_2) SO_4^{2-}$
ВТОРОЙ ЦЕНТР			
20480(55)	20280(120)	20273(73)	ν_{0-0}
850(135)	841(250)	835	$\nu_1 UO_2^{2+}$
933(119)	922(212)	918	$\nu_3 UO_2^{2+}$
ТРЕТИЙ ЦЕНТР			
20470(30)	20273(118)		ν_{0-0}
845(128)	841(240)		$\nu_1 UO_2^{2+}$
930(115)	924(180)		$\nu_3 UO_2^{2+}$

электронных переходов отдельных центров, которые мы отождествляем с этими различающимися по строению уранил-сульфатными комплексами, свидетельствует об одинаковом типе координационных полиэдров атомов урана.

Спектр люминесценции $K_2UO_2(SO_4)_2$ приведен на рис. 2, б. Здесь отчетливо проявляется дублетная структура линий, что также может служить основанием для проведения анализа этого соединения, исходя из наличия нескольких центров свечения. Результаты этот анализа приведены в табл. 2. Отсюда видно, что низкотемпературный спектр люминесценции дисульфатоуранилата калия хорошо укладывается в рамки трехцентровой модели. Полоса чисто электронного перехода имеет сложный характер, три максимума этой полосы имеют частоты 20286, 20280, 20273 cm^{-1} . Комбинируя с этими частотами, в первой гомологичной группе полос спектра проявляются колебания $\nu_1 UO_2^{2+}$ с частотами 840 cm^{-1} для первого, 841 cm^{-1} для второго и 841 cm^{-1} для третьего центров, антисимметричное валентное колебание группы UO_2^{2+} с частотами 921, 922, 924 cm^{-1} – для I, II и III центров соответственно.

Колебательная структура в спектре люминесценции $Rb_2UO_2(SO_4)_2$ (рис. 2, в) значительно проще по сравнению со спектрами $Na_2UO_2(SO_4)_2$ и $K_2UO_2(SO_4)_2$. Анализ разностей частот этого спектра дал возможность интерпретировать его, исходя из предположения о наличии двух центров свечения (см. табл. 2).

Сходство колебательных и электронно-колебательных спектров дисульфатоуранилатов щелочных металлов позволяет сделать вывод об изоструктурности кристаллических решеток изученного ряда соединений. Однако в спектрах ИК поглощения и люминесценции указанных веществ проявляются и некоторые различия. При переходе от натриевого к калиевому и рубидиевому комплексу происходит уменьшение частот чисто электронных переходов. Подобная картина наблюдается и для частот, относящихся к валентным колебаниям иона уранила. Это позволяет заключить, что увеличение объема вторичного катиона (Na^+ , K^+ , Rb^+) приводит к усилению координационных связей сульфатных групп с вторичными катионами и, как следствие, к ослаблению связей $\text{S}-\text{O}$ в этих группах.

Таким образом, изучение спектров люминесценции и ИКпоглощения дисульфатоуранилатов щелочных металлов показало, что в решетках изученных веществ имеются неравноценные с точки зрения пространственного строения уранил-сульфатные комплексы, обладающие различающимися значениями энергии электронных и колебательных состояний. Небольшие сдвиги значений частот электронных переходов служат подтверждением того, что тип координации во всех центрах свечения сохраняется. Численные значения частот электронных переходов в изученном ряду веществ укладываются в частотный интервал, характерный для пентагональной координации иона уранила [1].

Список литературы

1. Володько Л. В., Комяк А. И., Умрейко Д. С. // Ураниловые соединения. Мн., 1981. Т. 1.
2. Абрамов А. П., Толстой П. А. // Оптика и спектроскопия. 1973. Т. 37. С. 360.
3. Ким Зен Хо: Автореф. дис. . . . канд. физ.-мат. наук. Мн., 1990.
4. Последович М. Р., Маляревич А. М., Ким Зен Хо, Слепцов Л. Е. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1990. № 3. С. 45.

Поступила в редакцию 28.12.92.

УДК 621.315.592:546.28

*А. П. НОВИКОВ, А. И. УРБАНОВИЧ,
НГУЕН ВАН КОНГ (СРВ), О. С. ХАДАРИНА*

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ПОЛЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛАСТИНАХ ПРИ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ

Calculation results of unsteady—state thermal fields and comparative analysis of this fields with and without consideration of χ and c dependences from temperature for ion beams with variable capacity are shown in this work.

Взаимодействие мощных ионных пучков с полупроводниковыми кристаллами сопровождается сильным разогревом последних. Динамика и конфигурация нестационарного температурного поля в мишени при этом сильно зависят как от параметров пучка, например его интенсивности и степени фокусировки, так и от теплофизических характеристик самого вещества, которые могут изменяться под действием излучения [1]. Для правильной интерпретации результатов экспериментов и для оптимального выбора различных технологических режимов, например режимов ионно-лучевой обработки полупроводниковых кристаллов, необходимо иметь надежный метод расчета температур, по возможности более точно учитывающий реальные условия процесса нагрева [2]. В первом приближении теплофизические характеристики вещества, такие как коэффициент теплопроводности χ и удельная теплоемкость c , при небольших изменениях температуры можно считать постоянными. Однако при использовании мощных пучков, когда температура изменяется в широком интервале и близка к температуре плавления, такое приближение уже несправедливо.

В настоящей работе приведены результаты расчета нестационарных температурных полей в полупроводниковых пластинах и проведен их сравнительный анализ с учетом и без учета зависимости χ и c от температуры для ионных пучков с переменной мощностью.

В работах [3–5] соответственно представлены следующие аппроксимации зависимости коэффициента теплопроводности χ и удельной теплоемкости c от температуры T :

$$\chi(T) = \begin{cases} 1521 \cdot T^{-1.226} & \text{при } 300 < T \leq 1200 \text{ К} \\ 8,97 \cdot T^{-0.502} & \text{при } 1200 < T \leq 1683 \text{ К} \\ 0,64 & \text{при } T > 1683 \text{ К}, \end{cases} \quad (1)$$

$$\chi(T) = \frac{299}{T - 99} \quad \text{при } T > 99 \text{ К}, \quad (2)$$

$$c(T) = 0,641 - 0,247 \cdot 10^{-3} T \quad \text{при } T > 300 \text{ К}, \quad (3)$$

которыми мы и воспользуемся в расчетах.

Представим полупроводниковый кристалл в виде слоя толщины l и будем считать, что вся энергия ионного пучка, распространяющегося вдоль оси z , выделяется на границе слоя $z=0$. Такое предположение оправдано, так как характерный пробег ионов на много порядков меньше толщины пластины и термализация выделенной энергии происходит в тонком приповерхностном слое. В этом случае уравнение, описывающее изменение температуры $T(x, y, z, t)$ в слое, будет иметь вид:

$$\rho c(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\chi(T) \text{grad} T) \quad (4)$$

с начальным условием:

$$T|_{t=0} = T_0 \quad (5)$$

и граничными условиями

$$\chi(T) \frac{dT}{dz} - S(T)|_{z=0} = -A(x, y, t), \quad (6)$$

$$\chi(T) \frac{dT}{dz} + S(T)|_{z=l} = 0,$$

где ρ – плотность вещества.

Функцию, описывающую тепловыделение на границе $z=0$, будем считать функцией гауссовского типа, т. е.

$$A(x, y, t) = \mu I(t) \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{a^2}\right), \quad (7)$$

где $\mu \leq 1$ – коэффициент, учитывающий долю энергии налетающих ионов, идущую на нагрев мишени; $I(t)$ – плотность мощности ионного пучка; a – его полуширина. При ионной имплантации в камере с низким давлением и при специальном закреплении мишени основными источниками потерь энергии будут потери на излучение, описываемые законом Стефана – Больцмана; поэтому функцию $S(T)$, описывающую потери, представим в виде:

$$S(T) = \alpha \sigma (T^4 - T_0^4), \quad (8)$$

где α – параметр, учитывающий эмиссионную способность мишени; σ – постоянная Стефана – Больцмана. Поскольку задача обладает аксиальной симметрией, ее удобно решать в цилиндрической системе координат: $z = z$, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$.

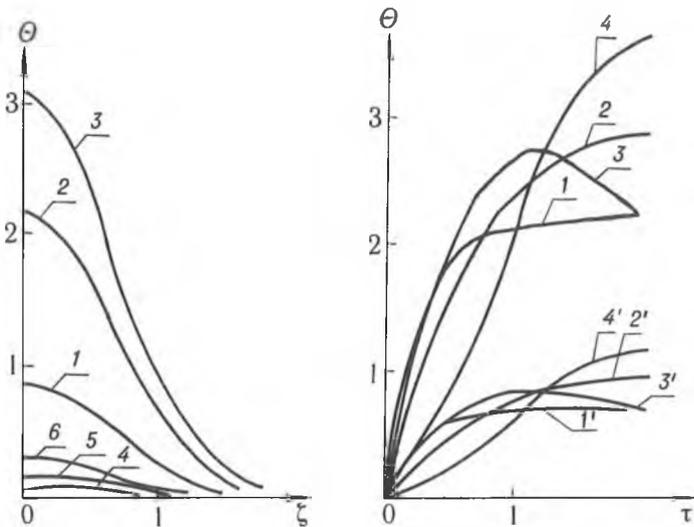


Рис. 1. Зависимость θ от ξ на лицевой ($\eta = 0$) и обратной стороне пластины при:

$\tau = 0,5, \beta = 4,5 \cdot 10^{-4}; \gamma = 2(1,4); \gamma = 5(2,50); \gamma = 7(3,4); \nu = 0(1, 2, 3); \nu = 1(4, 5, 6)$

Рис. 3. Зависимость θ от τ на оси пучка ($\xi = 0$) при значении $\lambda = t_H/t_X = 1$ на разных глубинах в слое.

Кривые 1, 2, 3 соответствуют последовательным значениям $\psi(t)$ в (12). Верхние четыре кривые соответствуют значению $\eta = 0$, а нижние — $\eta = 0,6$

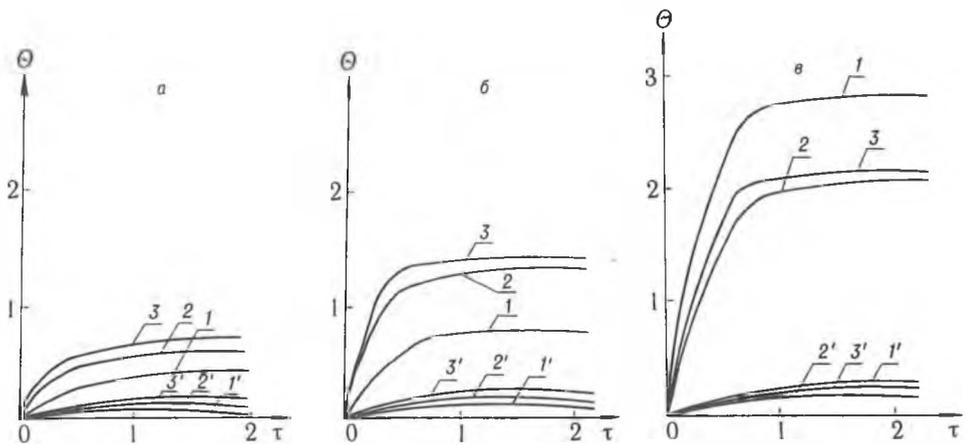


Рис. 2. Зависимость θ от τ на оси пучка ($\xi = 0$) при различных аппроксимациях

зависимости $\chi(T)$:

a — $\beta = 1,1 \cdot 10^{-4}; \gamma = 0,535; x_0 = 1,35; \nu = 0(1, 2, 3); \nu = 1(1', 2', 3')$
 б — $\beta = 1,1 \cdot 10^{-4}; \gamma = 1,07; x_0 = 1,35; \nu = 0(1, 2, 3); \nu = 1(1', 2', 3')$
 в — $\beta = 4,5 \cdot 10^{-4}; \gamma = 4,28; x_0 = 0,34; \nu = 0(1, 2, 3); \nu = 1(1', 2', 3')$

Вводя безразмерные переменные $\eta = z/l, \xi = r/l, \tau = t/t_X$ и функции $f(T) = c(T)/c_0, \varphi(T) = \chi(T)/\chi_0, \psi(t) = I(t)/I_0$, где $t_X = \rho c_0 l^2 / \chi_0$, для приведенной температуры $\theta = (T - T_0)/T_0$ из (4-6) получаем следующую нелинейную краевую задачу:

$$f_1(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial \varphi_1(\theta)}{\partial \theta} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right)^2 + \varphi_1(\theta) \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right) + \varphi_1(\theta) \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2}, \quad (9)$$

$$\theta|_{\tau=0} = 0, \quad (10)$$

$$\varphi_1(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial \eta} - \beta \left[(1 + \theta)^4 - 1 \right] |_{\eta=0} = -\gamma \psi_1(\tau) e^{-\nu^2 \xi^2},$$

$$\varphi_1(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial \eta} + \beta [(1+\theta)^4 - 1] |_{\eta=1} = 0, \quad (11)$$

$$f_1(\theta) = f(T_0(1+\theta)), \quad \varphi_1(\theta) = \varphi(T_0(1+\theta)), \quad \psi_1(\tau) = \psi(\tau t_x),$$

$$\beta = \frac{\alpha G T_0^3}{\chi_0}, \quad \omega = \frac{1}{a}, \quad \gamma = \frac{\mu J_0}{\chi_0 T_0}.$$

Задача (9–11) решалась численно методом суммарной аппроксимации с помощью формул разностной прогонки. Результаты численного счета приведены на рисунках 1–3.

На рис. 1 приведены зависимости θ от ξ при различных значениях γ , в частности для различных значений интенсивностей J_0 ионного пучка. С увеличением γ растут максимальные значения температуры, достигаемой в процессе ионного облучения. Для $l = 1$ см, $\chi = 0,5$ Вт/(см.К),

$T_0 = 300$ К, $\mu = 0,9$, $\psi_1(\tau) = 1$, $\omega = 0,8$, соответствующие кривым 1, 2, 3 значения J_0 равны 0,3; 1,5; 2,1 кВт/см², а значения температур – 527 К, 990 К, 1260 К.

На рис. 2 приведены зависимости θ от τ на оси пучка ($\xi = 0$) при различных значениях γ , когда $\psi_1(\tau) = 1$. Из рис. 2,а видно, что максимальная температура, соответствующая аппроксимациям (2), (3) – (кривая 2), составляет ~480 К ($\theta \approx 0,6$). Значение коэффициента теплопроводности, соответствующее данной температуре, составляет $\chi \approx 0,8$ Вт/(см.К). Кривая 1, построенная при значении $\chi_0 = 1,36$ Вт/(см.К), $\varphi_1(\theta) = 1$, $f_1(\theta) = 1$, даст заниженные результаты, так как в процессе облучения значение коэффициента теплопроводности остается постоянным, причем $\chi_0 > \chi'$. На рис. 2,б приведены аналогичные кривые, но с мощностью ионного пучка, увеличенной в два раза, т. е. при $\gamma = 1,07$.

На рис. 2,в построены зависимости θ от τ на оси пучка при значении $\chi_0 = 0,34$ Вт/(см. К), $\gamma = 4,28$. Значение χ , соответствующее максимальной температуре $\theta \approx 2$, получаемой при аппроксимациях (1)–(3), составляет $\chi' = 0,3$ Вт/(см.К). Поэтому аппроксимация $\chi = \chi_0$, имеющая меньшее значение коэффициента теплопроводности, чем должно быть в процессе нагрева, здесь дает завышенные результаты. Наибольшие различия в температурах на лицевой стороне пластины.

Зададим временную функцию интенсивности $\psi(t)$ в виде:

$$\psi(t) = \begin{cases} 1 & (12,а) \\ c_2 (1 - e^{-t/t_n}) & (12,б) \\ c_3 t/t_n e^{-t/t_n} & (12,в) \\ c_4 (t/t_n)^2 e^{-t/t_n}, & (12,г) \end{cases}$$

где t_n – время облучения вещества ионным пучком. При расчетах будем предполагать, что энергия, получаемая мишенью (доза облучения), остается постоянной. Для этого должно выполняться соотношение

$$\int_0^{t_n} \psi(t) dt = t_n, \quad (13)$$

из которого легко определяются значения постоянных c_j .

На рис. 3 приведены зависимости θ от τ на оси пучка при значении $\lambda = t_n/t_x = 1$ на разных глубинах в слое. Кривые 1, 2, 3, 4 соответствуют последовательным значениям $\psi(t)$. Температура кристалла в центре пятна погружения существенно зависит от характера изменения во времени мощности падающего пучка. Эти различия уменьшаются по мере увеличения η . Для импульсов с временным профилем в виде ступеньки (кривая 1) температура выходит на насыщение практически при $\tau = 1$, а максимальное ее значение при $\tau = 2$ порядка $\theta = 2,3$ (990 К). Для импульсов с $\psi(t)$ вида (12,б) температура нарастает медленнее и при $\tau = 2$ ее значение ~2,8. Если более высокая температура для кривой 4 объясняется более медленным нарастанием функции $\psi(t)$ на начальной стадии облучения. При этом почти вся доза облучения практически выделяется на конечной стадии импульса, приводя к сильному разогреву

мишени. Для импульса с формой профиля $\psi(t)$, определяемой (12, в), наблюдается прохождение температуры через максимум в момент $\tau = 1$, что коррелирует с зависимостью ψ от t .

Список литературы

1. Двуреченский А. В., Качурин Г. А., Нидаев Е. В., Смирнов Л. С. // Импульсный отжиг полупроводниковых материалов. М., 1982.
2. Комаров Ф. Ф., Новиков А. П., Соловьев В. С., Ширяев С. Ю. // Дефекты структуры в ионно-имплантированном кремнии. Мн., 1990.
3. Veil A. E. // RCA Rev. 1979. V. 40. № 3. P. 295.
4. Ho C. Y., Powell R. W., Likey P. E. // Journ. Chem. Rev. Data. 1974. V. 3. № 1. P. 588.
5. Meyer J. R., Krueger M. R., Bartoli F. J. // Journ. Appl. Phys. 1981. V. 51. № 10. P. 5513.

Поступила в редакцию 11.06.92.

УДК 535.37

В. И. ПОПЕЧИЦ

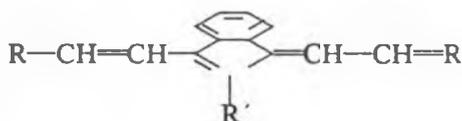
ХИМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ РАСТВОРОВ ТРИКАРБОЦИАНИНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ

By changing the absorption spectra with time the chemical stability of a number of polymethine dyes in the organic solvents has been investigated. It has been shown that destruction of dyes in the solutions is a result of the chemical interaction with the alkaline impurities. Practical recommendations for investigated dyes have been given.

Карбоцианиновые (полиметиновые) красители широко применяются в квантовой электронике и лазерной технике в качестве компонентов активных и пассивных лазерных сред, в фотографии в качестве фотосенсибилизаторов и в ряде других областей науки и техники [1, 2].

В большинстве случаев используются жидкие и твердые растворы полиметиновых красителей в органических растворителях. Поэтому вопросы химической устойчивости растворов указанных красителей имеют большое практическое значение.

В данной работе исследована химическая стабильность нового класса симметричных трикарбоцианиновых красителей:



Структурные формулы заместителей R и R' представлены в таблице. Красители № 4 и № 7 (Кр. 4 и Кр. 7) – йодиты, остальные перхлораты.

Характерной особенностью исследуемых соединений является наличие ортофениленового мостика в центре полиметиновой цепи, который придает определенную «жесткость» молекулам. Красители этого класса хорошо растворяются в органических растворителях. Длинноволновые полосы поглощения указанных красителей расположены в спектральной области 600 – 800 нм (таблица, рис. 1, 3) и имеют высокие коэффициенты экстинкции ($\sim 10^5$). Положение и форма полос поглощения слабо зависят от растворителя, что указывает на незначительное проявление универсальных и специфических межмолекулярных взаимодействий в растворах данных красителей.

В качестве растворителей использовались диметилформамид, этанол, метанол, этиленгликоль, нитробензол, ацетон, глицерин марок ч. д. а., х. ч. и их смеси. Все растворители были спектроскопически чистыми, т. е. по спектрам поглощения растворителей примеси не обнаруживались.

Растворы исследуемых красителей могут применяться в качестве компонентов активных лазерных сред, генерирующих в ближней ИК области, и в качестве пассивных затворов для управления параметрами излучения рубинового лазера [3].

Химическая устойчивость растворов исследовалась по изменениям спектров поглощения в течение времени хранения. Чтобы исключить фотохимическую деструкцию красителей, растворы хранились в полной

темноте. Регистрация спектров поглощения растворов красителей производилась на спектрофотометрах Specord UVVis и Specord – M40.

При хранении в темноте при постоянной температуре (напр., 20 °С) растворы красителей постепенно изменяли цвет от первоначального фиолетового, синего или зеленого до розового, а затем полностью обесцвечивались. Особенно это характерно для растворов малых концентраций ($\leq 10^{-5}$ М). Изменение цвета растворов больших концентраций ($> 10^{-5}$ М) было менее выраженным. Интенсивности длинноволновой и коротковолновой полос поглощения постепенно уменьшались, а с коротковолновой стороны полосы $S_0 \rightarrow S_1$ возникла новая полоса. Вначале интенсивность новой полосы возрастает параллельно с уменьшением интенсивности длинноволновой полосы исходного красителя. При этом наблюдается изобестическая точка между длинноволновой полосой красителя и полосой поглощения продукта распада. Затем, достигнув максимальной величины, интенсивность новой полосы поглощения начинает уменьшаться и изобестическая точка исчезает. В качестве примера на рис. 1 представлена типичная зависимость спектра поглощения раствора от времени хранения. Подобные зависимости наблюдались для всех исследованных красителей.

Измерения показали, что кинетика химической реакции обесцвечивания раствора зависит от структуры красителя, химической природы и чистоты растворителя, температуры и концентрации раствора. Все происходящие изменения спектров поглощения растворов являлись необратимыми. При определенных условиях длинноволновая полоса поглощения исходного красителя с течением времени полностью исчезала, т. е. краситель полностью разрушался. Для всех красителей оптическая плотность полосы продуктов распада не превышала 0,4 оптической плотности длинноволновой полосы исходного красителя в максимуме поглощения, а полуширина новой полосы была в 3–4 раза больше полуширины длинноволновой полосы красителя.

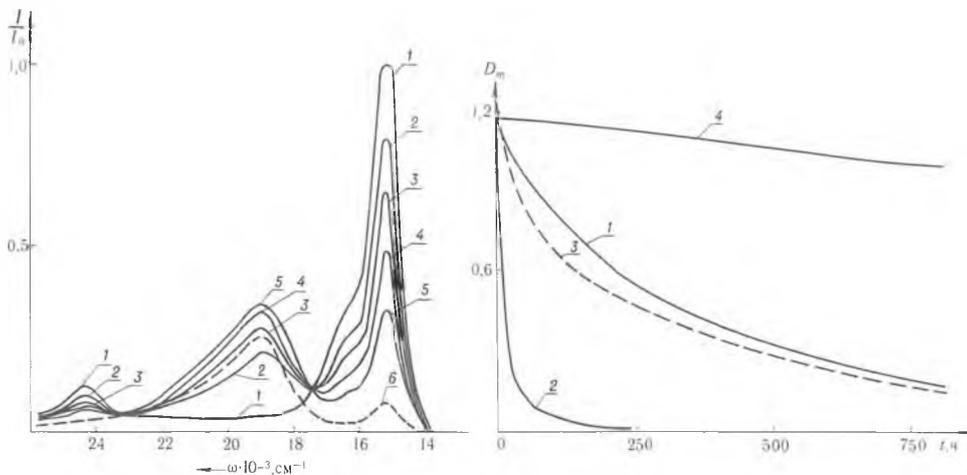


Рис. 1. Зависимость спектра поглощения раствора Кр. 1 в этаноле марки ч. д. а. от времени хранения в темноте: свежеприготовленный раствор (1); 336(2); 672(3); 1392(4); 2304(5) и 4495 ч (6)

Рис. 2. Изменение оптической плотности в максимуме длинноволновой полосы поглощения растворов Кр. 1(1), Кр. 6(2), Кр. 11(3) и Кр. 13(4) в диметилформамиде марки ч. д. а. со временем

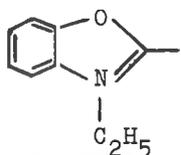
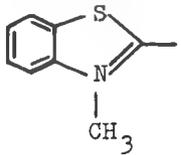
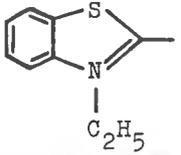
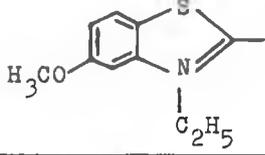
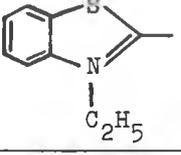
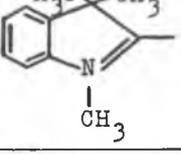
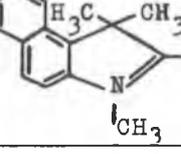
Качественно характер изменения спектров поглощения для каждого красителя оставался практически неизменным в различных растворителях, что свидетельствует об универсальности происходящих в растворах изменений [3].

Данные по химической устойчивости красителей в диметилформамиде марки ч. д. а. приведены в таблице для концентрации растворов $5 \cdot 10^{-6}$ М, из которой видно, что наиболее устойчивыми являются красители, содержащие морфолиновую группу в центре полиметиновой цепи. Пе-

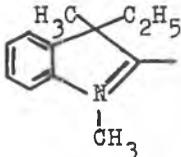
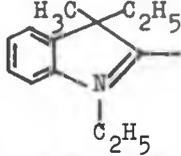
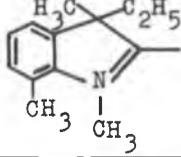
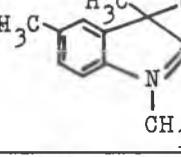
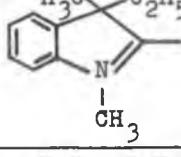
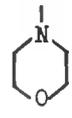
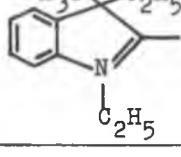
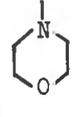
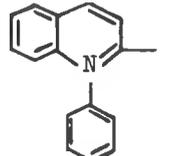
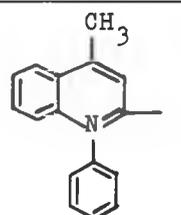
риод «полураспада» Кр. 5, например, превышает 5000 ч. Наименее стабильными являются Кр. 5–9.

Кривые кинетики распада некоторых красителей в диметилформамиде марки ч. д. а. представлены на рис. 2. При малых концентрациях красителя ($\leq 10^{-5}$ М) распад является экспоненциальным, при больших

Параметры химической устойчивости и спектров поглощения
растворов красителей в диметилформамиде

№ Кр.	R	R'	$\omega_M^{\text{погл.}}$ $\cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$	$\Delta\omega_{I/2}^{\text{погл.}}$ $\cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$	Период "полураспада", ч
1		Cl	15,3	1,16	148
2		Cl	13,9	1,22	71
3		Cl	13,9	1,22	70
4		Cl	13,6	1,25	163
5			14,6	2,18	5000
6		Cl	14,0	1,20	6
7		Cl	13,3	1,20	14

концентрациях ($\leq 10^{-5}$ М) наблюдается сложная кинетика разрушения красителей: в первые моменты времени происходит быстрый распад, затем скорость распада постепенно замедляется и кинетические кривые выходят на насыщение. Такой временной ход кривых изменения оптической плотности максимума длинноволновой полосы поглощения (D_m) и, следовательно, концентрации исходного красителя при различных

8		Cl	13,9	1,16	26
9		Cl	13,9	1,16	14
10		Cl	13,8	1,23	58
11		Cl	13,7	1,18	104
12			14,6	2,18	2010
13			14,6	2,18	1900
14		Cl	13,0	1,28	1800
15		Cl	13,0	1,28	1850

первоначальных концентрациях растворов позволял предположить, что необратимое разрушение красителей происходит в результате химического взаимодействия красителей с содержащимися в растворе примесями. Как и следовало ожидать, при нагревании растворов скорости разрушения красителей возрастали, а при охлаждении уменьшались; законы распада для различных температур при одной и той же исходной концентрации раствора оставались практически неизменными. Независимость характера изменений спектров поглощения красителей от химической природы растворителей указывает на то, что примеси, разрушающие исходный краситель, имеют одну и ту же природу.

Исходя из этих соображений было исследовано влияние кислот и щелочей на химическую устойчивость растворов красителей, которые, как известно [4], оказывают существенное влияние на обесцвечивание цианиновых красителей. Спектральные измерения показали, что при добавлении в растворы щелочи (NaOH, KOH и др.) в спектрах поглощения красителей происходят качественно такие же изменения, как и в исходных растворах, только скорости разрушения красителей быстро возрастают с ростом концентрации щелочи. На рис. 3 показано, что даже самый стабильный краситель (Кр. 5) при добавлении в раствор щелочи быстро разрушается. Добавление кислот (HCl, HNO₃ и др.) приводит к совершенно иным изменениям в спектрах поглощения красителей (см. рис. 3). Из этих исследований можно сделать вывод, что разрушение красителей в растворах происходит в результате химического взаимодействия молекул красителя с содержащимися в растворе примесями щелочной природы.

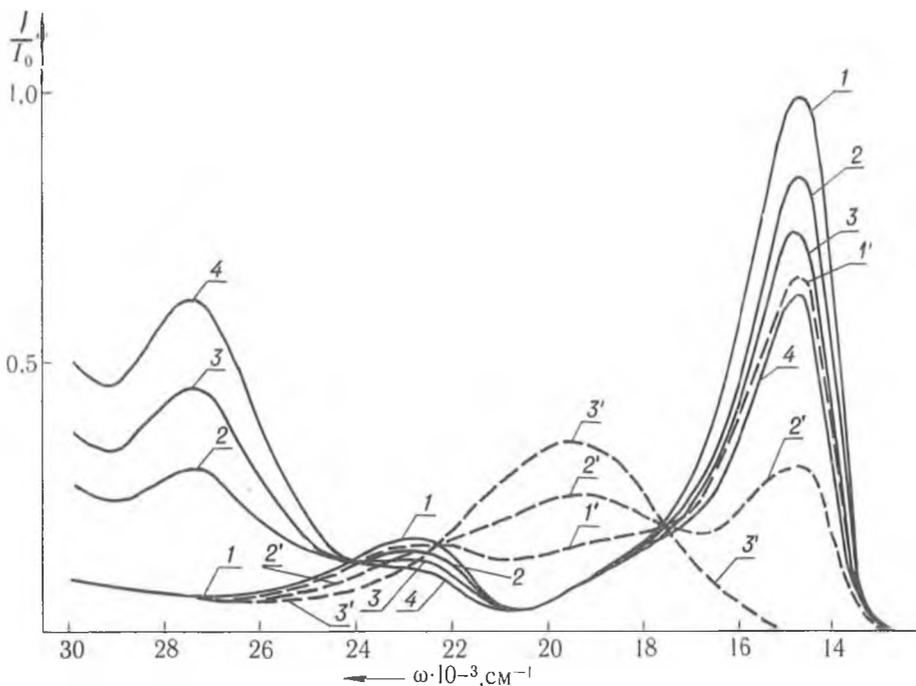


Рис. 3. Изменение спектра поглощения раствора Кр. 5 в диметилформамиде марки ч. д. а. со временем при добавлении в раствор NaOH концентрации $\sim 5 \cdot 10^{-4}$ М (1, 1', 2, 2', 3, 3') и добавлении HCl концентрации $\sim 10^{-3}$ М (1, 1', 2, 2', 3, 3', 4, 4', 5, 5', 6, 6', 7, 7', 8, 8', 9, 9', 10, 10', 11, 11', 12, 12', 13, 13', 14, 14', 15, 15').

Из насыщения реакций деструкции, которое наблюдается при концентрациях красителя в растворе порядка 10^{-4} М, следует, что концентрация щелочных примесей в спектроскопически чистых растворителях не превышает 10^{-4} М. Поэтому для повышения химической стойкости активных и пассивных лазерных сред на основе трикарбоцианиновых красителей необходимо использовать нейтральные растворители, что практически можно достичь добавлением в растворитель или в раствор небольшого количества слабой кислоты, так чтобы концентрация кис-

лотных добавок не превышала примерно 10^{-4} М. При более высоких концентрациях кислотных добавок краситель будет разрушаться уже при взаимодействии с избытком кислоты, хотя скорость деструкции в этом случае ниже, чем под действием щелочных примесей.

Полосы поглощения продуктов разрушения красителей в результате взаимодействия с примесями щелочной природы находятся в более коротковолновой области, чем основная полоса поглощения полиметиновых красителей. Поэтому при возбуждении красителей в длинноволновую полосу поглощения, например излучением рубинового лазера, продукты химической деструкции не будут оказывать существенного влияния на характеристики люминесценции и генерации раствора. Следовательно, в таких случаях можно просто использовать растворы более высоких концентраций. Часть красителя разрушится и реакция деструкции практически прекратится из-за того, что щелочные примеси прореагируют с избытком красителя.

Для практического применения в качестве компонентов активных и пассивных лазерных сред целесообразно использовать наиболее стабильные красители (см. таблицу). Однако следует отметить, что наименее стабильные красители можно успешно использовать для решения «обратной» задачи, т. е. для контроля чистоты растворителей. Качественно контроль на содержание щелочных примесей в растворителях можно осуществлять по изменению окраски растворов указанных красителей. Количественный контроль выполняется по анализу временной зависимости спектров поглощения растворов.

Список литературы

1. Тихонов Е. А., Шпак М. Т. Пелинейные оптические явления в органических соединениях. Киев, 1979.
2. Грузинский В. В. Активные среды ОКГ на многоатомных органических молекулах, общие сведения, к. п. д. генерации. Мн., 1977 (Препринт/Ин-т физики АН БССР).
3. P o r e t s c h i t s V. // Third Symposium Optical Spectroscopy. Reinhardbrunn, 1984. P. 71.
4. Киприанов А. И., Фридман С. Г., Пупко Л. С. // Сб. науч. работ ИОХ АН УССР. 1947. № 13. С. 40.

Поступила в редакцию 07.10.92.

УДК 621.373.826

С. А. ЗЕНЧЕНКО, С. В. ЛЕШКЕВИЧ

РЕЗОНАТОР ДЛЯ МНОГОПУЧКОВОГО ЛАЗЕРА

The results of the theoretical determination of the stability of some types of open resonator with intracavity convergent lens are presented for their application in multibeam laser. The resonator that has low sensitivity to disalignment is presented. Three beam lasers with such resonator has been realized.

Многолучевой лазер, система зеркал которого обеспечивает генерацию излучения одним активным элементом в двух и более резонаторах, открывает широкие возможности для ряда практических применений. Дальнейшее развитие работ по многопучковой генерации в лазерах на основе конденсированных сред [1–3] требует разработки достаточно простого резонатора, делающего возможным работу лазера в многопучковом режиме. Так как наличие взаимодействия между отдельными лучами [2, 3] увеличивает требования на механическую жесткость системы, необходим резонатор, обладающий пониженной чувствительностью к разъюстировке зеркал.

Определенные перспективы с этой точки зрения возлагаются на резонатор с вогнутым отражающим зеркалом, центр кривизны которого расположен в активном элементе на его главной оптической оси, а устойчивость обеспечивается линзой, помещенной внутрь резонатора. Поскольку в твердотельных лазерах уже существует линза, обусловленная неравномерным нагревом лазерного кристалла под действием излучения накачки [4], необходимо знать, при каких условиях она обеспечивает устойчивость.

Расчеты областей устойчивости [5] были проведены численно. Для наглядности в качестве координат были выбраны расстояния от центра линзы до каждого из двух зеркал, составляющих резонатор. На рис. 1 представлены, на наш взгляд, самые интересные из полученных диаграмм устойчивости для резонаторов с зеркалами различной формы и положительной линзой с фокусным расстоянием F внутри резонатора. Диаграмма на рис. 1, *a* соответствует случаю, когда оба зеркала, составляющих резонатор, плоские; рис. 1, *б*—когда одно из плоских зеркал заменено сферическим с радиусом кривизны R ; рис. 1, *в*—когда сферические оба зеркала.

Наиболее важным следствием из приведенных результатов является то, что в случае использования резонатора с одним сферическим зеркалом, радиус кривизны R которого незначительно превышает фокусное расстояние F тепловой линзы, и вторым плоским зеркалом (рис. 1, *б*)

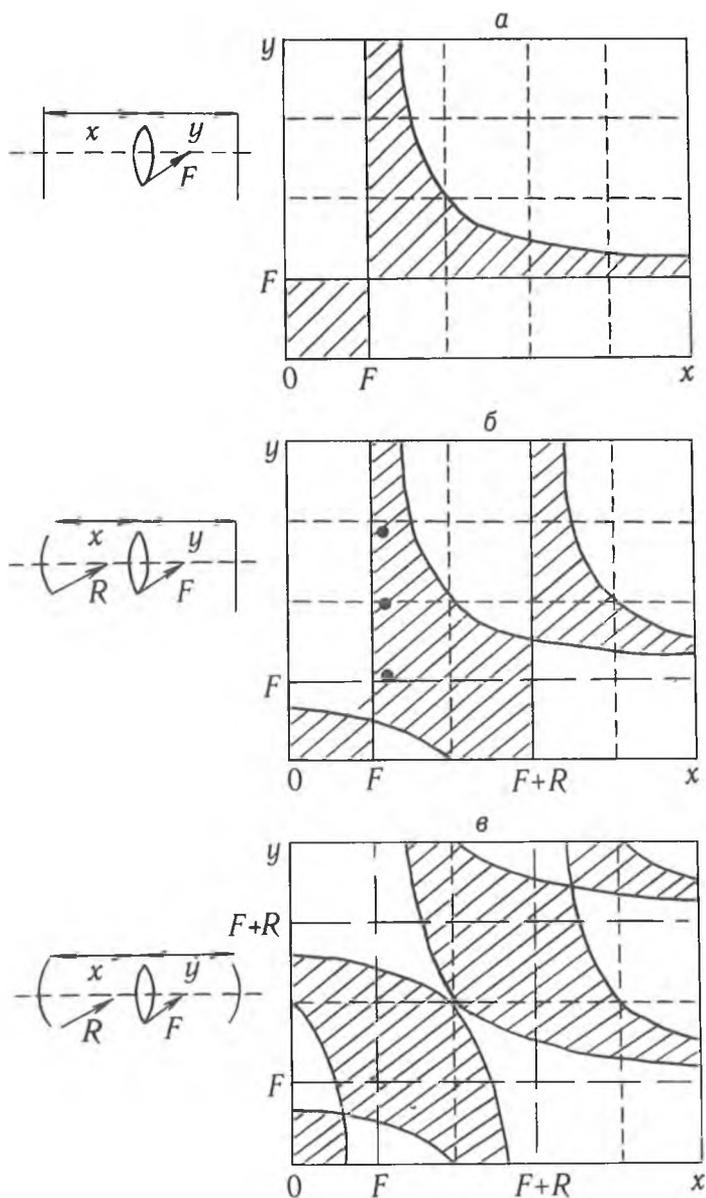


Рис. 1. Диаграммы устойчивости (заштрихованная область) для резонаторов, содержащих линзу с фокусным расстоянием $f > 0$

при соответствующем выборе положений оптических элементов генерация не пропадает после поворота плоского зеркала (если его размеры

достаточно велики) на угол, определяемый только геометрией кристалла и составляющий по оценкам величину порядка ± 5 градусов для кристалла длиной $l = 10$ см и диаметром $D = 5$ мм. Это обусловлено тем, что в отличие от такого же резонатора, не содержащего линзы, существуют области устойчивости, соответствующие длине резонатора, превышающей радиус кривизны сферического зеркала. Для сравнения отметим, что в резонаторе с плоскими зеркалами требуется обеспечить параллельность одного зеркала другому с точностью не ниже $\varphi \ll ND/R$, что составляет обычно величину $\approx 0,001$ радиана, где D – диаметр кристалла, R – радиус кривизны зеркала, N – число проходов оптического излучения по резонатору.

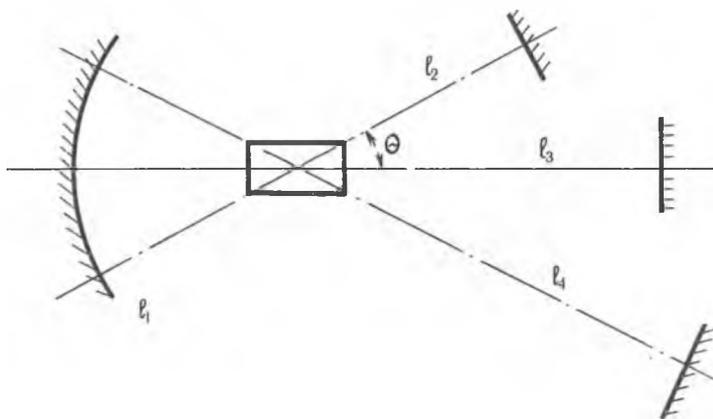


Рис. 2. Схема трехлучевого лазера

Заметим, что при большой длине резонатора диапазон мощностей накачки, при которых обеспечивается устойчивость, становится уже из-за зависимости фокусного расстояния тепловой линзы от мощности накачки. Кроме того, можно ожидать, что в лазере с таким резонатором стабильность выходной мощности лазера будет выше, чем в резонаторе с плоскими зеркалами, поскольку механические колебания зеркал не приводят к значительной модуляции добротности резонатора. Таким образом, могут быть снижены требования на жесткость механической конструкции.

В эксперименте нами использовался лазер на $Y_3Al_5O_{12} - Nd^{3+}$ с непрерывной накачкой, мощность которой устанавливалась из расчета, чтобы оптическая сила тепловой линзы, наводимой в кристалле, составляла величину 4 ± 1 диоптрии. Фокусное расстояние наведенной линзы оценивалось по диаграмме рис. 1, а исходя из параметров резонатора, при которых происходил срыв генерации в резонаторе с плоскими зеркалами. Использование цилиндрического зеркала с радиусом кривизны $R = 43$ см и трех плоских выходных зеркал дало возможность получить устойчивую генерацию одновременно трех лазерных пучков на одном активном элементе длиной 10 см и диаметром 5 мм. Расстояние от центра кристалла до цилиндрического зеркала l_1 составляло 28,5 см, а до выходных плоских зеркал l_2 , l_3 и l_4 – 29 см, 45,5 см и 64 см соответственно (рис. 2). Углы между боковыми и осевым пучками могли изменяться от 1 до 4 градусов. Для наглядности на диаграмме рис. 1, б нанесены точки, по которым были выбраны параметры каждого из трех резонаторов многолучевого лазера.

Измерение угла разворота плоского зеркала, при котором еще присутствует генерация, показало, что лазерный луч не пропадает при повороте на любой угол в пределах ± 4 градуса в плоскости цилиндрического зеркала относительно центрального положения. При углах поворота, близких к предельным, мощность излучения несколько падала.

Таким образом, полученные результаты свидетельствуют о том, что использование сферического (или цилиндрического) зеркала в сочетании с положительной линзой внутри резонатора позволяет получить работо-

способный резонатор, обеспечивающий устойчивость для нескольких направлений одновременно, что делает его применимым для создания многопучкового лазера.

Авторы выражают признательность профессору А. П. Хапалюку за участие в обсуждении результатов работы.

Список литературы

1. Зенченко С. А., Портнягин А. И., Филиппов А. Е. // Тез. докл. XIII Междунар. конф. по когер. и нелинейной оптике. Мн., 1988. Ч. 2. С. 251.
 2. Зенченко С. А., Лешкевич С. В., Портнягин А. И. и др. // Квантовая электроника. 1990. Т. 17. № 7. С. 841.
 3. Зенченко С. А., Лешкевич С. В. // Оптика и спектроскопия. 1990. Т. 69. № 5. С. 1134.
 4. Foster J. D., Osterink L. M. // Journ. Appl. Phys. 1970. V. 41. № 9. P. 3656.
 5. Справочник по лазерам. Т2/Пер. с англ.; Под ред. А. М. Прохорова. М., 1978. С. 11.
- Поступила в редакцию 07.10.92.

УДК 577.3

Г. В. ГРУШЕВСКАЯ, А. И. ХМЕЛЬНИЦКИЙ

ПРОТЕКАНИЕ ДИФфуЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ПРОСТРАНСТВЕННО-РАСПРЕДЕЛЕННЫХ СИСТЕМАХ ТИПА АНТИГЕН—АНТИТЕЛО

The antigen-antibody interaction on the surface, taking into account the Brownian motion of reactants, is simulated. It is shown that during immunological reactions in the spaced system substances are spent nonuniformly. This causes oscillations of the reactant concentrations.

Эффективность протекания реакции «антиген – антитело» определяется пространственным расположением F_{ab} -субъединиц антитела, находящихся в постоянном броуновском движении [1, 2]. Целью данной работы является теоретическое рассмотрение кинетики протекания реакции «антиген – антитело» в пространственно-распределенной системе с учетом броуновского движения компонент реакции.

Используемая для расчетов модель предполагала, что взаимодействие антигена с антителом протекает по следующему механизму:



где X – свободная F_{ab} -субъединица антитела, A – антиген, Y – связанная с антигеном F_{ab} -субъединица антитела, Z – комплекс «антиген – антитело».

Для протекания реакций (1–3) существенно расположение субъединиц антитела и активных центров антигена в пространстве. Первая реакция описывает взаимодействие антигена A с одной из свободных F_{ab} -субъединиц антитела при условии, что в окрестности, доступной второму центру связывания антигена, не находится вторая свободная F_{ab} -субъединица. Вторая реакция характеризует взаимодействие антигена A одновременно с двумя F_{ab} -субъединицами данного антитела. В реакции (2) комплекс «антиген – F_{ab} -субъединица», образовавшийся в реакции (1), взаимодействует со второй свободной F_{ab} -субъединицей антитела. Третье уравнение описывает изменение конформации всего антитела после его связывания с антигеном [1, 2].

Пусть антитела расположены на пластине в плоскости z_0 (рис. 1).

Реакция идет не на идеальной плоскости, а в тонком слое толщиной порядка $2l_{F_{ab}}$, где $l_{F_{ab}}$ – размер F_{ab} -субъединицы вдоль большой полуоси. Тогда угол $\Delta\nu$ между F_{ab} -субъединицами, при котором происходит их взаимодействие с антигеном, определяется выражением:

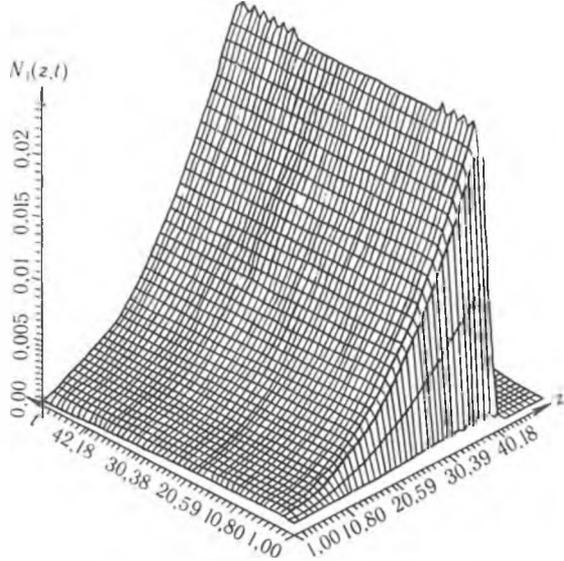
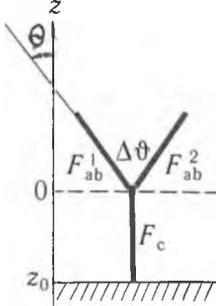
$$\sin(\Delta\nu/2) = l_{ant} / (2l_{F_{ab}}). \quad (4)$$

Здесь l_{ant} – длина антигена.

Реакции, протекающие в ограниченном объеме, определяются переносом субстрата в место протекания реакции [3]. Уравнения, описы-

Рис. 1. Схематическое изображение антитела на подложке. F_{ab}^1 , F_{ab}^2 и F_c – субъединицы антитела

Рис. 2. Распределение $N_i(z, t)$ связанных F_{ab} -субъединиц антитела



вающие функции распределения субстратов, для модели взаимодействия «антиген – антитело» запишем в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_{ant}(z, z_0; t)}{\partial t} = & D_{ant} \nabla_z^2 N_{ant}(z, z_0; t) - k_0 \left(k_0 \int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} N_0(\nu, \nu_0; t) \sin \nu d\nu + 1 \right) \times \\ & \times N_{ant}(z, z_0; t) 2\pi N_0(\nu, \nu_0; t) \theta(l_{F_{ab}} - z) \theta(z - z_0) + \\ & + 2\pi k_1 \left(\left(k_1 \int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} N_1(\nu, \nu_0; t) + 1 \right) \sin \nu d\nu + 1 \right) N_1(\nu, \nu_0; t) \theta(l_{F_{ab}} - z) \theta(z - z_0); \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_0(\nu, \nu_0; t)}{\partial t} = & D_0 \nabla_\nu^2 N_0(\nu, \nu_0; t) - k_0 \left(k_0 \int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} N_0(\nu, \nu_0; t) \sin \nu d\nu + 1 \right) \times \\ & \times N_{ant}(z, z_0; t) 2\pi N_0(\nu, \nu_0; t) \theta(l_{F_{ab}} - z) \theta(z - z_0) + \\ & + k_1 \left(k_1 \int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} N_1(\nu, \nu_0; t) \sin \nu d\nu + 1 \right) N_1(\nu, \nu_0; t) - \\ & - k_0 N_0(\nu, \nu_0; t) \int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} N_1(\nu, \nu_0; t) \sin \nu d\nu, \end{aligned} \quad (6)$$

где D_{ant} , D_0 – коэффициенты диффузии антигена и субъединицы X антитела соответственно; $N_{ant}(z, z_0; t)$, $N_0(g, g_0; t)$, $N_1(g, g_0; t)$ – концентрации антигена, свободных F_{ab} -субъединиц и связанных F_{ab} -субъединиц антитела соответственно; k_0 , k_1 – постоянные соответствующих химических реакций; t – время; g , g_0 – угловые переменные в сферических координатах, $g = (\nu, \varphi)$, причем по углу φ в системе уравнений (5, 6) проведено усреднение; θ – тета-функция. Совокупность связанных F_{ab} -субъединиц

антител N_1 состоит из F_{ab} -субъединиц антител N'_1 , у которых лишь одна F_{ab} -субъединица связана с антигеном, и из F_{ab} -субъединиц антител N''_1 , у которых связаны две F_{ab} -субъединицы: $N_1 = N'_1 + N''_1$.

Данные два типа F_{ab} -субъединиц отличаются значениями коэффициентов диффузии D'_1 , D''_1 и их поведение описывается уравнениями:

$$\frac{\partial N'_1(\nu, \nu_0; t)}{\partial t} = D'_1 \nabla^2 N'_1(\nu, \nu_0; t) + k_0 N_{ant}(z, z_0; t) N_0(\nu, \nu_0; t) \times \theta(1_{F_{ab}} - z) \theta(z - z_0) - N'_1(\nu, \nu_0; t) \left(k_1 - k_0 \int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} \sin \nu d\nu N_0(\nu, \nu_0; t) \right); \quad (7)$$

$$\frac{\partial N''_1(\nu, \nu_0; t)}{\partial t} = D''_1 \nabla^2 N''_1(\nu, \nu_0; t) + k_0 \int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} N_0(\nu, \nu_0; t) \sin \nu d\nu \times N_{ant}(z, z_0; t) N_0(\nu, \nu_0; t) \theta(1_{F_{ab}} - z) \theta(z - z_0) - (k_1^2 + k_5) N''_1(\nu, \nu_0; t) \int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} N_1(\nu, \nu_0; t) \sin \nu d\nu. \quad (8)$$

Концентрации специфически связанных антител $N_2(g, g_0; t)$ можно найти из уравнения:

$$\frac{\partial N_2(\nu, \nu_0; t)}{\partial t} = k_5 N_1(\nu, \nu_0; t) \int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} N_1(\nu, \nu_0; t) d\nu. \quad (9)$$

Тогда решение уравнений системы (5-8) имеет вид:

$$N_i(z, z_0; t, t_0) = N_i^{(0)} + \int N_i(z - z', t - t') j_i(z' - z_0, t' - t_0) dz' dt'; \quad (10)$$

$i = 0, 1, ant.$

Здесь $N_i^{(0)}$; $i = 0, 1, ant$ – свободное решение уравнений (5-8) без источников, равных

$$j_{ant} = 2\pi k_1 \left(\left(k_1 \int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} N_1(\nu, \nu_0; t) + 1 \right) \sin \nu d\nu + 1 \right) N_1(\nu, \nu_0; t) \theta(1_{F_{ab}} - z) \theta(z - z_0);$$

$$j_0 = k_1 \left(k_1 \int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} N_1(\nu, \nu_0; t) \sin \nu d\nu + 1 \right) N_1(\nu, \nu_0; t);$$

$$j_1 = j'_1 + j''_1 = k_0 N_{ant}(z, z_0; t) N_0(\nu, \nu_0; t) \theta(1_{F_{ab}} - z) \theta(z - z_0) \times \left(\int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} N_0(\nu, \nu_0; t) \sin \nu d\nu + 1 \right).$$

$N_i^{(0)}$ имеют вид:

$$\langle N_i^{(0)}(g, g_0; t_0 + dt) \rangle_{\nu} = \sum_k \exp(-m_{ik}^2 dt) \sum_{l, m, n} \langle n_{ik} \rangle \exp(-D_{mn}^{l(ik)} |l + 1| dt) \langle \bar{T}(g_0) T(g) \rangle_{\nu} \times \theta(1_{F_{ab}} - z) \theta(z - z_0); \quad (11)$$

$i = 0, 1; k = 1', 1''$

$$m_0^2 = k_0 N_{\text{ant}}(z_0, z(t_0 - dt); t_0) +$$

$$+ k_3 N_1(\nu_0, \nu(t_0 - dt); t_0) \theta(l_{F_{\text{ab}}} - z) \theta(z - z_0);$$

$$m_1^2 = (k_1 - k_0) \int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} \sin\nu d\nu N_0(\nu, \nu_0; t);$$

$$m_{1\nu}^2 = (k_1^2 + k_5) \int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} N_1(\nu, \nu_0; t) \sin\nu d\nu;$$

$$N_{\text{ant}}^{(0)}(z, z_0; t_0 + dt) = \langle n_{\text{ant}} \rangle (1 / (4\pi D_{\text{ant}} t))^{1/2} \exp(-m_{\text{ant}}^2 dt -$$

$$- (z - z_0)^2 / (4D_{\text{ant}} dt)); \quad (12)$$

$$m_{\text{ant}}^2 = k_0 (k_0) \int_{\nu - \Delta\nu}^{\nu + \Delta\nu} N_0(\nu, \nu_0; t) \sin\nu d\nu + 1) \times$$

$$\times 2\pi N_0(\nu, \nu_0; t) \theta(l_{F_{\text{ab}}} - z) \theta(z - z_0),$$

где $T(g)$, $T(g_0)$ – функции Вигнера; $D_{\text{mn}}^{l(\text{ik})}$ – тензор диффузии соответствующих субстратов.

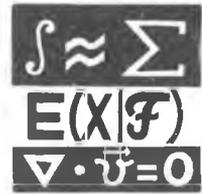
Так как зависимость концентрации $N_i(t)$ от угловых переменных определяет анизотропию системы, являющуюся тензором 2-го ранга, то в (11) $l=0,2$. Положим $z_0 = -l_{F_{\text{ab}}}$, $\nu_0 = 0$ и учтем: $\cos\nu = z/l_{F_{\text{ab}}}$.

Результаты численного расчета на основе полученного решения приведены на рис. 2. Если химические реакции в системе не протекают, то со временем начальное распределение антигена, выбранное в виде σ -функции, расплывается и приобретает гауссов вид по оси Z . Расчеты показывают, что реакции, протекающие в узком слое толщиной $2l_{F_{\text{ab}}}$, зависят от притока вещества в направлении Z . С течением времени t концентрация антигена непрерывно убывает. Концентрация связанной F_{ab} -субъединицы (см. рис. 2) вначале резко возрастает, а потом плавно убывает с небольшими пульсациями. Последнее связано с тем, что для реакций с диффузией, как показано в [4], возможны автоколебательные режимы. Из рис. (2) следует, что вещества в иммунохимических реакциях расходуются неравномерно. Это приводит к осцилляциям по оси Z . Реакция наиболее эффективно протекает в том случае, если моды концентраций антигена и F_{ab} -субъединиц совпадают.

Список литературы

1. B u r t o n D. R. // Immunology Today. 1986. V. 7. № 6. P. 165.
2. M u r p h y R. M. et al // Biophys. Journ. 1988. V. 54. № 1. P. 45.
3. G a r d i n e r C. M. Handbook of stochastic method. Hamb., 1985.
4. Х а к е н Г. // Термодинамика и кинетика биологических процессов. М., 1980. С. 83.

Математика и механика



УДК 517.977

А. О. АБДУРАХИМОВ

ОПТИМИЗАЦИЯ ЛИНЕЙНОЙ СИСТЕМЫ ПО ПРИНЦИПУ ПОЛУЧЕНИЯ ГАРАНТИРОВАННОГО РЕЗУЛЬТАТА

Linear nonstationary dynamic system is considered on the family of quadratic terminal cost functions to obtain the guaranteed result. A package maximum principle is proved.

Постановка задачи. Пусть $J = \{1, \dots, n\}$, $R = \{1, \dots, r\}$, L, K^+, K^- , $l \in L$, – заданные конечные множества индексов, $K_l = K_l^+ \cup K_l^-$; L^+, L^- , – некоторые подмножества множества L : $L^+ \cup L^- = L$, $L^+ \cap L^- = \emptyset$; D_0, D_{kl} , $k \in K_l$, $l \in L$, – симметричные неотрицательные $n \times n$ -матрицы; a_0, a_{kl} , $k \in K_l$, $l \in L$, – n -векторы; b_{kl} , $k \in K_l$, $l \in L$, – скаляры; $f_0(x) = x'D_0x/2 + a_0'x + b_0$, $f_{kl}(x) = x'D_{kl}x/2 + a_{kl}'x + b_{kl}$ – квадратичные функции n переменных $x = (x_j, j \in J)$.

В классе кусочно-непрерывных r -вектор-функций $u = u(\cdot) = (u_r(t), r \in R)$, $t \in T = [t^*, t^*]$, рассмотрим непрерывную систему

$$\dot{x} = A(t)x(t) + B(t)u(t), \quad x(t^*) = x_0, \quad (1)$$

$$u_* \leq u(t) \leq u^*, \quad t \in T, \quad (2)$$

где $x(t)$ – n -вектор состояния системы управления в момент времени t , x_0 – начальное состояние; $A(t), B(t)$, $t \in T$, – непрерывные $n \times n$ -, $n \times r$ -матричные функции; u_* , u^* , – r -векторы ограничений на управляющие воздействия.

Кусочно-непрерывную функцию $u(t)$, $t \in T$, будем называть допустимым управлением, если она удовлетворяет неравенствам (2). Трасектория $x(t)$, $t \in T$, уравнения (1), порожденная допустимым управлением, также называется допустимой [1].

На допустимом управлении $u(\cdot) = (u(t), t \in T)$ вычислим (с помощью формулы Коши [2]) состояние системы в конечный момент времени t^* . Считая функции $f_{kl}(x)$, $x \in R^n$, $k \in K_l$, $l \in L$, компонентами критерия качества непрерывной задачи оптимального управления, гарантированным значением критерия качества на управлении $u(\cdot)$ назовем число

$$J(u) = f(x(t^*)) = f_0(x(t^*)) + f^+(x(t^*)) + f^-(x(t^*)),$$

где

$$f^+(x) = \sum_{l \in L^+} f_l^+(x), \quad f_l^+(x) = \max_{k \in K_l^+} f_{kl}(x);$$

$$f^-(x) = \sum_{l \in L^-} f_l^-(x), \quad f_l^-(x) = \min_{k \in K_l^-} f_{kl}(x).$$

Задачу

$$J(u) = f(x(t^*)) \rightarrow \min_u, \quad (3)$$

$$\dot{x} = A(t)x(t) + B(t)u(t), \quad x(t^*) = x_0 \quad (4)$$

$$u^* \leq u(t) \leq u^*, t \in T, \quad (5)$$

будем называть линейно-квадратичной задачей гарантированного управления непрерывной системой.

Определение 1. Допустимое управление $u^0(t)$, $t \in T$, и соответствующая ему траектория $x^0(t)$, $t \in T$, называются оптимальными, если $J(u^0) = f(x^0(t^*)) = \min f(x(t^*)) = \min J(u)$.

Сглаживание задачи. Пусть $u(t)$, $t \in T$, – допустимое управление задачи (3)–(5). На терминальном состоянии $x(t^*)$ подсчитаем числа

$$\omega_{kl}^+ = \omega_{kl}^+(x(t^*)) = f_l^+(x(t^*)) - f_{kl}(x(t^*)), k \in K_l^+;$$

$$\omega_{kl}^- = \omega_{kl}^-(x(t^*)) = f_l^-(x(t^*)) - f_{kl}(x(t^*)), k \in K_l^-.$$

Построим множества

$$K_l^{+*} = \{k \in K_l^+ : \omega_{kl}^+ = 0\}, K_l^{>+} = \{k \in K_l^+ : \omega_{kl}^+ > 0\}, l \in L^+;$$

$$K_l^{-*} = \{k \in K_l^- : \omega_{kl}^- = 0\}, K_l^{<-} = \{k \in K_l^- : \omega_{kl}^- < 0\}, l \in L^-.$$

Выбирая из каждого множества K_l^{+*} , $l \in L^+$ (K_l^{-*} , $l \in L^-$) по одному элементу $q^l(g^l)$, составим набор $p^+ = \{p_l^+, l \in L^+\}$ ($p^- = \{p_l^-, l \in L^-\}$), где $p_l^+ = \{u(\cdot), q^l\}$, ($p_l^- = \{u(\cdot), g^l\}$). Пусть $p = \{p^+, p^-\}$, P – множество всевозможных наборов p , $\bar{u}(t) = u(t) + \Delta u(t)$, $t \in T$, – произвольное допустимое управление, $\bar{x}(t) = x(t) + \Delta x(t)$, $t \in T$, – соответствующая ему траектория.

Следуя [3], для фиксированного элемента $p \in P$ составим задачу

$$\Delta x'(t^*) D \Delta x(t^*) / 2 + c' \Delta x(t^*) \rightarrow \min,$$

$$\Delta \dot{x} = A(t) \Delta x(t^*) + B(t) \Delta u(t), \Delta x(t^*) = 0,$$

$$u^* - u(t) \leq \Delta u(t) \leq u^* - u(t), t \in T,$$

$$\Delta x'(t^*) D_i \Delta x(t^*) / 2 + c_i' \Delta x(t^*) \leq \gamma_i, i \in I^*;$$

$$\Delta x'(t^*) D_i \Delta x(t^*) / 2 + c_i' \Delta x(t^*) \geq \gamma_i, i \in I^*,$$

(6)

где

$$D = D_0 + \sum_{l \in L^+} D_{q^l} + \sum_{l \in L^-} D_{g^l},$$

$$a = a_0 + \sum_{l \in L^-} a_{q^l} + \sum_{l \in L^-} a_{g^l},$$

$$c = a + D x(t^*); c_i = a_i + D_i x(t^*),$$

$$D_i = D_{kl} - D_{q^l}, a_i = a_{kl} - a_{q^l}, l \in L^+,$$

$$k \in K_l^+ | q^l, i \in I^* = \bigcup_{l \in L^+} K_l^+ | q^l;$$

$$D_i = D_{kl} - D_{g^l}, a_i = a_{kl} - a_{g^l}, l \in L^-,$$

$$k \in K_l^- | g^l, i \in I^* = \bigcup_{l \in L^-} K_l^- | g^l;$$

$$\gamma_i = \gamma_{kl} = \omega_{kl}^+(x(t^*)), l \in L^+, k \in K_l^+ | q^l;$$

$$\gamma_i = \gamma_{kl} = \omega_{kl}^-(x(t^*)), l \in L^-, k \in K_l^- | g^l.$$

Совокупность непрерывных задач оптимального управления (6), соответствующих всевозможным наборам $p \in P$, назовем сглаживанием задачи (3)–(5).

Задача (6) имеет, по крайней мере, одно допустимое управление $\Delta u(t) \equiv 0$, $t \in T$. Очевидно, что если $u^0(t)$, $t \in T$, – оптимальное управление задачи (3)–(5), то управление $\Delta u^0(t) \equiv 0$, $t \in T$, является оптимальным в задаче (6).

Опора. Опорное управление. Пусть $I_{оп}$ – произвольное подмножество множества $I = I^* \cup I^*$: $I_{оп} = I_{оп}^* \cup I_{оп}^*$, $I_{оп}^* \subset I^*$, $I_{оп}^* \subset I^*$. На отрезке T выберем конечное множество моментов $T_{оп} = \{t_j, j \in J_{оп}\}$, $t_j < t_{j+1}$, $J_{оп} \subset J$, $|J_{оп}| \leq |I_{оп}|$. Каждому моменту t_j поставим в соответствие такой набор индексов $R_{оп}(t_j) \subset R_{оп}^j \subset R$, что $|I_{оп}| = |R_{оп}|$, $R_{оп} = \{R_{оп}^j, j \in J_{оп}\}$. Введя обозначение $S_{оп} = \{T_{оп}, R_{оп}\}$, составим матрицу

$$\Phi_{оп} = \Phi(I_{оп}, S_{оп}) = (c_i(l(t_j)), i \in I_{оп}, l \in R_{оп}^j, j \in J_{оп}),$$

где

$$c_i(t) = B'(t)F'(t^*, t)(a_i + D_x(t^*)), i \in I;$$

$F(t, \tau)$, $t, \tau \in T$, – фундаментальная матрица решений однородной части системы (4).

Определение 2. Совокупность $M_{оп}(p) = \{I_{оп}, S_{оп}\}$ назовем (локальной) опорой основных ограничений на управлении $u(\cdot)$, матрицу $\Phi_{оп} = \Phi(M_{оп}(p)) = \Phi(I_{оп}, S_{оп})$ – (локальной) опорной матрицей, если $\det \Phi_{оп} \neq 0$.

Определение 3. При фиксированном $p \in P$ пару $\{u(\cdot), M_{оп}(p)\}$ из допустимого управления и опоры ограничений будем называть опорным управлением задачи (6). Опорное управление будет считаться невырожденным, если значения опорных компонент управления в опорные моменты не критические:

$$u_{*1} < u_l(t) < u_{*l}, l \in R_{оп}(t), t \in T_{оп},$$

и выполняются неравенства

$$\gamma_i > 0, i \in I_{*н} = I^* \setminus I_{оп}^*; \gamma_i < 0, i \in I_{н} = I \setminus I_{оп}^*.$$

Пакетный принцип максимума. Пусть $\{u^0(\cdot), M_{оп}(p)\}$ – невырожденное опорное управление, $\psi(t)$, $t \in T$, – решение сопряженной системы

$$\dot{\psi} = -A'(t)\psi, \psi(t^*) = H^{оп} \nu_{оп} - D_x(t^*) - a, \quad (7)$$

где

$$\nu_{оп}^* = \nu'(I_{оп} | u(\cdot), p) = (c_l(t_j), j \in J_{(1)}, l \in R) \cdot \Phi_{оп}^{-1}$$

– вектор потенциалов,

$$c(t) = B'(t)F'(t^*, t)(a + D_x(t^*));$$

$$H^{оп} = \left(c_{ij}, i \in I_{оп} \right)_{j \in J}$$

Введем функцию $H(\psi, u, t) = -\psi' B(t)u$.

Обозначим через $P(M_{оп})$ совокупность наборов $p \in P$, для которых выполняются условия: а) максимума

$$H(\psi^0(t), u^0(t), t) = \max_{u^* \leq u \leq u^*} H(\psi^0(t), u, t), t \in T, \quad (8)$$

б) дополняющей нежесткости

$$\nu_i^0 \gamma_i = 0, i \in I_{оп}, \quad (9)$$

с опорой $M_{оп}$. Тогда для локальной оптимальности в задаче (3)–(5) допустимого управления $u^0(t)$, $t \in T$, необходимо существование такого пакета опор $M_{оп}^s$, $s = \overline{1, \tau}$, что:

$$1) U_{s-1} P(M_{оп}^s) = P, P(M_{оп}^g) \cap P(M_{оп}^{\bar{g}}) = \emptyset, g, \bar{g} = \overline{1, \tau}, g \neq \bar{g};$$

2) вдоль опорных управлений $\{u^0(\cdot), M_{оп}^s\}$, $s = \overline{1, \tau}$, и соответствующих им траекторий $\psi^0(t, M_{оп}^s | p)$, $t \in T, p \in P(M_{оп}^s)$, $s = \overline{1, \tau}$, сопряженной системы (7) и векторов $\nu^0(M_{оп}^s | p)$, $p \in P(M_{оп}^s)$, $s = \overline{1, \tau}$, выполняются условия (8), (9), [4].

Список литературы

1. Габасов Р., Кириллова Ф. М. и др. Конструктивные методы оптимизации. Мн., 1984—1987. Ч. 1—4.
2. Габасов Р., Кириллова Ф. М. Оптимизация линейных систем. Мн., 1973.
3. Абдурахимов А. О. Гарантированная минимизация совокупности квадратичных функций // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1991. № 2. С. 67.
4. Абдурахимов А. О. Линейно-квадратичная задача оптимального управления с неопределенностью в критерии качества // Редкол. журн. «Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех.» Мн., 1991. 37 с. Деп. в ВИНТИ 28.03.91. № 1369-В91.

Поступила в редакцию 15.11.91.

УДК 517.977

НГУЕН ДЫК ХИЕУ (ВЬЕТНАМ)

АДАПТИВНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ СЕПАРАБЕЛЬНЫХ ЗАДАЧ КУСОЧНО-ЛИНЕЙНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ

The problem of finding maximum of a linear function on nonconvex set of feasible solutions is considered. The estimate of suboptimality, criterion of lokal suboptimality and local optimality are proved.

I. Постановка задачи. Основные понятия.

Пусть $b \in \mathbb{R}^m$; $c, d^*, d^* \in \mathbb{R}^n$ — заданные векторы. Рассмотрим следующую задачу:

$$c'x = \sum_{j=1}^n c_j x_j \rightarrow \max, \quad (1)$$

$$\sum_{j=1}^n a_j(x_j) = b, \quad (2)$$

$$d^* \leq x \leq d^*, \quad (3)$$

где

$$a_j(s) = \begin{cases} a_j^+ s + a_{0j}^+, & \text{если } s \geq x_{0j}; \\ a_j^- s + a_{0j}^-, & \text{если } s < x_{0j}; \end{cases}$$

$a_j^+ x_{0j} + a_{0j}^- = a_j^- x_{0j} + a_{0j}^+$; $a_j^+, a_{0j}^+, a_j^-, a_{0j}^-$ — заданные m -векторы, $x_0 = \{x_{0j}, j \in J\} \in (d^*, d^*)$, $J = \{1, 2, \dots, n\}$.

Определение 1. Планом задачи (1)–(3) назовем любой вектор $x \in \mathbb{R}^n$, удовлетворяющий всем ее ограничениям.

Множество всех планов задачи (1)–(3) обозначим через X . В силу ограничений (2) множество X , вообще говоря, является невыпуклым и даже может состоять из многих непересекающихся множеств. Поэтому целесообразным является метод направленного перебора, который позволяет получить локально-оптимальный план задачи (1)–(3), т. е. такой план, на котором целевая функция достигает локального максимума.

Пусть $x \in X$ — некоторый план задачи (1)–(3). Определим для x следующие множества:

$$J^+ = J^+(x) = \{j \in J: x_j > x_{0j}\}, \quad J^- = J^-(x) = \\ = \{j \in J: x_j < x_{0j}\}, \quad J^0 = J^0(x) = \{j \in J: x_j = x_{0j}\}.$$

Пусть $J^{0+} \subset J^0(x)$, $J^{0-} = J^0(x) \setminus J^{0+}$. Обозначим

$$X(J^{0+}) = \{z \in \mathbb{R}^n: \sum_{j \in J^+ \cup J^{0+}} (a_j^+ z_j + a_{0j}^+) + \sum_{j \in J^- \cup J^{0-}} (a_j^- z_j + a_{0j}^-) = b,$$

$$x_{0j} \leq z_j \leq d_j^*, \quad j \in J^+ \cup J^{0+}; \quad d_j^* \leq z_j \leq x_{0j}, \quad j \in J^- \cup J^{0-}\}. \quad (4)$$

Ясно, что $X(J^{0+}) \subset X$ — выпуклые многогранники, причем $x \in X(J^{0+})$

для любого $J^{0+} \subseteq J^0(x)$. Пусть $\bar{x} \in X$ – вектор, достаточно близкий к x , такой, что выполняются неравенства $\bar{x}_j > x_{0j}$, $j \in J^+(x)$, $\bar{x}_j < x_{0j}$, $j \in J^-(x)$. Обозначим $\Delta x = \bar{x} - x$, $J^{0+} = \{j \in J^0(x): \Delta x_j \geq 0\}$, $J^{0-} = J^0(x) \setminus J^{0+} = \{j \in J^0(x): \Delta x_j < 0\}$. Тогда нетрудно видеть, что $x \in X(J^{0+})$. Согласно этим фактам, план x является локально-оптимальным тогда и только тогда, когда он является оптимальным планом для всех множеств $X(J^{0+})$, $J^{0+} \subseteq J^0(x)$. Для проверки локальной оптимальности плана x , вообще говоря, нужно проверить оптимальность плана x на всех множествах $X(J^{0+})$, $J^{0+} \subseteq J^0(x)$.

Пусть $J^* \subseteq J$. Будем говорить, что множество J^* обладает свойством полноты, если для любого $J^{0+} \subseteq J^0(x)$ найдется подмножество $J_B = J_B(J^{0+}) \subseteq J^*$, $|J_B| = m$, такое, что не вырождена матрица:

$$A_B = A(I, J_B) = \{a_j^+, j \in J_B^+; a_j^-, j \in J_B^-\}, \quad (5)$$

где $J_B^+ = J_B \cap (J^+ \cup J^{0+})$, $J_B^- = J_B \cap (J^- \cup J^{0-})$.

Определение 2. Полное множество J^* называется минимальным, если свойство полноты теряется после удаления из него любого индекса.

Определение 3. Полное множество $J^* \subseteq J$ назовем локальной опорой для задачи (1) – (3) в точке x и обозначим через $J_{оп}$.

Пусть $J^{0+} \subseteq J^0(x)$. Множество $J_B = J_B(J^{0+}) \subseteq J_{оп}$, для которого не вырождена матрица $A(I, J_B)$ из (5), называется субопорой в области $X(J^{0+})$, а сама матрица A_B – субопорной матрицей.

Определение 4. Пару $\{x, J_{оп}\}$ из плана x и локальной опоры $J_{оп}$ назовем опорным планом для задачи (1) – (3).

Пусть имеется некоторый опорный план $\{x, J_{оп}\}$, $J^{0+} \subseteq J^0(x)$, $J_B = J_B(J^{0+}) \subseteq J_{оп}$ – некоторая соответствующая опора. По опоре $A(I, J_B)$ вычислим вектор потенциалов и оценки

$$u' = c'(J_B) A_B^{-1}, \quad (6)$$

$$\Delta_j^+ = u' a_j^+ - c_j, \quad j \in J_n^+$$

$$\Delta_j^- = u' a_j^- - c_j, \quad j \in J_n^-, \quad (7)$$

где $J_n = J \setminus J_B$, $J_n^+ = J_n \cap (J^+ \cup J^{0+})$, $J_n^- = J_n \cap (J^- \cup J^{0-})$.

Вычислим число

$$\begin{aligned} \beta(J_B(J^{0+})) = & - \sum_{\Delta_j^+ < 0} \Delta_j^+ (d_j^* - x_j) - \sum_{\Delta_j^+ > 0} \Delta_j^+ (x_{0j} - x_j) - \\ & - \sum_{\Delta_j^- < 0} \Delta_j^- (x_{0j} - x_j) - \sum_{\Delta_j^- > 0} \Delta_j^- (d_j - x_j). \end{aligned} \quad (8)$$

II. Критерий локальной оптимальности.

Теорема 1. Для локальной оптимальности плана x необходимо и достаточно, чтобы существовала локальная опора $J_{оп}$ такая, что для любого $J^{0+} \subseteq J^0(x)$ найдется субопора $J_B = J_B(J^{0+}) \subseteq J_{оп}$, для которой выполняется равенство $\beta(J_B(J^{0+})) = 0$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Достаточность. Пусть \bar{x} – некоторый план из достаточно малой окрестности x , $\Delta x = \bar{x} - x$. Тогда для Δx выполняются следующие неравенства:

$$d_j^* - x_{0j} \leq \Delta x_j \leq d_j^* - x_{cj}, \quad j \in J^0(x),$$

$$d_j^* - x_j \leq \Delta x_j \leq x_{0j} - x_j, \quad j \in J^-(x), \quad (9)$$

$$x_{0j} - x_j \leq \Delta x_j \leq d_j^* - x_j, \quad j \in J^+(x)$$

и равенство

$$\sum_{j \in J^+} a_j^+ \Delta x_j + \sum_{j \in J^-} a_j^- \Delta x_j + \sum_{j \in J^0} a_j (\Delta x_j) = 0, \quad (10)$$

где

$$a_j(\Delta x_j) = \begin{cases} a_j^+ \Delta x_j, & \text{если } \Delta x_j \geq 0, \\ a_j^- \Delta x_j, & \text{если } \Delta x_j < 0, \quad j \in J^0. \end{cases}$$

Обозначим $J^{0+} = \{j \in J^0: \Delta x_j \geq 0\}$, $J^{0-} = J^0 \setminus J^{0+}$. По условию теоремы, для J^{0+} существует субопора $J_B \in J_{\text{оп}}$, для которой число $\beta(J_B(J^{0+}))$ из (8) равняется нулю. Из (10) и определения J^{0+} имеем:

$$\sum_{j \in J^{0+}} a_j^+ \Delta x_j + \sum_{j \in J^{0-}} a_j^- \Delta x_j = 0.$$

Отсюда следует, что

$$\Delta x(J_B) = -A_B^{-1} \left(\sum_{j \in J_H^+} a_j^+ \Delta x_j + \sum_{j \in J_H^-} a_j^- \Delta x_j \right).$$

Рассмотрим приращение целевой функции

$$\begin{aligned} c' \Delta x &= \sum_{j=1}^n c_j \Delta x_j, \\ &= -c'(J_B) A_B^{-1} \left(\sum_{j \in J_H^+} a_j^+ \Delta x_j + \sum_{j \in J_H^-} a_j^- \Delta x_j \right) + \sum_{j \in J_H} c_j \Delta x_j, \\ &= - \sum_{j \in J_H^+} \Delta_j^+ \Delta x_j - \sum_{j \in J_H^-} \Delta_j^- \Delta x_j, \\ &\leq - \sum_{\Delta_j^+ < 0} \Delta_j^+ (d_j^* - x_j) - \sum_{\Delta_j^+ > 0} \Delta_j^+ (x_{0j} - x_j) - \\ &\quad - \sum_{\Delta_j^- < 0} \Delta_j^- (x_{0j} - x_j) - \sum_{\Delta_j^- > 0} \Delta_j^- (d_{*j} - x_j) = \beta(J_B(J^{0+})). \end{aligned}$$

Отсюда получим $c' \Delta x \leq 0$, т. е. $c' \bar{x} \leq c' x$ для любого \bar{x} из достаточно малой окрестности x , а это означает, что x – локально-оптимальный план для задачи (1) – (3).

Необходимость. Пусть x^0 – локально-оптимальный план задачи (1) – (3), $J^{0+} \subseteq J^0(x^0)$ – некоторое подмножество индексов. Рассмотрим задачу линейного программирования

$$c'x \rightarrow \max, \quad x \in X(J^{0+}). \quad (11)$$

Ясно, что x^0 является оптимальным планом для задачи (11). Пусть $J_B = J_B(J^{0+}) \in J$ – оптимальная опора для (11). Как известно из [1], вычисленные по опоре J_B оценки $\Delta(J_B) = \{\Delta_j^+, j \in J_H^+; \Delta_j^-, j \in J_H^-\}$ из (7) удовлетворяют равенству

$$\begin{aligned} &- \sum_{\Delta_j^+ < 0} \Delta_j^+ (d_j^* - x_j^0) - \sum_{\Delta_j^+ > 0} \Delta_j^+ (x_{0j} - x_j^0) - \\ &- \sum_{\Delta_j^- < 0} \Delta_j^- (x_{0j} - x_j^0) - \sum_{\Delta_j^- > 0} \Delta_j^- (d_{*j} - x_j^0) = \beta(J_B(J^{0+})) = 0. \end{aligned}$$

Обозначим $J_{\text{оп}} = \bigcup_{J^{0+} \subseteq J^0} J_B(J^{0+})$. Нетрудно проверить, что $J_{\text{оп}}$ есть искомая локальная опора для локально-оптимального плана x^0 . Теорема доказана.

Из теоремы 1 следует, что x^0 является локально-оптимальным планом задачи (1) – (3) тогда и только тогда, когда он является оптимальным планом для задачи (11) при любом $J^{0+} \subseteq J^0(x^0)$. Естественно считать x^0 локально- ϵ -оптимальным планом задачи (1) – (3), если он является ϵ -оптимальным для задачи (11) при любом $J^{0+} \subseteq J^0(x^0)$.

Справедлива

Теорема 2. (Критерий локальной ϵ -оптимальности).

План x^0 является локально- ϵ -оптимальным тогда и только тогда,

когда существует локальная опора $J_{оп}$ такая, что для любого $J^{0+} \in J^0(x^0)$ можно выделить субопору $J_B = J_B(J^{0+}) \in J_{оп}$ такую, что $\{x^0, J_B\}$ является ϵ -оптимальным опорным планом для задачи (11).

Доказательство теоремы 2 аналогично доказательству теоремы 1.

Теоремы 1, 2 дают необходимые и достаточные условия локальной оптимальности и локальной ϵ -оптимальности плана x . На первый взгляд, для проверки этих условий надо провести очень много вычислений, связанных с обращениями субопорных матриц и вычислениями оценок Δ_j , $j \in J_n$. На самом деле, количество вычислений может оказаться намного меньше. Во-первых, субопоры можно подобрать так, чтобы они отличались друг от друга одним столбцом. Тогда для обращения следующей субопорной матрицы можно использовать специальную процедуру, которая требует намного меньше вычислений. Во-вторых, некоторая субопора может служить опорой сразу для многих областей $X(J^{0+})$.

Действительно, пусть $J_B = J_B(J^{0+})$ – некоторая субопора в области $X(J^{0+})$. Положим $J_B^0 = J_B \cap J^0$, $J_n^0 = J^0 \setminus J_B^0$, $J_B^{0+} = J_B \cap J^{0+}$. Построим множество $S^{0+} = \{ \bar{J}^{0+} = J_B^{0+} \cup \bar{J}^{0+}, \bar{J}^{0+} \subseteq J_n^0 \}$.

Нетрудно проверить, что J_B является субопорой во всех $X(\bar{J}^{0+})$, $\bar{J}^{0+} \in S^{0+}$, а количество элементов S^{0+} , как известно, будет $2^{|J_n^0|}$.

Кроме того, количество вычислений может сократиться в связи с тем, что сама субопора может оказаться оптимальной для нескольких множеств $X(\bar{J}^{0+})$, $\bar{J}^{0+} \in S^{0+}$.

В отдельных случаях с помощью одной субопоры можно определить локальную оптимальность или локальную ϵ -оптимальность плана x .

Пусть $J_B = J_B(J^{0+})$ – некоторая субопора в области $X(J^{0+})$. По субопорной матрице A_B вычислим вектор потенциалов и оценки

$$\begin{aligned} u^* &= c^*(J_B)A_B^{-1}, \\ \Delta_j^+ &= u^*a_j^+ - c_j, \quad j \in J_n^+ \cup J^0, \\ \Delta_j^- &= u^*a_j^- - c_j, \quad j \in J_n^- \cup J^0. \end{aligned} \quad (12)$$

Теорема 3. Для локальной оптимальности опорного плана $\{x^0, J_{оп}\}$ достаточно, чтобы существовала субопора $J_B = J_B(J^{0+})$ для некоторого J^{0+} такая, что вычисляемые по ней оценки (12) удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\Delta_j^+ \leq 0 \text{ при } x_j^0 = d_j^*, \quad \Delta_j^+ = 0 \text{ при } x_j^0 < d_j^*, \quad j \in J_n^+ \setminus J^0(x^0), \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \Delta_j^- \geq 0 \text{ при } x_j^0 = d_{*j}, \quad \Delta_j^- = 0 \text{ при } x_j^0 > d_{*j}, \quad j \in J_n^- \setminus J^0(x^0). \\ \Delta_j^+ \geq 0, \quad \Delta_j^- \geq 0 \text{ при } j \in J^0(x^0). \end{aligned} \quad (14)$$

Доказательство. Пусть $\bar{J}^{0+} \in J^0(x^0)$ – произвольное подмножество индексов. Нам надо доказать, что x^0 является оптимальным планом для $X(\bar{J}^{0+})$. Рассмотрим расширенную задачу

$$\begin{aligned} f(x, y) &= \sum_{j=1}^n c_j x_j + \sum_{j \in J^0(x^0)} c_j y_j \rightarrow \max, \\ \sum_{j \in J^+ \cup J^0} (a_j^+ x_j + a_{0j}^+) + \sum_{j \in J^- \cup J^0} (a_j^- x_j + a_{0j}^-) + \sum_{j \in J^0} a_j^+ y_j + \sum_{j \in J^0} a_j^- y_j &= b, \\ x_{0j} \leq x_j \leq d_j^*, \quad j \in J^+ \cup J^0; \quad d_{*j} \leq x_j \leq x_{0j}, \quad j \in J^- \cup J^0, \\ 0 \leq y_j \leq d_j^* - x_{0j}, \quad j \in \bar{J}^{0+}; \quad d_{*j} - x_{0j} \leq y_j \leq 0, \quad j \in \bar{J}^{0-}. \end{aligned} \quad (15)$$

Для задачи (15) рассмотрим опорный план $\{(x^0, 0(J^0)), J_B\}$. Как известно из [1], в силу соотношений (13)–(14), $(x^0, 0(J^0))$ является оптимальным планом для задачи (15). Оптимальное значение целевой функции будет $f(x^0, 0) = c^*x^0$.

Возьмем произвольный вектор $\bar{x} \in X(\bar{J}^{0+})$, построим вектор (\bar{x}, \bar{y}) следующим образом:

$$\begin{aligned}\bar{x}_j &= x_{0j}, \quad j \in J^0(x^0); \quad \bar{x}_j = \bar{x}_j, \quad j \in J^+(x^0) \cup J^-(x^0), \\ \bar{y}_j &= \bar{x}_j - x_{0j}, \quad j \in J^0(x^0).\end{aligned}$$

Докажем, что (\bar{x}, \bar{y}) будет планом для задачи (15). Действительно, для (\bar{x}, \bar{y}) выполняются все прямые ограничения.

Остается доказать, что для него выполняются и основные ограничения. Так как $\bar{x} \in X(J^{0+})$, то имеем

$$\sum_{j=1}^n a_j(\bar{x}_j) = \sum_{j \in J^+ \cup J^{0+}} (a_j^+ \bar{x}_j + a_{0j}^+) + \sum_{j \in J^- \cup J^{0-}} (a_j^- \bar{x}_j + a_{0j}^-) = b. \quad (16)$$

Рассмотрим вектор

$$\begin{aligned}s &= \sum_{j \in J^{0+}} (a_j^+ \bar{x}_j + a_{0j}^+) + \sum_{j \in J^{0-}} (a_j^- \bar{x}_j + a_{0j}^-), \\ &= \sum_{j \in J^{0+}} (a_j^+ (x_{0j} + \bar{y}_j) + a_{0j}^+) + \sum_{j \in J^{0-}} (a_j^- (x_{0j} + \bar{y}_j) + a_{0j}^-), \\ &= \sum_{j \in J^{0+}} a_j^+ \bar{y}_j + \sum_{j \in J^{0-}} a_j^- \bar{y}_j + \sum_{j \in J^{0+}} (a_j^+ x_{0j} + a_{0j}^+) + \sum_{j \in J^{0-}} (a_j^- x_{0j} + a_{0j}^-).\end{aligned}$$

Но поскольку $a_j^+ x_{0j} + a_{0j}^+ = a_j^- x_{0j} + a_{0j}^-$ для любого $j \in J$, то из последнего равенства получим:

$$s = \sum_{j \in J^{0+}} a_j^+ \bar{y}_j + \sum_{j \in J^{0-}} a_j^- \bar{y}_j + \sum_{j \in J^{0+}} (a_j^+ x_{0j} + a_{0j}^+) + \sum_{j \in J^{0-}} (a_j^- x_{0j} + a_{0j}^-).$$

Поставив полученное равенство в (16), получим:

$$\sum_{j \in J^+ \cup J^{0+}} (a_j^+ \bar{x}_j + a_{0j}^+) + \sum_{j \in J^- \cup J^{0-}} (a_j^- \bar{x}_j + a_{0j}^-) + \sum_{j \in J^{0+}} a_j^+ \bar{y}_j + \sum_{j \in J^{0-}} a_j^- \bar{y}_j = b.$$

Итак, показали, что (\bar{x}, \bar{y}) является планом для задачи (15). Вычислим значения $f(\bar{x}, \bar{y})$

$$f(\bar{x}, \bar{y}) = c' \bar{x} + c'(J^0) \bar{y} = c' \bar{x} \leq f(x^0, 0) = c' x^0,$$

т. е. $c' \bar{x} \leq c' x^0$ для любого $\bar{x} \in X(J^{0+})$, что означает, что x^0 — оптимальный план для $X(J^{0+})$.

Список литературы

1. Габасов Р., Кириллова Ф. М. Методы линейного программирования. Ч. 1. Общие задачи. Мн., 1977.

Поступила в редакцию 23.12.91.

УДК 517.925.7

В. И. ГРОМАК, Ж. А. ЛУЦЕВИЧ

НЕЛИНЕЙНОЕ УРАВНЕНИЕ, СВЯЗАННОЕ С УРАВНЕНИЕМ SINE-GORDON, И ТРЕТЬЕ УРАВНЕНИЕ ПЕНЛЕВЕ

By virtue of the reduction of the special one- and two-dimension partial differential equations to the third Painleve equation, their Backlund transformations and exact solutions are constructed.

А. В этой работе изучим некоторые свойства решений уравнения

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} = a e^u + b e^{-u} + xt (c e^{2u} + d e^{-2u}), \quad (1)$$

где a, b, c, d — параметры в связи с установленной связью между решениями уравнения (1) и третьим уравнением Пенлеве.

Если в уравнении (1) $a = b = c = d = 0$, то уравнение (1) вырождается в волновое уравнение $u_{xt} = 0$ с общим решением $u(x, t) = f(x) + g(t)$ с произвольными функциями $f(x)$ и $g(t)$.

Если же в уравнении (1): 1. $b = c = d = 0$, $a \neq 0$ или $a = c = d = 0$, $b \neq 0$, то уравнение (1) является уравнением Лиувилля $u_{xt} = \exp(\eta u)$ с общим решением

$$u(x, t) = f(x) - g(t) - \frac{2}{\eta} \ln \left\{ \rho \int_{x_0}^x \exp(\eta f(y)) dy + \frac{\eta}{2\rho t_0} \int \exp(-\eta g(s)) ds \right\}, \quad (2)$$

где $f(x), g(t)$ – произвольные функции, ρ – произвольный параметр. Пусть в уравнении (1): 2. $c = d = 0$, $ab \neq 0$. Тогда линейной заменой оно приводится к уравнению Sine-Gordon (SG) $u_{xt} = \sin u$. Если в уравнении (1): 3. $a = b = 0$, $cd \neq 0$, то заменой

$$u_1 = 2u, \quad x_1 = \frac{x^2}{\sqrt{2}}, \quad t_1 = \frac{t^2}{\sqrt{2}}$$

оно приводится к случаю 2 уравнения (1) и, следовательно, к (SG).

Уравнение (SG) появляется во многих приложениях от дифференциальной геометрии до нелинейной оптики, где солитонами уравнения (SG) объясняется явление самоиндуцированной прозрачности. Также оно интенсивно исследовалось как модель релятивистской теории поля (как классической, так и квантовой) [1].

Таким образом, для уравнения (1) остается рассмотреть следующие случаи: 4. $cd \neq 0$, ($ab \neq 0$ или $a = 0$, $b \neq 0$ или $a \neq 0$, $b = 0$); 5. $c = 0$, $d \neq 0$; 6. $c \neq 0$, $d = 0$. При этом случай 6 линейной заменой u сводится к случаю 5. Ниже будем рассматривать случаи 4 и 5 уравнения (1) и покажем, что здесь уравнение (1), как и уравнение (SG) [2, 3], имеет класс решений, определяемый решениями третьего уравнения Пенлеве.

Теорема 1. Пусть $z = xt$, $u = u(z)$ – решение уравнения (1). Тогда функция $w = \exp(u)$ будет решением третьего уравнения Пенлеве

$$w'' = \frac{w'^2}{w} - \frac{w'}{z} + \frac{a}{z} w^2 + \frac{b}{z} + cw^3 + \frac{d}{w}.$$

И наоборот, если $w = w(z)$ – произвольное решение уравнения (P3), то функция $u = \ln w(z)$, $z = xt$, будет решением уравнения (1).

Заметим, что если в уравнении (P3) $c = 0$, $d \neq 0$ и $a = 0$, то оно интегрируется в элементарных функциях, и, следовательно, соответствующие решения уравнения (1) также будут элементарными функциями.

Пусть в уравнении (1) $c = 0$, $ad \neq 0$. Без ограничения общности в этом случае можно считать $a = -d = 1$, т. е. уравнение (1) примет вид:

$$u_{xt} = e^u + be^{-u} - xte^{-2u}, \quad (3)$$

а уравнение (P3):

$$w'' = \frac{w'^2}{w} - \frac{w'}{z} + \frac{w^2}{z} + \frac{b}{z} - \frac{1}{w}. \quad (4)$$

Уравнение (4) исследовано в работе [4], где построено преобразование Бэклунда уравнения (4), а также алгебраические решения уравнения (4), которые с точностью до инверсии функции w исчерпывают все алгебраические решения уравнения (P3).

Теорема 2. Пусть $w = w(z, b)$ – решение уравнения (4) при фиксированном значении параметра b . Тогда функция

$$w(z, b_1) = \frac{(c - b)w + z - czw'}{w^2}, \quad \epsilon^2 = 1, \quad (5)$$

будет решением уравнения (4) при $b_1 = b - 2\epsilon$.

Таким образом, в силу теорем 1 и 2, для уравнения (3) справедлива **Теорема 3.** Пусть $u = u(z, b)$, $z = xt$, – решение уравнения (3) при фиксированном значении параметра b . Тогда функция

$$u_1(z, b_1) = \ln[(\epsilon - b)e^u + z - \epsilon zu'e^u] - 2u, \quad z = xt, \quad \epsilon^2 = 1, \quad (6)$$

будет решением уравнения (4) при значении параметра $b_1 = b - 2\epsilon$.

Пример. Решение $w = z^{1/3}$ при $b = 0$ уравнения (4) порождает решение $u = \ln(xt)^{1/3}$ при $b = 0$ уравнения (3). Исходя из этого решения в силу (6) имеем, например, решение уравнения (3):

$$u_1 = \ln(3(xt)^{2/3} + 2) - \ln(xt)^{1/3} - \ln 3, \quad b = \pm 2. \quad (7)$$

Заметим, что в [4] показано, что уравнение (4) при $b = 2n$, $n \in \mathbb{Z}$ имеет алгебраические решения, являющиеся рациональными по $z^{1/3}$ функциями, которые в силу теоремы 1 порождают решения уравнения (3) вида:

$$u = \ln \frac{P((xt)^{1/3})}{Q((xt)^{1/3})}, \quad (8)$$

где P и Q – полиномы своих аргументов при $b = 2n$, $n \in \mathbb{Z}$.

Пусть в уравнении (1) $cd \neq 0$ (случай 4). В этом случае уравнение (1) линейной заменой u , x , t может быть приведено к уравнению

$$u_{xt} = ae^u + be^{-u} + xt(e^{2u} - e^{-2u}). \quad (9)$$

Уравнение (9) в частном случае $a = -b = \nu$ линейной заменой приводится к виду:

$$u_{xt} = \nu \sin u + xt \sin 2u. \quad (10)$$

Связь между решениями уравнений (10) и (P_3) установлена в [2]. Также там построено бэклунд-преобразование для автомодельных решений ($z = xt$) уравнения (10). Асимптотические свойства этих решений изучались в [5].

Рассмотрим общий случай уравнения (9). При этом, согласно теореме 1, уравнение (P_3) имеет вид:

$$w'' = \frac{w'^2}{w} - \frac{w'}{z} + \frac{a}{z}w^2 + \frac{b}{z} + w^3 - \frac{1}{w}, \quad (11)$$

для которого справедлива [6]

Теорема 4. Пусть $w(z, a, b)$ – решение уравнения (11) такое, что

$$R(z) \equiv w' - \epsilon_1 w^2 - (\epsilon_1 a - 1)wz^{-1} + 1, \quad R(R-2) \neq 0. \quad (12)$$

Тогда функция

$$w_1(z) = \frac{2zR(R-2)}{2z \frac{dR}{dz} + (\epsilon_3 A - \epsilon_2 B)R - 2\epsilon_3 A}, \quad (13)$$

где $A = \epsilon_1 a + b - 2$, $B = b - \epsilon_1 a + 2$, будет решением уравнения (11) при

$$a_1 = \frac{\epsilon_1}{2}(\epsilon_2 B - \epsilon_3 A + 4), \quad b_1 = \frac{\epsilon_2}{2}B + \frac{\epsilon_3}{2}A, \quad \epsilon_j^2 = 1, \quad j = \overline{1, 3}. \quad (14)$$

Таким образом, в силу теорем 1 и 4 справедливо следующее утверждение.

Теорема 5. Пусть $u = u(z, a, b)$, $z = xt$, – решение уравнения (9) при фиксированных значениях параметров a и b такое, что

$$\Phi(z) \equiv e^u \{u' - \epsilon_1 e^u - (\epsilon_1 a - 1)z^{-1} + e^{-u}\}, \quad \Phi(\Phi-2) \neq 0. \quad (15)$$

Тогда функция

$$u_1 = \ln \frac{2z\Phi(\Phi-2)}{2z \frac{d\Phi}{dz} + (\epsilon_3 A - \epsilon_2 B)\Phi - 2\epsilon_3 A} \quad (16)$$

будет решением уравнения (9) при значениях параметров (14).

Пример. Уравнение (9) имеет тривиальное решение $u = 0$ при $a = -b$. Согласно (15), (16), имеем, например, решение

$$u_1 = \ln \frac{2xt + a - 1}{2xt + a + 1}$$

уравнения (9) при $a_1 = a + 2$, $b_1 = 2 - a$.

В. В этой части рассмотрим двумерное дифференциальное уравнение в частных производных

$$u_{tt} - u_{xx} - u_{yy} + \bar{a}e^u + \bar{b}e^{-u} + \bar{f}(t, x, y) (\bar{c}e^{2u} + \bar{d}e^{-2u}) = 0, \quad (17)$$

где \bar{a} , \bar{b} , \bar{c} , \bar{d} – постоянные параметры. $\bar{f}(t, x, y) \neq 0$ – некоторая специальная функция.

Если $\bar{a} = \bar{b} = \bar{c} = \bar{d} = 0$, то уравнение (17) суть волновое уравнение. Если в уравнении (17) либо $\bar{a}\bar{b} \neq 0$, $\bar{c} = \bar{d} = 0$, либо $\bar{c}\bar{d} \neq 0$, $\bar{a} = \bar{b} = 0$, то линейной заменой u , t , x , y оно приводится к двумерному уравнению Sine-Gordon $u_{tt} - u_{xx} - u_{yy} = \sin u$, которое интегрируется методом обратной задачи рассеяния (МОЗР).

Таким образом, для уравнения (17) остается изучить случаи 1. $\bar{c}\bar{d} \neq 0$ ($\bar{a}\bar{b} \neq 0$ или $\bar{a} = 0$, $\bar{b} \neq 0$ или $\bar{a} \neq 0$, $\bar{b} = 0$); 2. $\bar{c} = 0$, $\bar{d} \neq 0$; 3. $\bar{c} \neq 0$, $\bar{d} = 0$. Очевидно, случай 3 линейной заменой u сводится к случаю 2. Далее будем рассматривать уравнение (17) в случаях 1 и 2 и покажем, что в этих случаях уравнение (17) имеет класс решений, порождаемых решениями уравнения (P₃).

1. Пусть $\bar{c}\bar{d} \neq 0$. Тогда, не ограничивая общности рассмотрения, в уравнении (17) фиксируем параметры \bar{c} и \bar{d} , сделав замену

$$u \rightarrow -iu + \frac{1}{4} \ln \frac{\bar{d}}{\bar{c}}$$

и вместо уравнения (17) будем рассматривать уравнение с двумя параметрами

$$u_{tt} - u_{xx} - u_{yy} + ae^{-iu} + be^{iu} + f(t, x, y) \sin 2u = 0, \quad (18)$$

где a , b – параметры, $f(t, x, y)$ – некоторая функция

$$(a = i\bar{a}(\bar{d}/\bar{c})^{1/4}, \quad b = i\bar{b}(\bar{c}/\bar{d})^{1/4}, \quad f = 2\bar{f}(\bar{c}\bar{d})^{1/2}).$$

В работе [3] уравнение (18) изучалось в случае $a + b = 0$, т. е.

$$u_{tt} - u_{xx} - u_{yy} + \nu \sin u + f(t, x, y) \sin 2u = 0. \quad (19)$$

В этой работе была установлена связь уравнения (19) с третьим уравнением Пенлеве в виде:

$$w'' = \frac{w'^2}{w} - \frac{w'}{z} - \frac{\nu}{8z} (w^2 - 1) - \frac{\mu}{8} (w^3 - \frac{1}{w}),$$

а также построены преобразования Бэклунда и точные решения уравнения (19).

Как и в [3], укажем вид функции $f(t, x, y)$, при котором уравнение (18) имеет автомодельные решения, порождаемые решениями третьего уравнения Пенлеве.

Пусть

$$z = \varphi(t, x, y), \quad f(t, x, y) = F(z) \quad (20)$$

такая замена, что уравнение (18) примет вид:

$$zu'' + u' + ae^{-iu} + be^{iu} + 2F(z) \sin 2u = 0. \quad (21)$$

Будем искать $\varphi = \varphi(t, x, y)$ в виде полинома

$$\varphi = \alpha t^2 + \beta x^2 + \gamma y^2. \quad (22)$$

Тогда тройка (α, β, γ) принимает значение

$$\text{либо } (1/4, -1/4, 0), \text{ либо } (1/4, 0, -1/4),$$

$$\text{либо } (0, -1/4, -1/4). \quad (23)$$

Далее в уравнении (21) положим $u(z) = i \ln w$, $F(z) = -z$. Тогда для определения функции $w(z)$ будем иметь третье уравнение Пенлеве в виде:

$$w'' = \frac{w'^2}{w} - \frac{w'}{z} + \frac{i}{z} (aw^2 + b) + w^3 - \frac{1}{w}. \quad (24)$$

Теорема 6. Пусть $u = u(z, a, b)$, $z = \alpha t^2 + \beta x^2 + \gamma y^2$ – произвольное решение уравнения (18) при фиксированных значениях параметров a и b , $f(t, x, y) = -z$, (α, β, γ) из (23). Тогда функция $w = \exp(-iu)$ будет решением уравнения (24). Обратно, если $w = w(z, a, b)$ – решение уравнения (24) при фиксированных параметрах a и b , то функция $u(z) = \text{iln}w(z)$ будет решением уравнения (18) при тех же значениях параметров a и b , $f(t, x, y) = -z$.

Для решения уравнения (18) в силу теоремы 4 и 6 построим преобразование Бэклунда.

Теорема 7. Пусть $u = u(z, a, b)$, $z = \alpha t^2 + \beta x^2 + \gamma y^2$ – решение уравнения (18) при $f(t, x, y) = -z$, (α, β, γ) из (23), такое, что

$$\Phi \equiv -e^{-iu} \{ iu'' + (i\epsilon_1 a - 1)z^{-1} + \epsilon_1 e^{-iu} - e^{iu} \}, \quad \Phi(\Phi - 2) \neq 0. \quad (25)$$

Тогда функция

$$u_1 = \text{iln} \frac{2z\Phi(\Phi - 2)}{2z \frac{d\Phi}{dz} + (\epsilon_3 A - \epsilon_2 A)\Phi - 2\epsilon_3 A}, \quad (26)$$

где $A \equiv i(b - \epsilon_1 a) + 2$, $B \equiv i(b + \epsilon_1 a) - 2$, будет решением уравнения (18) при значениях параметров

$$a_1 = i\epsilon_1 (\epsilon_3 A - \epsilon_2 B - 4) / 2, \quad (27)$$

$$b_1 = -i\epsilon_2 B / 2 - i\epsilon_3 A / 2, \quad \epsilon_j^2 = 1, \quad j = \overline{1, 3}.$$

Пример. Уравнение (24) при $a = b$ имеет решение $w = i$. Тогда в силу теоремы 6 решением уравнения (18) будет $u(z, a) = \text{iln}i$, $z = \alpha t^2 + \beta x^2 + \gamma y^2$, где тройка α, β, γ определяется, согласно (23), при тех же значениях параметров. После применения первого шага рекуррентного соотношения (26) и (27) к решению $u = \text{iln}i$ получим, например, решение уравнения (18):

$$u = \text{iln} \frac{2z + a - i}{2iz + ia + 3}$$

при значениях параметров $a_1 = 4i - a$, $b_1 = -a$.

Случай 2 исследуется аналогично случаю 1.

Список литературы

1. Захаров В. Е., Мананков С. В., Новиков С. П. Теория солитонов: Метод обратной задачи/Под ред. С. П. Новикова. М., 1980.
2. Громмак В. И.//Дифференц. уравнения. 1982. Т. 18. № 11. С. 1984.
3. Он же е//Докл. АН БССР. 1983. Т. 27. № 10. С. 872.
4. Он же е//Дифференц. уравнения. 1973. Т. 9. С. 2082, 2083.
5. Абдуллаев А. С. Асимптотика решений нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка: Автореф. дис. ...канд. физ.-мат. наук. Ташкент, 1984.
6. Громмак В. И.//Дифференц. уравнения. 1975. Т. 11. № 2. С. 373.

Поступила в редакцию 20.01.92.

УДК 517.925.6

В. И. МАТАТОВ, Л. В. САБИНИЧ

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОДВИЖНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ НЕАВТОНОМНЫХ СИСТЕМ ГАМИЛЬТОНА С КУБИЧЕСКИМИ НЕЛИНЕЙНОСТЯМИ.

Necessary and sufficient conditions of the uniqueness movable singular points for the non-autonomy Hamilton's systems with the cubic nonlinearities were found.

Пусть дана система дифференциальных уравнений Гамильтона

$$\begin{cases} \frac{d\bar{x}}{dz} = \bar{\alpha}_0 + \bar{\alpha}_1\bar{x} + \bar{\alpha}_2\bar{y} + \bar{\alpha}_3\bar{x}^2 + \bar{\alpha}_4\bar{x}\bar{y} + \bar{\alpha}_5\bar{y}^2 + \bar{\alpha}_6\bar{x}^3 + \bar{\alpha}_7\bar{x}^2\bar{y} + \\ \quad + \bar{\alpha}_8\bar{x}\bar{y}^2 + \bar{\alpha}_9\bar{y}^3 = \bar{P}_3(z, \bar{x}, \bar{y}), \\ \frac{d\bar{y}}{dz} = \bar{\beta}_0 + \bar{\beta}_1\bar{x} - \bar{\alpha}_1\bar{y} + \bar{\beta}_3\bar{x}^2 - 2\bar{\alpha}_3\bar{x}\bar{y} - \frac{1}{2}\bar{\alpha}_4\bar{y}^2 + \bar{\beta}_6\bar{x}^3 - \\ \quad - 3\bar{\alpha}_6\bar{x}^2\bar{y} - \bar{\alpha}_7\bar{x}\bar{y}^2 - \frac{1}{3}\bar{\alpha}_8\bar{y}^3 = \bar{Q}_3(z, \bar{x}, \bar{y}), \end{cases} \quad (1)$$

где $\bar{\alpha}_0 = \bar{\alpha}_0(z), \dots, \bar{\alpha}_9 = \bar{\alpha}_9(z), \bar{\beta}_0 = \bar{\beta}_0(z), \dots, \bar{\beta}_6 = \bar{\beta}_6(z)$ – голоморфные функции z в некоторой области $D \in \mathbb{C}$, причем $(\bar{P}_3, \bar{Q}_3) = 1$.

В работе решается задача: найти условия, которым должна удовлетворять данная система, чтобы обе компоненты решения $(\bar{x}(z), \bar{y}(z))$ имели в D только однозначные подвижные особенности, т. е. система (1) была P -типа.

Введем в (1) параметр λ следующим образом [1]:

$$x = \frac{\xi}{\lambda}, \quad y = \frac{\eta}{\lambda}, \quad z = z_0 + \lambda^2 t,$$

где $z_0 \in D$. В полученной системе положим $\lambda = 0$, что даст систему вида:

$$\begin{cases} \frac{d\xi}{dt} = \bar{\alpha}_6(z_0)\xi^3 + \bar{\alpha}_7(z_0)\xi^2\eta + \bar{\alpha}_8(z_0)\xi\eta^2 + \bar{\alpha}_9(z_0)\eta^3, \\ \frac{d\eta}{dt} = \bar{\beta}_6(z_0)\xi^3 - 3\bar{\alpha}_6(z_0)\xi^2\eta - \bar{\alpha}_7(z_0)\xi\eta^2 - \\ \quad - \frac{1}{3}\bar{\alpha}_8(z_0)\eta^3. \end{cases} \quad (2)$$

Таким образом, имеем автономную систему Гамильтона с гамильтонианом

$$\begin{aligned} H(\xi, \eta) = & -\frac{1}{4}\bar{\beta}_6(z_0)\xi^4 + \bar{\alpha}_6(z_0)\xi^3\eta + \frac{1}{2}\bar{\alpha}_7(z_0)\xi^2\eta^2 + \\ & + \frac{1}{3}\bar{\alpha}_8(z_0)\xi\eta^3 + \frac{1}{4}\bar{\alpha}_9(z_0)\eta^4. \end{aligned}$$

В соответствии с известной методикой [2] с помощью первого интеграла $H(\xi, \eta) - C_0 = 0$ из системы (2) исключаем одну из функций, затем – другую. К полученным дифференциальным уравнениям первого порядка применяем теорему Фукса [1, 3]. В результате необходимые и достаточные условия однозначности подвижных особых точек системы (2) таковы:

$$9\bar{\alpha}_7\bar{\alpha}_8\bar{\alpha}_9 \equiv 2\bar{\alpha}_8^3 + 27\bar{\alpha}_6\bar{\alpha}_9^2, \quad \bar{\beta}_6\bar{\alpha}_8^2 \equiv -9\bar{\alpha}_6^2\bar{\alpha}_9. \quad (3)$$

Для системы (1) выписанные условия являются лишь необходимыми условиями однозначности подвижных особенностей.

С помощью аффинного преобразования $\bar{x}(z) = x(z) + \mu(z)y(z)$, $\bar{y}(z) = y(z)$ приведем систему (1) к виду, когда в ее первом уравнении коэффициент при y^3 равен нулю. В результате получим систему

$$\begin{cases} \frac{dx}{dz} = \alpha_0 + \alpha_1x + \alpha_2y + \alpha_3x^2 + \alpha_4xy + \alpha_5y^2 + \\ \quad + \alpha_6x^3 + \alpha_7x^2y + \alpha_8xy^2 \\ \frac{dy}{dz} = \beta_0 + \beta_1x - \alpha_1y + \beta_3x^2 - 2\alpha_3xy - \frac{1}{2}\alpha_4y^2 + \\ \quad + \beta_6x^3 - 3\alpha_6x^2y - \alpha_7xy^2 - \frac{1}{3}\alpha_8y^3, \end{cases} \quad (4)$$

где $\alpha_0(z), \dots, \beta_6(z)$ определенным образом выражаются через $\bar{\alpha}_0(z), \dots, \bar{\beta}_6(z)$ и $\mu(z)$.

Функция $\mu(z)$ выбрана так, что она является решением уравнения

$$-\bar{\beta}_6\mu^4 + 4\bar{\alpha}_6\mu^3 + 2\bar{\alpha}_7\mu^2 + \frac{4}{3}\bar{\alpha}_8\mu + \bar{\alpha}_9 = 0.$$

С учетом условий (3) это уравнение запишется следующим образом:

$$(9\bar{\alpha}_6\bar{\alpha}_9\mu^2 + 2\bar{\alpha}_8^2\mu + 3\bar{\alpha}_9\bar{\alpha}_8)^2 = 0. \quad (5)$$

Тогда для системы (4) в соответствии с (3), (5) и тем, что $\beta_6 = \bar{\beta}_6$, $\alpha_6 = -\beta_6\mu + \bar{\alpha}_6$, выполняется тождество

$$\beta_6(z)\alpha_7(z) \equiv -2\alpha_6^2(z). \quad (6)$$

Введем в (4) параметр λ [1]:

$$x = \xi, \quad y = \frac{\eta}{\lambda}, \quad z = z_0 + \lambda^2 t, \quad \text{где } z_0 \in D.$$

Положив в новой системе $\lambda = 0$, будем иметь упрощенную систему

$$\begin{cases} \frac{d\xi}{dt} = \alpha_5(z_0)\eta^2 + \alpha_8(z_0)\xi\eta^2, \\ \frac{d\eta}{dt} = -\frac{1}{3}\alpha_8(z_0)\eta^3. \end{cases} \quad (7)$$

Интегрируя второе уравнение (7), получаем:

$$\eta(t) = \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{3}\alpha_8(z_0)t + C}},$$

т. е. при $\alpha_8(z_0) \neq 0$ очевидно наличие у системы (7), а значит, и у (4) подвижных критических особых точек.

Итак, если (4) – система Р-типа, то необходимо $\alpha_8(z) = 0$.

Пусть теперь

$$x = \frac{\xi}{\lambda}, \quad y = \frac{\eta}{\lambda^2}, \quad z = z_0 + \lambda^3 t, \quad z_0 \in D.$$

Новая система при $\lambda = 0$ примет вид:

$$\begin{cases} \frac{d\xi}{dt} = \alpha_5(z_0)\eta^2 + \alpha_7(z_0)\xi^2\eta, \\ \frac{d\eta}{dt} = -\alpha_7(z_0)\xi\eta^2. \end{cases}$$

Используя первый интеграл $H(\xi, \eta) - C_0 = 0$ и второе уравнение этой системы, исключаем функцию $\xi(t)$, что дает уравнение относительно функции $\eta(t)$:

$$\eta^2 + \frac{2}{3}\alpha_5(z_0)\alpha_7(z_0)\eta^5 - 2C_0\alpha_7(z_0)\eta^2 = 0.$$

В соответствии с теоремой Фукса [1, 3], для того чтобы решения этого уравнения имели только однозначные подвижные особенности, необходимо и достаточно, чтобы $\alpha_5(z_0)\alpha_7(z_0) = 0$.

Итак, чтобы система (4) (при $\alpha_8(z) \equiv 0$) являлась системой Р-типа, необходимо: либо 1) $\alpha_5(z) \equiv 0$, либо 2) $\alpha_7(z) \equiv 0$.

В случае 1) исследованию на предмет отсутствия многозначных особых точек подвергается система

$$\begin{cases} \frac{dx}{dz} = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 y + \alpha_3 x^2 + \alpha_4 xy + \\ \quad + \alpha_6 x^3 + \alpha_7 x^2 y, \\ \frac{dy}{dz} = \beta_0 + \beta_1 x - \alpha_1 y + \beta_3 x^2 - 2\alpha_3 xy - \frac{1}{2}\alpha_4 y^2 - \\ \quad - \frac{2\alpha_6^2}{\alpha_7} x^3 - 3\alpha_6 x^2 y - \alpha_7 xy^2, \end{cases} \quad (8)$$

$\alpha_7(z) \neq 0$.

Из первого уравнения (8) функция $y(z)$ выражается рационально через $x(z)$ и $x'(z)$:

$$y(z) = \frac{x^3 - \alpha_6 x^3 - \alpha_3 x^2 - \alpha_1 x - \alpha_0}{\alpha_7 x^2 + \alpha_4 x + \alpha_2}.$$

Дифференцируя его и подставляя выражения для $y'(z)$ и $y(z)$, получаем уравнение второго порядка относительно функции $x(z)$ вида

$$x' = A_0(x, z)x'^2 + A_1(x, z)x' + A_2(x, z), \quad (9)$$

где $A_0(x, z)$, $A_1(x, z)$, $A_2(x, z)$ – рациональные функции x с голоморфными по z коэффициентами.

Исходя из теории Пенлеве – Гамбье [3] получаем, что целая часть $A_2(x, z)$ относительно x должна быть полиномом не выше третьей степени. Это дает дополнительное необходимое условие на коэффициенты системы (8):

$$2\beta_3\alpha_7^2 \equiv 3\alpha_4\alpha_6^2 - 6\alpha_3\alpha_6\alpha_7. \quad (10)$$

Для принадлежности системы(1) Р-типу соответствующие необходимые условия есть:

$$2\bar{\beta}_3\bar{\alpha}_8 (4\bar{\alpha}_8^3 - 27\bar{\alpha}_6\bar{\alpha}_9^2) \equiv 27\bar{\alpha}_6\bar{\alpha}_9 (9\bar{\alpha}_4\bar{\alpha}_6\bar{\alpha}_9 - 4\bar{\alpha}_3\bar{\alpha}_8^2), \quad (11)$$

$$\bar{\alpha}_5 (4\bar{\alpha}_8^3 - 27\bar{\alpha}_6\bar{\alpha}_9^2) \equiv 9\bar{\alpha}_3\bar{\alpha}_8 (\bar{\alpha}_4\bar{\alpha}_8 - 3\bar{\alpha}_3\bar{\alpha}_9).$$

Уравнение (9) при условии (10) примет вид:

$$x' = \frac{2\alpha_7x + \alpha_4}{2(\alpha_7x^2 + \alpha_4x + \alpha_2)}x'^2 + \frac{\alpha_7x^2 + \alpha_4x + \alpha_2}{\alpha_7x^2 + \alpha_4x + \alpha_2}x' + \frac{M_0x^5 + M_1x^4 + M_2x^3 + M_3x^2 + M_4x + M_5}{2\alpha_7^2(\alpha_7x^2 + \alpha_4x + \alpha_2)}, \quad (12)$$

где M_0, \dots, M_5 – определенным образом выражаются через функции $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_6, \alpha_7, \beta_0, \beta_1$ и их производные, причем $\alpha^2_4(z) - 4\alpha_7(z)\alpha_2(z) \neq 0$, так как полюсы функций $A_0(x, z)$, $A_1(x, z)$, $A_2(x, z)$ должны быть простыми [3]. Последнее уравнение исследовано, напр., в [3].

В случае 2) коэффициент $\alpha_7(z) \equiv 0$ и тогда, учитывая тождество (6), $\alpha_6(z) \equiv 0$. Значит, система (4) примет вид:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dz} = \alpha_0 + \alpha_1x + \alpha_2y + \alpha_3x^2 + \alpha_4xy + \alpha_5y^2, \\ \frac{dy}{dz} = \beta_0 + \beta_1x - \alpha_1y + \beta_3x^2 - \\ - 2\alpha_3xy - \frac{1}{2}\alpha_4y^2 + \beta_6x^3. \end{cases} \quad (13)$$

Вводим параметр λ по формулам:

$$x = \frac{\xi}{\lambda^3}, \quad y = \frac{\eta}{\lambda^4}, \quad z = z_0 + \lambda^5t, \quad z_0 \in D.$$

При $\lambda = 0$ получаем систему

$$\begin{cases} \frac{d\xi}{dt} = \alpha_5(z_0)\eta^2, \\ \frac{d\eta}{dt} = \beta_6(z_0)\xi^3, \end{cases}$$

которая сводится (используя первый интеграл) к одному уравнению первого порядка:

$$\xi^3 = \frac{9}{16}\beta_6^2(z_0)\alpha_5(z_0)\xi^8 + \frac{9}{2}\beta_6(z_0)\alpha_5(z_0)C_0\xi^4 + 9\alpha_5(z_0)C_0^2,$$

где C_0 – произвольная постоянная. По теореме Фукса [1, 3] для отсутствия критических подвижных особых точек в решениях этого уравнения необходимо и достаточно, чтобы $\beta_6^2(z_0)\alpha_5(z_0) = 0$. Для системы(13) последнее условие дает следующее: 2а) $\beta_6(z) \equiv 0$, 2б) $\alpha_5(z) \equiv 0$.

В случае 2а) имеем систему второго порядка, которая на предмет однозначности подвижных особенностей исследована в [4].

Если же $\alpha_5(z) \equiv 0$ (т. е. имеет место случай 2б)), то система (13)

сводится к уравнению вида (9). Для принадлежности его к Р-типу необходимо, чтобы $\alpha_4^2(z)\beta_6(z) \equiv 0$. Система (13) при $\beta_6(z) \equiv 0$ изучена в [4], что позволяет рассматривать (13) при $\alpha_5(z) \equiv \alpha_4(z) \equiv 0$. Тогда в уравнении (9)

$$A_0(x, z) \equiv 0, A_1(x, z) \equiv \frac{\alpha_2(z)}{\alpha_2(z)}, A_2(x, z) \equiv T_0x^3 + T_1x^2 + T_2x + T_3,$$

где T_0, T_1, T_2, T_3 выражаются рациональным образом через функции $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta_0, \beta_1, \beta_6$, а также производные некоторых из них, $\alpha_2(z) \neq 0$. При определенных условиях на коэффициенты из этого уравнения получаются первое или второе уравнения Пенлеве [3].

Если же $\alpha_2(z) \equiv 0$, то имеем вырожденный случай. Решения соответствующей системы наряду с подвижными полярными особенностями могут иметь и логарифмические подвижные особенности [5].

Таким образом, тождества (3), (11), а также выводы из [1] и [3] дают необходимые и достаточные условия однозначности подвижных особенностей исходной системы.

Теорема. Если система (1) имеет только однозначные подвижные особые точки, то ее решения выражаются:

- а) либо через эллиптические функции,
- б) либо через решения линейных уравнений,
- в) либо через классические трансцендентные функции,
- г) либо через решения первого, второго, третьего или четвертого уравнений Пенлеве.

Список литературы

1. Голубев В. В. Лекции по аналитической теории дифференциальных уравнений. М.: Л., 1950.
2. Мататов В. И., Филиппович С. Н.//Дифференц. уравнения. 1988. Т. 24. № 11. С. 2016.
3. Айнс Э. Л. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Харьков, 1939.
4. Лукашевич Н. А., Мататов В. И.//Дифференц. уравнения. 1973. Т. 9. № 3. С. 449.
5. Сабынич Л. В.//Респ. науч. чтения по обыкн. дифференц. уравнениям. Тез. докл. Мн., 1990.

Поступила в редакцию 06.02.92.

УДК 517.956.3

Л. Г. ТРЕТЬЯКОВА

К ЗАДАЧЕ О ДВОЯКОПЕРИОДИЧЕСКИХ РЕШЕНИЯХ КВАЗИЛИНЕЙНОГО ТЕЛЕГРАФНОГО УРАВНЕНИЯ

The theorem of existence and uniqueness of double—periodic solutions for quasilinear telegraph equation in the space of continuous functions has been obtained.

Будем рассматривать задачу о существовании и единственности двоякопериодических обобщенных решений квазилинейного телеграфного уравнения

$$u_{tt} - u_{xx} + cu = f(t, x, u) \quad (1)$$

при $c \neq 0$.

Один из основных методов построения таких решений основан на обращении линейного дифференциального оператора

$$L_c u = u_{tt} - u_{xx} + cu$$

в том или ином пространстве функций, определенных на множестве $\Omega = \{(t, x) / 0 \leq t \leq \omega, 0 \leq x \leq \omega_1\}$ и последующем переходе к нелинейному операторному уравнению

$$u = G_c F u \quad (2)$$

в этом пространстве; здесь G_c – обратный к оператору L_c оператор, F – нелинейный оператор суперпозиции.

В настоящей работе будем рассматривать задачу (1) для случая $\omega(\omega_1)^{-1} = 0,5$. При этом свойства обратного оператора G_c будут исследоваться по схеме, предложенной в [1–4]. Сначала будет показано, что если оператор G_c существует, то его можно представить в виде композиции двух операторов, действующих в пространстве $C(\Omega)$. Далее, полученная для нормы оператора G_c оценка позволит к уравнению (2) применить принцип сжимающих отображений Банаха–Каччиолли или специальный вариант [5, 6, 7] принципа мажорируемых отображений Л. В. Канторовича.

Описанная схема позволяет получить условия существования и единственности обобщенного дwoякопериодического непрерывного решения для всех c , для которых существует оператор G_c .

1. Рассмотрим задачу (1) в пространстве $C(\Omega)$. В работах [1, 2] доказано, что в этом случае оператор G_c , если он существует, можно представить в виде композиции двух операторов H_c и K_c , где

$$H_c = \frac{1}{2} (B \sin B \frac{\omega}{2})^{-1}, \quad (3)$$

$$K_c f(t, x) = \int_0^{\omega} \cos(B(\frac{\omega}{2} - lt - \tau)) f(\tau, x) d\tau,$$

а оператор B определен формулой:

$$Bu = \sum_{n \in Z} \sqrt{4\pi^2 n^2 \omega_1^{-2} + c} (u, \varphi_n) \varphi_n,$$

где

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\omega_1}} \exp\left(\frac{2\pi n x i}{\omega_1}\right) \quad (n \in Z). \quad (4)$$

С другой стороны, на основании [8] – аналога формулы Даламбера для телеграфного уравнения для оператора K_c ($c \neq 0$) справедливо представление:

$$\begin{aligned} K_c f(t, x) = & \int_0^{\omega} \frac{1}{2} (\bar{f}(\tau, x + \frac{\omega}{2} - lt - \tau) + \bar{f}(\tau, x - \frac{\omega}{2} + lt - \tau)) d\tau - \\ & - \frac{1}{2} \int_0^{\omega} \left(\int_{x - \frac{\omega}{2} + |t - \tau|}^{x + \frac{\omega}{2} - |t - \tau|} \bar{f}(\tau, y) \times \right. \\ & \left. \times \frac{c(\frac{\omega}{2} - |t - \tau|) J_1 \sqrt{c((\frac{\omega}{2} - |t - \tau|)^2 - (y - x)^2)}}{\sqrt{c((\frac{\omega}{2} - |t - \tau|)^2 - (y - x)^2)}} dy \right) d\tau; \end{aligned}$$

здесь J_1 – функция Бесселя первого рода, \bar{f} – ω_1 -периодическое продолжение функции $f(t, x)$ по переменной x .

Далее оператор H_c существует, если

$$c\omega_1 (4\pi^2)^{-1} \notin \left\{ \frac{1}{4} k^2 - n^2 / k, n \in Z \right\}$$

и на функции $f(t, x)$ определяется равенством

$$\begin{aligned} H_c f(t, x) = \\ = \sum_{n \in Z} \frac{1}{2} \left(\sqrt{4\pi^2 n^2 \omega_1^{-2} + c} \sin \frac{\omega}{2} \sqrt{4\pi^2 n^2 \omega_1^{-2} + c} \right)^{-1} f_n(t) \varphi_n(x), \quad (5) \end{aligned}$$

где $\varphi_n(x)$ определены по формуле (4), а

$$f_n(t) = \int_0^{\omega} f(t, y) \overline{\varphi_n(y)} dy \quad (n \in Z). \quad (6)$$

Исследуем сначала случай $c > 0$. Обозначим

$$c_1 = c\omega_1^2 (4\pi^2)^{-1},$$

$$\Gamma_n = \frac{1}{2} \left(\sqrt{4\pi^2 n^2 \omega_1^{-2} + c} \sin \frac{\omega}{2} \sqrt{4\pi^2 n^2 \omega_1^{-2} + c} \right)^{-1}.$$

Рассмотрим коэффициенты Γ_n в представлении (5) оператора H_c с четными и нечетными индексами:

$$\Gamma_{2m} = \frac{\omega_1}{4\pi} \left(\sqrt{(2m)^2 + c_1} \sin \frac{\pi}{2} \sqrt{(2m)^2 + c_1} \right)^{-1}, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{2m+1} &= \frac{\omega_1}{4\pi} \left(\sqrt{(2m+1)^2 + c_1} \sin \frac{\pi}{2} \sqrt{(2m+1)^2 + c_1} \right)^{-1} = \\ &= \frac{(-1)^m \omega_1}{4\pi} \left(\sqrt{(2m+1)^2 + c_1} \cos \frac{\pi c_1}{2} \times \right. \\ &\quad \left. \times (|2m+1| + \sqrt{(2m+1)^2 + c_1})^{-1} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (8)$$

Используя свойства ряда Фурье для функции $f(t, x)$, можно получить следующие формулы:

$$\frac{1}{2} \left(\bar{f} \left(t, x + \frac{\omega_1}{4} \right) + \bar{f} \left(t, x - \frac{\omega_1}{4} \right) \right) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} (-1)^{nf} f_{2n}(t) \varphi_{2n}(x), \quad (9)$$

$$\int_{x - \frac{\omega_1}{4}}^{x + \frac{\omega_1}{4}} \bar{f}(t, y) dy = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{(-1)^n \omega_1}{\pi (2n+1)} f_{2n+1}(t) \varphi_{2n+1}(x), \quad (10)$$

где $f_n(t)$, $\varphi_n(x)$ определены соответственно формулами (6) и (4).

На основании формул (9), (10) и вида коэффициентов Γ_{2m} и Γ_{2m+1} введем в рассмотрение коэффициенты

$$\gamma_n = \begin{cases} \Gamma_{2m} - \frac{4(-1)^m}{c\omega_1}, & n = 2m \\ \Gamma_{2m+1} - \frac{(-1)^m \omega_1}{4\pi(2m+1)}, & n = 2m+1. \end{cases}$$

Очевидно, что

$$0 < \lim_{m \rightarrow -\infty} |\gamma_{2m}| m^{-2} < \infty$$

и

$$0 < \lim_{m \rightarrow -\infty} |\gamma_{2m+1}| m^{-3} < \infty.$$

Поэтому, в силу признака сравнения, ряд $\sum_{n \in \mathbb{Z}} |\gamma_n|$ сходится. Отсюда следует следующая лемма.

Лемма. Пусть $c_1 > 0$, $c_1 \notin \left\{ \frac{1}{4} k^2 - n^2 \mid k, n \in \mathbb{Z} \right\}$.

Тогда оператор H_c представим в виде:

$$\begin{aligned} H_c f(t, x) &= \frac{2}{c\omega_1} \left(\bar{f} \left(t, x + \frac{\omega_1}{4} \right) + \bar{f} \left(t, x - \frac{\omega_1}{4} \right) \right) + \\ &+ \frac{1}{4} \int_{x - \frac{\omega_1}{4}}^{x + \frac{\omega_1}{4}} \bar{f}(t, y) dy + \int_0^1 k(x, y) f(t, y) dy, \end{aligned}$$

где \bar{f} – это ω_1 -периодическое продолжение функции $f(t, x)$ по переменной

x , а функция $k(x, y) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \gamma_n \varphi_n(x) \varphi_n(y)$ является непрерывной. Кроме того, оператор H_c определен и непрерывен в пространстве $C(\Omega)$ и его норма удовлетворяет неравенству

$$\|H_c\|_{C \rightarrow C} \leq \frac{4}{c\omega_1} + \frac{\omega_1}{8} + \omega_1 \sum_{n \in \mathbb{Z}} |\gamma_n|.$$

Из [1–2] следует, что оператор K_c обладает аналогичными свойствами, т. е. он определен и непрерывен в пространстве $C(\Omega)$ и его норма удовлетворяет неравенству

$$\|K_c\|_{C \rightarrow C} \leq \omega + \frac{1}{4} \pi \sqrt{|c|} \omega^2 \max_{0 < z < \frac{1}{2}} |J_1(\sqrt{c} z)|.$$

Из леммы следуют следующие теоремы.

Теорема 1. Пусть $c_1 = c\omega_1^2 (4\pi^2)^{-1} > 0$. Линейный дифференциальный оператор L_c имеет в пространстве $C(\Omega)$ непрерывный обратный оператор

G_c в том и только в том случае, когда $c_1 \notin \{\frac{1}{4}k^2 - n^2/k, n \in \mathbb{Z}\}$.

При выполнении этого условия справедлива оценка для нормы оператора G_c :

$$\begin{aligned} \|G_c\|_{C \rightarrow C} \leq & \left(\omega + \frac{1}{4} \pi \sqrt{|c|} \omega^2 \max_{0 < z < \frac{1}{2}} |J_1(\sqrt{c} z)| \right) \times \\ & \times \left(\frac{4}{c\omega_1} + \frac{\omega_1}{8} + \omega_1 \sum_{n \in \mathbb{Z}} |\gamma_n| \right). \end{aligned}$$

Теорема 2. Пусть $c_1 > 0$, $c_1 \notin \{\frac{1}{4}k^2 - n^2/k, n \in \mathbb{Z}\}$. Пусть, кроме того, уравнение

$$\|G_c\|_{C \rightarrow C} \|F_0\|_C + \int_0^r a(\rho) d\rho = r$$

имеет на отрезке $[0, R]$ единственное решение r^* . Тогда задача (1) имеет единственное двоякопериодическое решение $u(t, x)$, которое лежит в шаре $B[0, R]$ пространства $C(\Omega)$. Это двоякопериодическое решение, более того, лежит в шаре $B[0, r^*]$ пространства $C(\Omega)$ и является пределом последовательных приближений:

$$u_{n+1} = G_c F u_n \quad (n = 0, 1, 2, \dots; u_0 = 0)$$

в этом пространстве; здесь $a(\rho)$ взято из условия Липшица для функции $f(t, x, u)$.

Аналогичные результаты верны и для $c < 0$. Однако их формулировка и доказательство требуют более громоздкого аппарата и поэтому здесь не приводятся.

Автор выражает глубокую признательность профессорам А. Б. Антоневичу и П. П. Забрейко за обсуждение полученных результатов.

Список литературы

1. Забрейко П. П., Третьякова Л. Г. // Дифференц. уравнения. 1991. Т. 27. № 5. С. 815.
2. Третьякова Л. Г. (Редкол. журн. «Весці АН БССР. Сер. фіз.-мат. навук». Мн., 1990. Деп. в ВИНТИ 20.11.90. № 5834-В90.
3. Она же // Проблемы теоретической и прикладной математики: Тез. докл. конф. Тарту, 1990. С. 252.
4. Она же // Понтрягинские чтения; Оптимальное управление; Геометрия и анализ: Тез. докл. 3-й Всесоюз. школы. Кемерово, 1990. С. 79.
5. Канторович Л. В., Акилов Г. П. Функциональный анализ. М., 1983.
6. Забрейко П. П., Злепко П. П. // Качественные и приближенные методы исследования операторных уравнений. Ярославль, 1983. С. 67.

7. Абдурахманов А. А., Забрейко П. П. // Докл. АН БССР. 1988. Т. 22. № 12. С. 1061.

8. Вебстер А., Сеге Г. Дифференциальные уравнения в частных производных математической физики. М.; Л., 1933. Ч. 1.

Поступила в редакцию 11.02.92.

УДК 517.948.35

А. А. КУЛЕШОВ, МУХАММАД ШАМИ ХАССО

КЛАССИЧЕСКАЯ ПРОБЛЕМА МОМЕНТОВ И НЕКОТОРЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ ЛИНЕЙНЫХ САМОСОПРЯЖЕННЫХ ОПЕРАТОРОВ

In terms of moment sequence (ωA^n) , constructed on the bounded self-adjoint operator A in separable Hilbert space H and on state ω on $L(H)$, a classical approach to the study of spectral properties of an operator A is developed.

§ 1. Введение. Формулировка результатов.

В данной статье предлагается подход к изучению некоторых спектральных характеристик самосопряженного ограниченного оператора в сепарабельном гильбертовом пространстве, основанный на решении классической проблемы моментов, т. е. в терминах регуляризованных следов от степеней оператора A , которые представляют собой точные нормальные состояния на алгебре Фон Неймана, порожденной оператором A . Так что под регуляризованным следом от оператора понимается число $\text{Tr}(\rho A)$, где ρ – ядерный положительный оператор с конечным следом и нулевым ядром, а $\text{Tr}(\cdot)$ – след оператора, стоящего в круглых скобках.

Строится представление π алгебры Фон Неймана, порожденной оператором A в пространстве $B(l_2(0, +\infty))$, которое «представляет» исходный оператор A в виде бесконечной якобиевой матрицы. Формулы, полученные в статье, основываются на простоте спектра оператора $\pi(A)$ и точности представления π .

Предложение 1. Спектр любого ограниченного самосопряженного оператора A в сепарабельном гильбертовом пространстве совпадает со спектром выражения:

$$(\pi(A)x)_j = b_{j-1}x_{j-1} + b_jx_{j+1} + a_jx_j, \quad (1)$$

$$j = \dots, -1, 0, 1, \dots, \quad x_{-1} = 0, \quad x = (x_0, x_1, \dots) \in l_2(0, +\infty).$$

Константы a_j и b_j определены в § 2. По поводу разностного выражения (1) см. также [2].

Некоторые полученные формулы, возможно, и не имеют права претендовать на оригинальность. Например, равенство

$$\|A\| = \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{|\text{Tr}(\rho A^n)|} \quad (2)$$

введено в [3], однако с привлечением развитой техники теории алгебры Фон Неймана. Здесь же мы хотим обратить внимание на возможность однообразного подхода к выводу такого сорта формул.

Следует заметить, что большинство полученных результатов явно не отмечено в литературе, хотя доказывается очень просто. Например, та же формула (2) доказывается в одну строчку.

Предложение 2. Точечный спектр оператора A состоит из тех $\lambda \in \mathbb{R}^1$, для которых

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \int_{-t}^t \text{Tr}(\rho \exp(i\xi A)) \exp(-i\xi t) d\xi \neq 0.$$

Кроме того, если m – нижняя грань оператора A , а M – верхняя, то

$$m = - \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{\ln \text{Tr}(\rho \exp(-tA))}{t},$$

$$M = \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{\ln \text{Tr}(\rho \exp(tA))}{t}.$$

Предложение 3. Пусть $|M| \neq |m|$, тогда

а) точка $|M|$ – изолированная точка спектра оператора A и $\|A\| = |M|$ в том и только в том случае, когда

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr}(\rho A^k)}{\text{Tr}(\rho A^{k+1})} = \frac{1}{\|A\|},$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sqrt[k]{\left| 1 - \|A\| \frac{\text{Tr}(\rho A^{k-1})}{\text{Tr}(\rho A^k)} \right|} < 1;$$

б) точка $|m|$ – изолированная точка спектра оператора A и $\|A\| = |m|$ в том и только в том случае, когда

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr}(\rho A^k)}{\text{Tr}(\rho A^{k+1})} = -\frac{1}{\|A\|},$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sqrt[k]{\left| 1 + \|A\| \frac{\text{Tr}(\rho A^{k-1})}{\text{Tr}(\rho A^k)} \right|} < 1.$$

Пусть теперь $A \geq 0$, $\|A\| < 2$. Рассмотрим оператор $B = E - A$ и пусть m_B – нижняя грань оператора B , а M_B – верхняя. По определению $M_B = 1 - m$, $m_B = 1 - m$, так что условия $\|B\| = 1$ и $m = 0$ эквивалентны. Заметим, что точка 0 будет изолированной точкой спектра оператора A в том и только в том случае, когда точка 1 будет изолированной точкой спектра оператора B . Кроме того, 0 будет изолированной точкой спектра оператора A тогда и только тогда, когда его область значений замкнута. Откуда получаем

Следствие. Пусть $A \geq 0$, $\|A\| < 2$. Оператор A имеет замкнутую область значений, по не обратим в том и только в том случае, когда

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr}(\rho (E - A)^k)}{\text{Tr}(\rho (E - A)^{k+1})} = 1,$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sqrt[k]{\left| 1 - \frac{\text{Tr}(\rho (E - A)^k)}{\text{Tr}(\rho (E - A)^{k+1})} \right|} < 1.$$

К этому следствию еще нужно добавить, что в случае существования предела

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{\text{Tr}(\rho (E - A)^k)}{\text{Tr}(\rho (E - A)^{k+1})} \right|$$

оператор A обратим, если этот предел меньше 1 и не обратим, если этот предел равен 1.

§ 2. Доказательство результатов.

Пусть $M(A)$ – множество многочленов от оператора A с комплексными коэффициентами, $M'(A)$ – коммутант, $M''(A)$ – бикоммутант, т. е. алгебра Фон Неймана, порожденная оператором A . Превратим $M''(A)$ в предгильбертово пространство, определяя скалярное произведение на $M''(A)$ равенством

$$\langle B, C \rangle = \text{Tr}(\rho B^* C), \quad B, C \in M''(A).$$

Пополнение $M''(A)$ обозначим H' . Представление π из $M''(A)$ в $B(H')$ определим стандартным образом (см., напр., [1]): $\pi(B)C = BC$, где $B \in M''(A)$, $C \in H'$. Определение корректно, ибо

$$\|\pi(B)\|_{H'} \leq \|B\| \|C\|_{H'},$$

$B \in M''(A)$, $C \in M''(A)$. (см. [1], с. 62, п. 2.3.3). Поскольку алгебра $M''(A)$ содержит единицу, то представление π точное. Заметим также, что спектр

оператора $B \in M''(A)$ относительно подалгебры $M''(A)$ совпадает со спектром оператора B как оператора из H в H . Кроме того, из самой конструкции представления π следует, что спектр оператора $\pi(A)$ является простым, а из точности π и предыдущего замечания вытекает совпадение спектров оператора A и оператора $\pi(A)$. Таким образом, для доказательства предложения 1 остается реализовать H' в виде $L_2(0, +\infty)$. Но сначала мы реализуем H' в виде гильбертова пространства $L_2(\mathbb{R}^1, d\mu)$ – измеримых, интегрируемых с квадратом функций по некоторой положительной мере $d\mu(\lambda)$. Будем предполагать, что спектр оператора A имеет хотя бы одну предельную точку. Обозначим: $m = \inf (Ax, x)$, $M = \sup (Ax, x), \|x\| = 1$. В силу формулы $\|P(A)\| = \max_{\lambda \in \sigma(A)} |P(\lambda)|$ и сделан-

ного предположения о характере спектра оператора A , условие $P(\lambda) \equiv 0$ эквивалентно $P(\lambda) = 0$ для любого многочлена с действительными коэффициентами. Поэтому, если $P(\lambda) \geq 0$, $P(\lambda) \neq 0$, то $\text{Tr}(\rho P(A)) > 0$. Следовательно (см., напр., [4], с. 10), все определители

$$D_k = \begin{vmatrix} 1, & \text{Tr}(\rho A), & \dots, & \text{Tr}(\rho A^k) \\ \vdots & & & \\ \text{Tr}(\rho A^k), & \text{Tr}(\rho A^{k+1}), & \dots, & \text{Tr}(\rho A^{2k}) \end{vmatrix} > 0, \quad (3)$$

$k = 0, 1, \dots$. Из определения скалярного произведения в пространстве $H' (\langle B, C \rangle = \text{Tr}(\rho B^* C))$ условия (3) эквивалентны линейной независимости последовательности E, A, A^2, \dots в гильбертовом пространстве H' . Ортогонализируя эту последовательность, получаем последовательность ортонормированных в H' многочленов $P_k(A), k = 0, 1, \dots$. Поскольку любой многочлен с комплексными коэффициентами можно записать в виде конечной линейной комбинации с комплексными коэффициентами многочленов

$$\{P_k(\lambda)\}_{k=0}^{\infty}, \text{ то } \{P_k(A)\}_{k=0}^{\infty}$$

– ортонормированный базис в H' . Пусть $\mu(\lambda)$ – решение проблемы моментов $\text{Tr}(\rho A^k) = \int \lambda^k d\mu(\lambda)$, с точностью до постоянного слагаемого оно единственно.

Теперь представление π из $M''(A)$ в $B(L_2(0, +\infty))$ строится стандартным образом (см. напр., [4]) и приводит к формуле:

$$(\pi(A)x)_j = b_{j-1}x_{j-1} + b_jx_{j+1} + a_jx_j, \quad (4)$$

где

$$b_j = \sqrt{\frac{D_{j-1}D_{j+1}}{D_j}}, \quad a_j = \text{Tr}(\rho P_j^2(A)), \quad j = 0, 1, \dots,$$

а D_j считаются по формулам (3). Из сказанного следует предложение 1.

Возвратимся к формуле (2). Для ее доказательства нужно заметить, что $\text{Tr}(\rho \exp(i\xi A))$ – целая функция экспоненциального типа $\|A\|$, поскольку

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\rho \exp(i\xi A)) &= \int_{m-0}^M \exp(i\xi\lambda) d\mu(\lambda) = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\text{Tr}(\rho A^k)}{k!} (i\xi)^k \end{aligned}$$

– характеристическая функция распределения $\mu(\lambda)$ (см. [5]). Отсюда немедленно вытекает (2).

Пусть π – представление $M''(A)$ в $B(L_2(\mathbb{R}^1, d\mu))$. Имеем

$$\text{Tr}(\rho(A - \lambda E)^{-1}) = R_z(\pi(A)) = \int_{m-0}^M \frac{d\mu(\lambda)}{\lambda - z}, \quad (5)$$

где $R_z(\pi(A))$ – резольвента оператора $\pi(A)$.

Прежде чем доказывать предложение 3, установим один вспомогательный результат.

Лемма. Следующие условия эквивалентны:

- а) точка $\lambda_0 = m(\lambda_0 = M)$ – изолированная точка спектра оператора A ;
- б) точка $z_0 = m(z_0 = M)$ – полюс первого порядка для резольвенты оператора $\pi(A)$.

Доказательство. Если выполнено условие а), тогда резольвента оператора A – аналитическая функция в выколотой окрестности точки λ_0 . Функция

$$R_z(\pi(A)) = \text{Tr}(\rho(A - zE)^{-1}) = \int_{m-0}^M \frac{d\mu(\lambda)}{\lambda - z}$$

является аналитической в выколотой окрестности точки λ_0 и $R_z(\pi(A))$ – резольвента оператора $\pi(A)$. Поскольку спектр оператора $\pi(A)$ простой, то λ_0 – полюс первого порядка для резольвенты оператора $\pi(A)$. Если выполнено условие б), тогда

$$\int_{m-0}^M \frac{d\mu(\lambda)}{\lambda - z} = \frac{c}{\lambda_0 - z} + \varphi(z),$$

$c \neq 0$ в некоторой окрестности точки λ_0 ; причем $\varphi(z)$ – аналитическая функция в этой окрестности. Отсюда вытекает существование числа $\epsilon > 0$ такого, что $\mu(\lambda) = c_1$ для $\lambda_0 < \lambda < \lambda_0 + \epsilon$ и $\mu(\lambda) = c_2$ для $\lambda_0 - \epsilon < \lambda < \lambda_0$, где c_1 и c_2 – некоторые константы. При этом

$$\mu(\lambda_0) - \mu(\lambda_0 - 0) = c_1 - c_2 > 0.$$

Таким образом, λ_0 – изолированная точка спектра оператора A . Лемма доказана.

Очевидно, что эта лемма допускает обобщение на любую точку из $[m, M]$, но нам это обобщение не понадобится.

Для того чтобы придать этой лемме количественный характер (а это как раз и составит результат предложения 3), заметим, что функция

$$\varphi(z) = - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\text{Tr}(\rho A^k)}{\|A\|^{k+1}} \cdot z^{k+1} = \text{Tr}(\rho(A - \frac{\|A\|}{z}E)^{-1})$$

аналитическая в круге $|z| < 1$. Причем точка $z_0 = 1$ или $z_0 = -1$ суть особые точки суммы ряда. Например, если $\|A\| = |M|$, то особая точка $z_0 = 1$; если $\|A\| = |m|$, то особая точка $z_0 = -1$. Так что точка $z_0 = m(z_0 = M)$ – полюс первого порядка для резольвенты оператора $\pi(A)$ в том и только в том случае, когда $z_0 = -1(z_0 = 1)$ – полюс первого порядка для функции $\varphi(z)$. Из теоремы Адамара (см. [6], сноска на с. 97) теперь вытекает предложение 3.

Наконец, предложение 2 есть простое следствие теории характеристических функций (см. по этому поводу [5]).

Список литературы

1. Браттели У., Робинсон Д. Операторные алгебры и квантовая статистическая механика. М., 1982.
2. Березанский Ю. М. Разложение по собственным функциям самосопряженных операторов. Киев, 1965.
3. Dlugosz J. // Colloquium mathematicum. 1981. V. 24. № 2. P. 323.
4. Ахизер Н. И. Классическая проблема моментов. М., 1961.
5. Рамачандран Б. Теория характеристических функций. М., 1975.
6. Бибербах Л. Аналитическое продолжение. М., 1967.

МНОГОГРАННИК РАЗРЕЗОВ ГРАФА

This paper gives some results about the polytope associated with the maximum cut problem and studies the facet properties for cycles.

Полиэдральные аспекты задачи о максимальном разрезе графа исследовались во многих работах (см. напр., [1, 2]). При этом разрезе графа ставится в соответствие булев вектор инциденции. Рассмотрим задачу в следующей постановке. Пусть $G = (V, E)$ — неориентированный граф без петель и кратных ребер, вершины и ребра которого имеют веса $w(v)$, $v \in V$, и $w(e)$, $e \in E$, соответственно. Необходимо найти максимальный разрез $(V_1 - V_2)$ графа G с учетом весов вершин, т. е. разрез с максимальным значением функции

$$\sum_{\substack{(v,u) \in E \\ v \in V_1, u \in V_2}} w(v, u) + \sum_{v \in V_1} w(v) - \sum_{u \in V_2} w(u). \quad (1)$$

Положим, что $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, и каждой вершине v_i поставим в соответствие переменную

$$x_{ii} = \begin{cases} 1, & \text{если } v_i \in V_1, \\ -1, & \text{если } v_i \in V_2, \end{cases} \quad (2)$$

а каждой паре вершин (v_i, v_j) переменную

$$x_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } (v_i, v_j) \in E \text{ и либо } v_i, v_j \in V_1, \\ & \text{либо } v_i, v_j \in V_2, \\ -1, & \text{если } (v_i, v_j) \in E \text{ и } v_i \in V_1, v_j \in V_2, \\ 0, & \text{в других случаях.} \end{cases} \quad (3)$$

Тогда каждому разрезу $(V_1 - V_2)$ можно поставить в соответствие матрицу $X(V_1, V_2)$ с элементами, определяемыми соотношениями (2), (3), а (1) записать в виде:

$$\sum_{i=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^n w(v_i, v_j) x_{ij} + \sum_{i=1}^n w(v_i) x_{ii}. \quad (4)$$

Обозначим через $M(G)$ множество матриц $X(V_1, V_2)$, определяемое графом G и всевозможными его разрезами $(V_1 - V_2)$. Задача о максимальном разрезе с учетом весов вершин эквивалентна задаче ЛП с целевой функцией (4) и условием $X \in \text{CH}(G) = \text{conv} M(G)$. Выпуклую оболочку $\text{CH}(G)$ назовем многогранником разрезов графа G . Свойства и характеристики многогранника разрезов полного графа изучались в работах [3–6]. В настоящей статье исследуется многогранник $\text{CH}(C_n)$ цикла с n -вершинами. В переменных (2), (3) получены системы неравенств, характеризующие гипергрani $\text{CH}(C_n)$.

По аналогии с соответствующими утверждениями для полного графа [3] можно показать справедливость утверждений относительно множества вершин $\text{vert} \text{CH}(C_n)$ и размерности $\dim \text{CH}(C_n)$ многогранника $\text{CH}(C_n)$.

Утверждение 1. $\text{vert} \text{CH}(C_n) = M(C_n)$.

Утверждение 2. $\dim \text{CH}(C_n) = 2n$.

Исследуем гипергрani многогранника $\text{CH}(C_n)$.

Теорема 1. Для $n \geq 2$ каждое из неравенств

$$\begin{aligned} x_{ii} - x_{i+1i+1} + x_{ii+1} &\leq 1, & x_{ii} + x_{i+1i+1} - x_{ii+1} &\leq 1, \\ -x_{ii} + x_{i+1i+1} + x_{ii+1} &\leq 1, & -x_{ii} - x_{i+1i+1} - x_{ii+1} &\leq 1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x_{11} - x_{nn} + x_{1n} &\leq 1, & x_{11} + x_{nn} - x_{1n} &\leq 1, \\ -x_{11} + x_{nn} + x_{1n} &\leq 1, & -x_{11} - x_{nn} - x_{1n} &\leq 1, \end{aligned}$$

$i = \overline{1, n-1}$, определяет гипергрань многогранника $\text{CH}(C_n)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Проведем доказательство для неравенства $x_{ii} - x_{i+1i+1} + x_{ii+1} \leq 1, 1 \leq i \leq n-1$.

Рассмотрим матрицу $D = \|d_{ij}\|$ с элементами $d_{ii} = d_{ii+1} = 1, d_{i+1i+1} = -1$ и остальными элементами равными 0. Тогда

$$H(D, 1) = \left\{ X \in \mathbb{R}^{n \times n} \mid \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n d_{ij} x_{ij} = 1 \right\}$$

есть опорная гиперплоскость к $\text{CH}(C_n)$, а

$$F(D, 1) = \left\{ X \in \text{CH}(C_n) \mid \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n d_{ij} x_{ij} = 1 \right\}$$

является гранью $\text{CH}(C_n)$. Любая матрица $X \in F(D, 1)$ удовлетворяет уравнению $x_{ii} - x_{i+1i+1} + x_{ii+1} = 1$.

Значит, $\dim F(D, 1) \leq 2n - 1$. Пусть $K(i_1, i_2; \dots; i_{2s-1}, i_{2s})$ и $T(i_1, i_2; \dots; i_{2s-1}, i_{2s})$ – множества матриц из $M(C_n)$ с элементами $x_{i_{2l-1}i_{2l}} = 1$ и $x_{i_{2l-1}i_{2l}} =$

$= -1, l = \overline{1, s}$ соответственно. Тогда множество из $2n$ матриц

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2^{n-1}} \sum_{K(i, i+1)} X, \frac{1}{2^{n-1}} \sum_{K(i, i)} X, \frac{1}{2^{n-1}} \sum_{T(i+1, i+1)} X, \frac{1}{2^{n-2}} \sum_{K(i, i+1; k, p)} X, \\ &0 \leq p - k \leq 1, (k, p) \notin \{(i, i), (i+1, i+1), \\ &(i, i+1)\}, \frac{1}{2^{n-2}} \sum_{K(i, i+1; 1, n)} X, \end{aligned}$$

является аффинно независимым. Каждая из этих матриц принадлежит $F(D, 1)$ как выпуклая оболочка матриц из $F(D, 1)$. Следовательно, $\dim F(D, 1) = 2n - 1$. Для остальных неравенств доказательство проводится аналогично.

Пусть $\{N-1\} = \{1, 2, \dots, n-1\}$.

Теорема 2. Для $n \geq 4$ каждое из неравенств

$$-\sum_{i \in \omega} x_{ii+1} + \sum_{j \in \{N-1\} \setminus \omega} x_{jj+1} + x_{1n} \leq n-2, \forall \omega \subseteq \{N-1\}, |\omega| = 2k+1, \quad (5)$$

$$-\sum_{i \in \omega} x_{ii+1} + \sum_{j \in \{N-1\} \setminus \omega} x_{jj+1} - x_{1n} \leq n-2, \forall \omega \subseteq \{N-1\}, |\omega| = 2k, \quad (6)$$

определяет гипергрань $\text{CH}(C_n)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Рассмотрим одно из неравенств (5). Положим, что $X \in M(C_n)$. Тогда, если хотя бы для одного $i \in \omega$ элемент $x_{ii+1} = 1$ или хотя бы для одного $j \in \{N-1\} \setminus \omega$ элемент $x_{jj+1} = -1$, то неравенство для матрицы X выполняется. Предположим, что $x_{ii+1} = -1, i \in \omega, x_{jj+1} = 1, j \in \{N-1\} \setminus \omega$. Получим $x_{nn} = x_{11}x_{12} \dots x_{n-1n} = -x_{11}$. Следовательно, $x_{1n} = -1$, что влечет выполнение требуемого неравенства. Таким образом, для любой матрицы $X \in M(C_n)$ рассматриваемое неравенство имеет место.

Построим множество K , включающее следующие вершины $M(C_n)$:

а) $2|\omega|$ матрицы $X^+, X^-, l \in \omega$. Здесь X^+, X^- имеют элементы

$$x_{ii+1}^+ = x_{ii+1}^- = -1, i \in \omega \setminus l, x_{ii+1}^+ = x_{ii+1}^- = 1, x_{jj+1}^+ = x_{jj+1}^- = 1,$$

$$j \in \{N-1\} \setminus \omega \text{ и } x_{11}^+ = 1, x_{11}^- = -x_{11}^-, i = \overline{1, n};$$

б) $2n - 2|\omega| - 2$ матрицы $X^+, X^-, l \in \{N-1\} \setminus \omega$. Здесь X^+, X^- имеют элементы

$$x_{ii+1}^+ = x_{ii+1}^- = -1, i \in \omega, x_{jj+1}^+ = x_{jj+1}^- = 1,$$

$$j \in \{N-1\} \setminus \omega \setminus 1, x_{j+1}^+ = x_{j+1}^- = -1, x_{11}^+ = 1, x_{ii}^+ = -x_{ii}^-, i = \overline{1, n};$$

в) 2 матрицы X_{1n}^+, X_{1n}^- с элементами

$$x_{ii+1}^+ = x_{ii+1}^- = -1, i \in \omega, x_{jj+1}^+ = x_{jj+1}^- = 1,$$

$$j \in \{N-1\} \setminus \omega, x_{11}^+ = 1, x_{ii}^+ = -x_{ii}^-, i = \overline{1, n}.$$

Каждая матрица $X \in K$ удовлетворяет рассматриваемому неравенству как равенству.

Составим теперь матрицу A порядка $2n$, строки которой состоят из элементов $x_{11}, \dots, x_{nn}, x_{12}, \dots, x_{n-1n}, x_{1n}$ вершин $X_{11}^+, \dots, X_{n-1}^+, X_{1n}^+, X_{-1}^-, \dots, X_{n-1}^-, X_{-1n}^-$ соответственно. Проведем элементарные преобразования матрицы A . Прибавим к строкам, отвечающим вершинам $X_{-i}^-, i = \overline{1, n-1}, X_{-1n}^-$, строки вершин $X_{i1}^+, i = \overline{1, n-1}, X_{1n}^+$. Затем в полученной матрице вычтем из строк вершин $X_{i1}^+, i = \overline{1, n-1}, X_{1n}^+$ строки вершин $X_{-i}^-, i = \overline{1, n-1}, X_{-1n}^-$, умноженные на $1/2$. В результате получим матрицу вида:

$$\begin{vmatrix} B_1 & 0 \\ 0 & 2B_2 \end{vmatrix},$$

где B_1 — $n \times n$ -подматрица, отвечающая диагональным элементам вершин $X_{11}^+, \dots, X_{n-1}^+, X_{1n}^+$, B_2 — $n \times n$ -подматрица, отвечающая ненулевым наддиагональным элементам вершин $X_{-1}^-, \dots, X_{n-1}^-, X_{-1n}^-$. Преобразуем подматрицу B_1 . Для этого вычтем строку вершины X_{11}^+ из всех остальных строк. В силу соотношения $x_{ij} = x_{11}x_{12} \dots x_{i-1j}, i = \overline{2, n-1}$, получим матрицу

$$\begin{vmatrix} 1 & e \\ 0 & B_3 \end{vmatrix},$$

где e — $(n-1)$ -строка с элементами, по абсолютной величине равными 1; O — $(n-1)$ -нулевой столбец; B_3 — $(n-1) \times (n-1)$ -матрица с элементами $b_{ij}^3 = 0, j > i, |b_{ij}^3| = 2, j \leq i$. Отсюда $|\det B_1| = |\det B_3| = 2^{n-1}$.

Преобразуем подматрицу B_2 . Для этого перестановками изменим порядок следования столбцов так, чтобы вначале располагались столбцы, соответствующие элементам $x_{ii+1}, i \in \omega$, а затем — элементам $x_{ii+1}, i \in \{N-1\} \setminus \omega$, в порядке возрастания индекса i , и последним — столбец элемента x_{1n} . В полученной матрице вычтем последний столбец из всех остальных столбцов. Прибавим к последней строке все остальные строки. В результате получим матрицу вида:

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 2 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -2 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & n-2 \end{bmatrix}$$

Следовательно, $|\det B_2| = (n-2)2^{n-1}$.

Окончательно $|\det A| = 2^n |\det B_1| |\det B_2| = 2^{3n-2}(n-2)$. Следовательно, матрицы множества K являются аффинно независимыми, что доказывает теорему для неравенств (5). Для неравенств (6) доказательство проводится аналогично.

В заключение выскажем следующее предположение.

Гипотеза. Неравенства теорем 1, 2 дают полную систему для многогранника $CH(C_n)$.

Список литературы

1. Barahona F., Mahioub A. R. // Math. Progr. 1986. V. 36. P. 157.
2. Barahona F. On cuts and matchings in planar graphs. Bonn, 1988. R. 88503-OR.
3. Isachenko A. N. // Combinatorics and Graph Theory. Warszawa, 1989. V. 25. P. 87.
4. Isachenko A. N. // 4-th Conference of Program Designers. Budapest, 1988. P. 127.
5. Исаченко А. Н., Махибулла А. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1988. № 3. С. 68.
6. Исаченко А. Н., Махибулла А. // Там же. 1989. № 2. С. 20.

Поступила в редакцию 29.12.92.

УДК 519.1

В. Э. ЗВЕРОВИЧ, И. Э. ЗВЕРОВИЧ, Ю. Л. ОРЛОВИЧ

КАТАЛОГ СВЯЗНЫХ 4-РЕГУЛЯРНЫХ ЛОКАЛЬНОСВЯЗНЫХ ГРАФОВ

A graph is called locally-connected if the neighbourhood of each of its vertex induces a connected graph.

All connected 4-regular locally-connected graphs are studied in this paper. The following theorem is proved in the paper: for any $n \geq 5$ there exists the only one (up to isomorphism) connected 4-regular locally-connected graph G_n and this graph is obtained from simple cycle $C_n = (v_1, v_2, \dots, v_n, v_1)$ by addition of edges $v_i v_{i+2}$, $i = \overline{1, n-2}$, $v_{n-1} v_1$, $v_n v_2$.

В данной работе используется терминология книги [1]. Широко исследуется проблема описания графов, у которых окружение каждой вершины индуцирует подграф с заданным свойством. Начало таких исследований было положено А. А. Зыковым [2]. Здесь мы приведем полный список связных 4-регулярных локальносвязных графов. Этот результат находится в рамках общего направления, связанного с конструктивным перечислением комбинаторных объектов.

Граф G называется локальносвязным, если окружение $N(v)$ каждой его вершины v порождает связный граф $G(N(v))$. Окружением множества $X \in VG$ называется $N(X) = \bigcup_{x \in X} N(x)$. Обозначим через $M(X)$ подграф, ин-

дуцированный множеством $N(X) \setminus X$. Мы допускаем, что граф $M(X)$ может не иметь ни одной вершины. Множество $X \in VG$ назовем максимальным, если не существует такого $X' \in VG$, что $X \subsetneq X'$ и $N(X') \cup X' = N(X) \cup X$.

Лемма 1. Для любого максимального подмножества $X \in VG$ локальносвязного графа G подграф $M(X)$ не содержит изолированных вершин.

Доказательство. Допустим противное: существует такое максимальное множество $X \in VG$, что подграф $M(X)$ имеет изолированную вершину u . Тогда, с учетом локальной связности графа G и в силу выбора вершины u , имеет место $N(X) \cup X = N(X') \cup X'$, где $X' = X \cup \{u\}$, что противоречит свойству максимальности множества X . Лемма 1 доказана.

Вершина u графа G называется доминирующей, если она смежна со всеми вершинами множества $VG \setminus \{u\}$. Обозначим через $D(v)$ множество доминирующих вершин подграфа $M(\{v\})$.

Лемма 2. Для любой вершины v g -регулярного локальносвязного графа G подграф $M(\{v\}) \setminus D(v)$ не имеет изолированных вершин.

Доказательство. Обозначим $X = \{v\} \cup D(v)$. Ясно, что $N(X) \setminus X = N(v) \setminus D(v)$, так как граф G является регулярным. По той же причине любая вершина, которая не является доминирующей в $M(\{v\})$, смежна с некоторой вершиной, не принадлежащей $\{v\} \cup N(v)$. Поэтому множество X является максимальным и по лемме 1 подграф $M(X) = M(\{v\}) \setminus D(v)$ не имеет изолированных вершин. Лемма 2 доказана.

Лемма 3. Пусть G – связный 4-регулярный локальносвязный граф. Тогда имеет место одна из трех альтернатив:

- (i) окружение каждой вершины графа индуцирует K_4 и $G \cong K_5$;
- (ii) окружение каждой вершины графа индуцирует C_4 и $G = L(K_4)$;
- (iii) окружение каждой вершины графа изоморфно P_4 .

Доказательство. Так как G является 4-регулярным локальносвязным графом, то окружение любой его вершины v индуцирует связный граф $M(\{v\})$ порядка 4. Таких графов всего шесть: $P_4, K_{1,3}, C_4, K_{1,3} + e, K_4 - e, K_4$.

По лемме 2 удаление всех доминирующих вершин из графа $M(\{v\})$ приводит к графу без изолированных вершин. Этим свойством не обладают графы $K_{1,3}$, $K_{1,3}+e$ и K_4-e . Поэтому $M(\{v\})$ изоморфен K_4 , C_4 или P_4 .

(i) Если $M(\{v\}) \cong K_4$, то $G(\{v\}) \cup N(v) \cong K_5$ и, в силу связности G , $G \cong K_5$.

(ii) Если $M(\{v\}) \cong C_4$, то существует вершина $w \notin \{v\} \cup N(v)$, смежная хотя бы с одной вершиной множества $N(v)$. Разобьем $N(v)$ на два подмножества N_1 и N_2 : $N_1 = N(v) \cap N(w) \neq \emptyset$ и $N_2 = N(v) \setminus N_1$. Ясно, что множество $X = \{v\} \cup N_1$ является максимальным, если $N_2 = \emptyset$. Подграф $M(X)$ содержит изолированную вершину w , что противоречит лемме 1. Следовательно, $N_2 \neq \emptyset$, т. е., w смежна со всеми вершинами множества $N(v)$. В силу связности граф G не содержит других вершин и $G \cong L(K_4)$.

(iii) Два из трех вариантов ($M(\{v\}) \cong K_4$ или C_4) рассмотрены. В полученных графах нет вершины, окружение которой порождает P_4 . Поэтому в остальных связных 4-регулярных локальносвязных графах окружение каждой вершины порождает граф P_4 . Лемма 3 доказана.

Теорема 4. Для любого $n \geq 5$ существует ровно один (с точностью до изоморфизма) связный 4-регулярный локальносвязный граф G_n и этот граф получается из простого цикла $C_n = (v_1, v_2, \dots, v_n, v_1)$ добавлением ребер $v_i v_{i+2}$, $i = 1, n-2$, $v_{n-1} v_1, v_n v_2$.

Доказательство. По лемме 3 возможна только одна из трех альтернатив (i), (ii), (iii). Первые две приводят к графам $G_5 = K_5$ и $G_6 = L(K_4)$.

Лемма 5. Пусть G — связный 4-регулярный локальносвязный граф, удовлетворяющий условию (iii) леммы 3. Для произвольной вершины v обозначим через $P = (w_1, w_2, w_3, w_4)$ простую цепь P_4 , индуцированную множеством $N(v)$. Тогда существует вершина $x \neq v$, смежная с w_1 и w_2 , и существует вершина $y \notin \{v, x\}$, смежная с w_3 и w_4 .

Доказательство леммы. Так как $\deg w_2 = 4$, то существует вершина $x \notin \{v\} \cup N(v)$, смежная с w_2 . Вершины x и w_1 смежны, так как иначе окружение $N(w_1)$ порождает несвязный граф. Аналогично, существует вершина $y \notin \{v\} \cup N(v)$, смежная с w_3 , и, следовательно, с w_4 . Покажем, что равенство $x = y$ невозможно.

Пусть $x = y$. Тогда множество $X = \{v, w_2, w_3, x\}$ является максимальным. Но граф $M(X)$ имеет изолированные вершины w_1, w_4 , что противоречит лемме 1. Лемма 5 доказана.

Продолжение доказательства теоремы 4. Пусть выполняется условие (iii), v_1 — произвольная вершина графа G . Подграф P_4 , индуцированный множеством $N(v_1)$, обозначим так: $G(N(v_1)) = (v_3, v_2, v_n, v_{n-1})$, где $n = |VG|$. По лемме 5 существует вершина $v_4 \neq v_1$, смежная с v_2, v_3 , и вершина $v_{n-2} \notin \{v_1, v_4\}$, смежная с v_{n-1}, v_n .

Применим лемму 5 к вершине v_2 и найдем вершину $v_5 \neq v_2$, смежную с v_3 и v_4 . Если $v_5 \neq v_{n-2}$ (при $n = 7$), то v_4 смежна с v_{n-1} (иначе $M(\{v_{n-2}\})$ будет несвязным) и $G \cong G_7$. Если $v_5 \neq v_{n-2}$, то применим лемму 5 к вершине v_3 .

Опишем i -й шаг процесса, $i = 1, n-6$. Применяем лемму 5 к вершине v_{i+1} , окружение которой индуцирует простую цепь вида $**v_{i+2}v_{i+3}$, и находим вершину v_{i+4} , смежную с $v_{i+2}v_{i+3}$. В результате этого степеней вершины $v_{i+2} (v_{i+3})$ станет равной 4(3). При $i = n-6$ новая вершина v_{i+4} совпадает с v_{n-2} и тогда необходимо существует ребро, соединяющее вершины $v_{i+3} = v_{n-3}$ и v_{n-1} (иначе $M(\{v_{n-2}\})$ будет несвязным). Очевидно, что описанный процесс приводит к графу G_n . Теорема 4 доказана.

Проблема. Найти явное описание r -регулярных локальносвязных графов при $r \geq 5$.

Эта проблема, как и решенная в работе задача, очевидным образом связана с широко известной проблемой Зыкова, которая заключается в выяснении существования регулярного графа, окружения всех вершин которого индуцируют подграф, изоморфный заданному графу. В теореме 4 содержится, в частности, решение проблемы Зыкова для связных графов порядка 4 (с описанием всех реализаций). Кроме того, рассматриваемая нами задача является продолжением исследований по выявлению свойств регулярных локальносвязных графов, проводимых П. Кикустом, Г. Хендри и др. (см. [3]). Так, было установлено, что

4-регулярные локальносвязные графы обладают более сильными свойствами, чем гамильтоновость. Этот и другие результаты такого типа содержатся в теореме 4.

Список литературы

1. Харари Ф. Теория графов. М., 1973.
2. Зыков А. А. Теория конечных графов. I. Новосибирск, 1969.
3. Нендгу G. R. T./Journ. Graph Theory. 1989. V. 13. № 2. P.257.

Поступила в редакцию 10.03.92.

УДК 517.929

Г. П. РАЗМЫСЛОВИЧ

К ПРОБЛЕМЕ ПОСТРОЕНИЯ РЕШЕНИЯ ЛИНЕЙНОЙ РЕГУЛЯРНОЙ СИСТЕМЫ

A new method of the solution of linear singular system with the regular pencil of matrices is described.

Рассмотрим не разрешенную относительно производной неоднородную систему обыкновенных дифференциальных уравнений

$$A_0 \dot{x}(t) + Ax(t) = f(t), \quad t \geq 0, \quad (1)$$

где A_0, A – постоянные $n \times n$ – матрицы, $f(t)$ – заданная n -мерная вектор-функция, $x(t)$ – n -вектор решения.

Проблема построения решения системы (1) исследовалась во многих работах, в частности в работах [1–5]. Например, в [1] общее решение системы (1) строится на основании теории элементарных делителей пучка матриц $\lambda A_0 + A$, в [2] решение в замкнутой форме получено с привлечением специальной матрицы – матрицы Дразина; конструктивным решением посвящены работы [3, 4, 5]: с использованием цепочек полуобратных матриц [3, 5] или численных методов [4, 5]. Предлагаемый ниже способ построения решения системы (1) не требует k -раз дифференцируемости функции $f(t)$ ($k = \text{ind} A_0$, см., напр., [2, 7]) и не требует сложных математических вычислений.

Начальное состояние $x(0) = x_0$ системы (1) назовем допустимым, если система (1) имеет хотя бы одно решение. Если для каждого допустимого начального состояния система (1) имеет единственное решение, то такую систему (1) будем называть совместной.

Ясно, что если матрица A_0 невырождена, то система (1) совместна и любое начальное состояние $x_0 \in C^n$ является допустимым. В общем случае известно [2], что система (1) совместна тогда и только тогда, когда пучок матриц $\lambda A_0 + A$ является регулярным, т. е. существует число $\lambda^* \in C$ такое, что матрица $\lambda^* A_0 + A$ является невырожденной. Систему (1) с регулярным пучком матриц $\lambda A_0 + A$ назовем регулярной.

Рассмотрим регулярную систему (1), т. е. предположим, что существует $\lambda^* \in C$ (без ограничения общности, считаем, что $\lambda^* \neq 0$), такое что $\det(\lambda^* A_0 + A) \neq 0$. Построим матрицы

$$B = [\lambda^* A_0 + A]^{-1} A, \quad D = \alpha_m E_n - \sum_{j=0}^{m-2} \sum_{i=1}^{m-1-j} \alpha_j B^i,$$

$$D_1 = \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{m-1-j} \alpha_j B^i [\lambda^* A_0 + A]^{-1},$$

где $\lambda_j, j = \overline{0, m}$ – коэффициенты аннулирующего многочлена матрицы B , т. е.

$$\Delta(\lambda) = \sum_{\tau=0}^m \alpha_\tau \lambda^{m-\tau}, \quad \Delta(B) = 0,$$

а E_n – единичная $n \times n$ -матрица. Кроме этого, обозначим через ρ сумму коэффициентов многочлена $\Delta(\lambda)$, т. е. $\rho = \sum_{\tau=0}^m \alpha_\tau$.

Теорема 1. Если число $\rho \neq 0$, то любое начальное состояние $x(0) = x_0$ системы (1) является допустимым и ее решение, соответствующее заданному начальному состоянию x_0 , описывается формулой

$$x(t) = \exp(\mu Dt)x_0 + \mu \int_0^t \exp(\mu D(t-\tau)) D_1 f(\tau) d\tau, \quad (2)$$

где $\mu = \lambda^* / \rho$.

Доказательство следует из непосредственной подстановки выражения (2) в эквивалентную исходной систему

$$\dot{x}(t) = Bx(t) - \lambda^* Vx(t) + \lambda^* [\lambda^* A_0 + A]^{-1} f(t), \quad t \geq 0 \quad (3)$$

и использования того факта, что $\Delta(\lambda)$ – аннулирующий многочлен матрицы B .

Пусть $\rho = 0$. В этом случае всякое решение $x(t)$, $t \geq 0$, дифференциальной системы (1), соответствующее некоторой функции $f(t)$, $t \geq 0$, удовлетворяет алгебраической системе линейных уравнений

$$Dx(t) + D_1 f(t) = 0, \quad t \geq 0. \quad (4)$$

Отметим, что, во-первых, условие (4) является необходимым, но не достаточным для того, чтобы $x(t)$, $t \geq 0$, было решением системы (1); во-вторых, из соотношения (4) следует, что в этом случае решение $x(t)$ и функция $f(t)$, $t \geq 0$ должны принадлежать одному классу гладкости и, в-третьих, все допустимые начальные состояния $x(0) = x_0$ системы (1) удовлетворяют соотношению

$$Dx_0 + D_1 f(0) = 0. \quad (5)$$

Рассмотрим систему (4). Так как матрица D вырождена, то, следуя [3], система (4) разрешима тогда и только тогда, когда функция $f(t)$ удовлетворяет соотношению

$$D_1 f(t) = DD^{-1} D_1 f(t), \quad t \geq 0, \quad (6)$$

и все ее решения описываются формулой

$$x(t) = -D^{-1} D_1 f(t) + (E_n - D^{-1} D) Qu(t), \quad t \geq 0, \quad (7)$$

где D^{-1} – полубратная матрица матрицы D , Q – $n \times n_1$ -матрица перестановок ($n_1 = \text{rank}(E_n - D^{-1} D) = n - \text{rank } D$) такая, что матрица $(E_n - D^{-1} D)Q$ состоит из линейно независимых столбцов матрицы $E_n - D^{-1} D$, а $u(t)$ – произвольная n_1 -вектор-функция. Все решения системы (1) содержатся в (7). Для того чтобы выделить из семейства (7) решения системы (1), выберем функцию $u(t)$ из решения дифференциального уравнения

$$\begin{aligned} A_0 (E_n - D^{-1} D) Q \dot{u}(t) + A (E_n - D^{-1} D) Qu(t) = \\ = A_0 D^{-1} D_1 f(t) + (E_n + AD^{-1} D_1) f(t). \end{aligned} \quad (8)$$

В силу того, что система (1) совместна, из соотношений (4), (6), (7) следует, что существует невырожденная матрица T такая, что

$$TA_0 (E_n - D^{-1} D) Q = \begin{bmatrix} \bar{A}_0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$TA (E_n - D^{-1} D) Q = \begin{bmatrix} \bar{A} \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$T(A_0 D^{-1} D_1 f(t) + (E_n + AD^{-1} D_1) f(t)) = \begin{bmatrix} \varphi(t) \\ 0 \end{bmatrix},$$

где \bar{A}_0 , \bar{A} – $n_1 \times n_1$ -матрицы, причем \bar{A}_0 – матрица полного ранга; $\varphi(t)$ – n_1 -мерная вектор-функция, и система (8) эквивалентна системе $\bar{A}_0 \dot{u}(t) + \bar{A} u(t) = \varphi(t)$, $t \geq 0$, общее решение которой может быть легко получено. Таким образом, верна

Теорема 2. Пусть $\rho = 0$. Тогда регулярная система (1) разрешима тогда и только тогда, когда функция $f(t)$, $t \geq 0$, удовлетворяет условию (6) и общее решение системы (1) имеет вид:

$$\begin{aligned} x(t) = (E_n - D^{-1} D) Q \exp(-\bar{A}_0^{-1} \bar{A} t) q + \\ + \int_0^t (E_n - D^{-1} D) Q \exp(-\bar{A}_0^{-1} \bar{A} (t-\tau)) \bar{A}_0^{-1} \varphi(\tau) d\tau - D^{-1} D_1 f(t), \quad t \geq 0, \end{aligned}$$

где q – n_1 -мерный вектор произвольных постоянных, $a \in [0, +\infty)$.

Задача Коши $A_0 \dot{x}(t) + Ax(t) = f(t)$, $t \geq 0$, $x(0) = x_0$, разрешима тогда и только тогда, когда $f(t)$ удовлетворяет условию (6), а вектор $x_0 = (E_n - D^{-1}A)Qq_0 - D^{-1}D_1 f(0)$, для некоторого $q_0 \in C^{n1}$. Решение этой задачи Коши описывается формулой (9), положив $q = q_0$, $a = 0$.

В заключение построим решение системы (1), при условии, что [2]

$$A_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 \\ -1 & 0 & 2 \\ 2 & 3 & 2 \end{bmatrix}, A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ -27 & -22 & -17 \\ 18 & 14 & 10 \end{bmatrix}, f(t) = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (10)$$

Согласно методу, изложенному выше, проверим, является ли пучок $\lambda A_0 + A$ регулярным. Легко видеть, что если $\lambda^* = 1$, то $\det(\lambda^* A_0 + A) = 27$ и, следовательно, система (1), (10) совместна. Построим матрицы B , D и D_1 :

$$B = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 6 & 5 & 4 \\ -6 & -2 & 2 \\ 3 & -2 & -7 \end{bmatrix}, D = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} -18 & -14 & -10 \\ 18 & 14 & 10 \\ -9 & -7 & -5 \end{bmatrix},$$

$$D_1 = \frac{1}{9} \begin{bmatrix} -2 & -2 & 0 \\ 2 & 2 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Так как характеристический многочлен матрицы B имеет вид $\Delta(\lambda) = -\lambda^3 - \lambda + 2$ и $\rho = 0$, то все решения системы (1), (10) удовлетворяют алгебраическому уравнению

$$9x_1(t) + 7x_2(t) + 5x_3(t) + 1 = 0, t \geq 0. \quad (11)$$

Разрешив (11) относительно $x(t)$, $t \geq 0$, имеем

$$x(t) = \begin{bmatrix} -1/9 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -7/9 & -5/9 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} u(t), t \geq 0,$$

где $u(t)$ – 2-мерная вектор-функция удовлетворяет уравнению

$$\begin{bmatrix} 7/9 & 23/9 \\ 13/9 & 8/9 \end{bmatrix} \dot{u}(t) + \begin{bmatrix} -1 & -2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} u(t) = \begin{bmatrix} -1/2 \\ 2 \end{bmatrix}, t \geq 0. \quad (12)$$

Из (12) следует, что

$$u(t) = \begin{bmatrix} -2 & -8e^{2/3t} \\ 1 & 13e^{2/3t} \end{bmatrix} q + \begin{bmatrix} 2t \\ -t \end{bmatrix}, q \in C^2.$$

Окончательно общее решение системы (1), (10) имеет вид:

$$x(t) = \begin{bmatrix} 1 & -e^{2/3t} \\ -2 & -8e^{2/3t} \\ 1 & 13e^{2/3t} \end{bmatrix} q + \begin{bmatrix} -t - 1/9 \\ 2t \\ -t \end{bmatrix},$$

где q – 2-мерный вектор произвольных постоянных.

Список литературы

1. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. М., 1988.
2. Campbell S. L., Meyer C. D., Rose N. J. // SIAM Journ. Appl. Math. 1976. V. 31. № 3. P. 411.
3. Бояринцев Ю. Е. Регулярные системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений. Новосибирск, 1980.
4. Чистяков В. Ф. // Вырожденные системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Новосибирск, 1982. С. 37.
5. Бояринцев Ю. Е. Методы решения вырожденных систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Новосибирск, 1988.
6. Campbell S. L., Meyer C. D. Generalized Inverses of Linear Transformations. London, 1979.
7. Крахотко В. В., Размыслович Г. П. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1988. № 2. С. 76.

Поступила в редакцию 25. 03.92.

РЕФЕРАТЫ

УДК 539.12

Ф е р а н ч у к И. Д., Л и С у а н Х а й (СРВ). Операторный метод в задаче о взаимодействии системы двухуровневых атомов с одномодовым квантовым полем // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

Построены выражения для энергетических уровней системы двухуровневых атомов, взаимодействующих с квантовым полем, которые являются равномерно пригодными при любом соотношении между плотностью атомов и длиной волны резонансного излучения. Исследованы условия возникновения фазового перехода в системе.

Библиогр. 9 назв.

УДК 536

С и р о т а Н. Н. Третий закон термодинамики. II // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

На основе анализа основных положений третьего закона термодинамики рассмотрены магнето- и электрокалорический эффекты, температурный коэффициент поверхностной энергии, флуктуации энергии и среднеквадратичные динамические смещения атомов, теплопроводность твердых тел, энтропия смещения растворов, упругость паров веществ, структура растворов и пределы растворимости компонентов вблизи температуры абсолютного нуля. Анализируются причины отклонения систем от третьего закона термодинамики при $T \rightarrow 0$.

Библиогр. 14 назв.

УДК 621.377.7

Г р у з и н с к и й В. В., К у х т о А. В., Х о н Б е н И. (КНДР). Генерационные и спектрально-люминесцентные свойства некоторых новых производных нафталимида // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

Для четырех новых производных нафталимида изучены спектры поглощения, флуоресценции, квантовый выход и длительность флуоресценции. Установлено, что для них наблюдается характерная зависимость квантового выхода флуоресценции от положения максимума спектра флуоресценции в различных растворителях. Получена генерация излучения на всех соединениях при накачке второй гармоникой лазера на сапфире с титаном. Показано, что КПД генерации нафталимидов существенно зависит от длины волны накачки, максимум этой зависимости находится на длинноволновом крыле спектра поглощения. Установлено, что такое поведение обусловлено как универсальными, так и специфическими (синглет-синглетное поглощение) причинами.

Библиогр. 10 назв., ил. 3, табл. 1.

УДК 535.37

Б о й к о в В. Н., Ж у р а в л е в а Ю. В., К о я в а В. Т., К р а с о в с к и й А. Н., Ш а л а х о в с к а я Г. В., У м р е й к о Д. С. Корреляции в положении и форме линий низкотемпературных спектров люминесценции ураниловых кристаллов с островной структурой // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

Изучены контуры и ширины линий спектров люминесценции ураниловых кристаллов с островной структурой при температуре 15 К в областях оптических переходов $\nu^s(n)$ и $\nu^s(n) - \nu$ кол., ($n = 0, 1, 2, 3$, ν кол. = $700 - 850 \text{ см}^{-1}$) на валентные колебательные уровни ионов уранила и колебательные уровни лигандов соответственно. Значительное уширение большинства вибронных линий $\nu(0) - \nu$ кол. по отношению к соответствующим им линиям комбинационного рассеивания света (КР) свидетельствует о решающей роли межионного резонанса однотипных колебаний в формировании флуоресцентного контура. В этом резонансном взаимодействии, по-видимому, существенна роль низкочастотных фононных состояний, поскольку положение бесфононной линии (КР) отвечает коротковолновому флангу контура для наиболее широких ($4 - 6 \text{ см}^{-1}$) флуоресцентных линий. Рассматриваются корреляции ширины и контуров $\nu^s(n)$ и $\nu^s(n) - \nu^1$ кол., обусловленные указанным резонансом колебаний.

Библиогр. 10 назв., ил. 1, табл. 2.

УДК 535.33

П о с л е д о в и ч М. Р., Э л ь-Н а с с е р Х. (Иордания). Спектроскопические свойства безводных дисульфатоуранилатов щелочных металлов // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

На основе изучения низкотемпературных спектров люминесценции и спектров инфракрасного поглощения установлено наличие в дисульфатоуранилатах щелочных металлов различных по пространственному строению уранилсульфатных комплексов.

Библиогр. 4 назв., ил. 2, табл. 2.

УДК 621.315.592:546.28

Новиков А. П., Урбанович А. И., Игуен Ван Конг (СРВ), Хадарина О. С. Температурные поля в полупроводниковых кристаллических пластинах при ионной имплантации // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

Приведены результаты расчета нестационарных температурных полей в полупроводниковых пластинах и их сравнительный анализ с учетом и без учета зависимости κ и σ от температуры для ионных пучков с переменной мощностью.

Библиогр. 5 назв., ил. 3.

УДК 533.37

Попечиц В. И. Химическая устойчивость растворов трикарбоцианиновых красителей // Вестн. Белорус. ун-та. Сер.1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

По изменениям спектров поглощения со временем исследована химическая стабильность ряда новых полиметиновых лазерных красителей в органических растворителях. Показано, что необратимая деструкция красителей в растворах происходит в результате химического взаимодействия со щелочными примесями. Даны практические рекомендации по использованию растворов исследованных красителей.

Библиогр. 4 назв., ил. 3, табл. 1.

УДК 621.373.826

Зенченко С. А., Лешкевич С. В. Резонатор для многопучкового лазера // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

В работе приведены результаты теоретического определения областей устойчивости некоторых типов открытых резонаторов с собирающей линзой между зеркалами с точки зрения применения их в многопучковом лазере. Предлагается резонатор, обладающий пониженной чувствительностью к разъюстировке, позволяющий в широких пределах изменять пространственные характеристики излучения. Сообщается о реализации трехпучкового лазера с таким резонатором, в котором роль линзы выполняет тепловая неоднородность активной среды.

Библиогр. 5 назв., ил. 2.

УДК 577.3

Грушевская Г. В., Хмельницкий А. И. Протекание диффузионных процессов в пространственно-распределенных системах типа антиген—антитело // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

Проведено математическое моделирование реакции «антиген—антитело» на поверхности с учетом броуновского движения компонент реакции. Показано, что в пространственно-распределенной системе в иммунных реакциях вещества расходуются неравномерно, что приводит к возникновению осциллирующей концентрации компонент.

Библиогр. 4 назв., ил. 2.

УДК 517.977

Абдурахимов А. О. Оптимизация линейной системы по принципу получения гарантированного результата // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

Линейная нестационарная динамическая система оптимизируется по совокупности квадратичных терминальных функционалов с целью получения гарантированного результата. Приводится пакетный принцип максимума.

Библиогр. 4 назв.

УДК 517.977

Игуен Дык Хиен (Вьетнам). Адаптивный метод решения сепарабельных задач кусочно-линейного программирования // Вестн. Белорус. ун-та. Сер.1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

Рассматривается сепарабельная задача кусочно-линейного программирования. На основе адаптивного метода были получены необходимые и достаточные условия локальной оптимальности и ϵ -локальной оптимальности для допустимого плана.

Библиогр. 1 назв.

УДК 517.925.7

Громак В. И., Луцевич Ж. А. Пелинейное уравнение, связанное с уравнением

CONTENTS

PHYSICS

<i>Feranchuk I. O., Ly Xuan Hai.</i> Operator method in the problem of the system of Two-level atoms interaction with Single-mode quantum field	3
<i>Sirota N. N.</i> The third law of thermodynamics II	7
<i>Gruzinskii V. V., Kukhto A. V., Khon Ben Y.</i> Lasing and spectral and luminescence properties of some new naphthalimide derivatives	17
<i>Boikov V. N., Zhuravleva Y. V., Kojava V. T., Krasovski A. N., Shalakhovskaja G. V., Umreiko D. S.</i> The correlation in contours and band positions of low temperature luminescence spectra of uranyl crystals with an island structure	21
<i>Posledovitch M. R., Al-Nasser Hussam.</i> Spectroscopic properties of dehydrated disulphate uranylates of alkali metals	26
<i>Novikov A. P., Urbanovich A. I., Nguen Van Kong, Khadarina O. S.</i> Thermal fields in semiconductor crystal plates during ion implantation	32
<i>Popetchits V. I.</i> Chemical stability of three carbocyanine dyes solutions	36
<i>Zenchenko S. A., Leshkevich S. V.</i> The resonator for multibeam laser	41
<i>Grushevskaia G. V., Khmelniisky A. I.</i> Diffusive processes in spaced systems as antigen—antibody	44

MATHEMATICS, MECHANICS

<i>Abdurahimov A. O.</i> Linear system optimization based on the principle of guaranteed result	48
<i>Nguen Dyk Hieu.</i> An Adaptive method of solution of separable problems of piecewise linear programming	51
<i>Gromak V. I., Lucevitch G. A.</i> Non-linear equation connected with the Sine-Gordon equation and third Painleve equation	55
<i>Matafov V. I., Sabyinich L. V.</i> Investigation of the movable singularities of the non-autonomy Hamilton's systems with the cubic nonlinearities	59
<i>Tretjakova L. G.</i> To the problem of double periodical solutions of the quasilinear telegraph equation	63
<i>Kuleyshov A. A., Mohammad Shami Hasso.</i> The classical problem of moments and some problems of the theory of linear self-adjoint operators	67
<i>Isachenko A. N., Fedenja O. A.</i> The cut polytope	71
<i>Zverovich V. E., Zverovich I. E., Orlovich Y. L.</i> Catalogue of connected 4-regular locally-connected graphs	74
<i>Razmyslovitch G. P.</i> On the problem of the construction of solution of linear regular system	76

Sine-Gordon, и третье уравнение Пенлеве // Вестн. Белорус. ун-та. Сер.1: Физ. Мат. Мех. 1992. № 2.

В работе рассматривается уравнение в частных производных

$$u_{xt} = ae^u + be^{-u} + xt (ce^{2u} + de^{-2u}) \quad (1)$$

и его двухмерный аналог в связи с установленной связью между его решениями и третьим уравнением Пенлеве. Построены бэклунд-преобразования и точные решения уравнения (1).

Библиогр. 6 назв.

УДК 517.925.6

М а т а т о в В. И., С а б ы н и ч Л. В. Исследование подвижных особенностей неавтономных систем Гамильтона с кубическими нелинейностями // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

Найдены необходимые и достаточные условия однозначности подвижных особых точек для неавтономных систем Гамильтона с кубическими нелинейностями.

Библиогр. 5 назв.

УДК 517.956.3

Т р е т ь я к о в а Л. Г. К задаче о двоякопериодических решениях квазилинейного телеграфного уравнения // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

Получена теорема о существовании и единственности двоякопериодических обобщенных решений для квазилинейного телеграфного уравнения в пространстве непрерывных функций.

Библиогр. 8 назв.

УДК 517.948.35

К у л е ш о в А. А., М у х а м м а д Ш а м и Х а с с о. Классическая проблема моментов и некоторые задачи теории линейных самосопряженных операторов // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

В терминах моментной последовательности $\omega \Delta^n$, построенной по ограниченному самосопряженному оператору A в сепарабельном гильбертовом пространстве H и состоянию ω на $L(H)$, развивается классический подход к изучению спектральных свойств оператора A .

Библиогр. 6 назв.

УДК 519.10

И с а ч е н к о А. Н., Ф е д е н я О. А. Многогранник разрезов графа // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

Вводится в рассмотрение многогранник разрезов графа. Исследуется многогранник разрезов цикла. Установлены его размерность и множество вершин. Описаны семейства гиперграней.

Библиогр. 6 назв.

УДК 519.1

З в е р о в и ч В. Э., З в е р о в и ч И. Э., О р л о в и ч Ю. Л. Каталог связанных 4-регулярных локальносвязных графов // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

Граф называется локальносвязным, если окружение каждой его вершины порождает связный граф. В работе найдены все связные 4-регулярные локальносвязные графы.

Библиогр. 3 назв.

УДК 517.929

Р а з м ы с л о в и ч Г. П. К проблеме построения решения линейной регулярной системы // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1: Физ. Мат. Мех. 1993. № 2.

Указывается новый метод построения решения линейной регулярной системы.

Библиогр. 7 назв.