

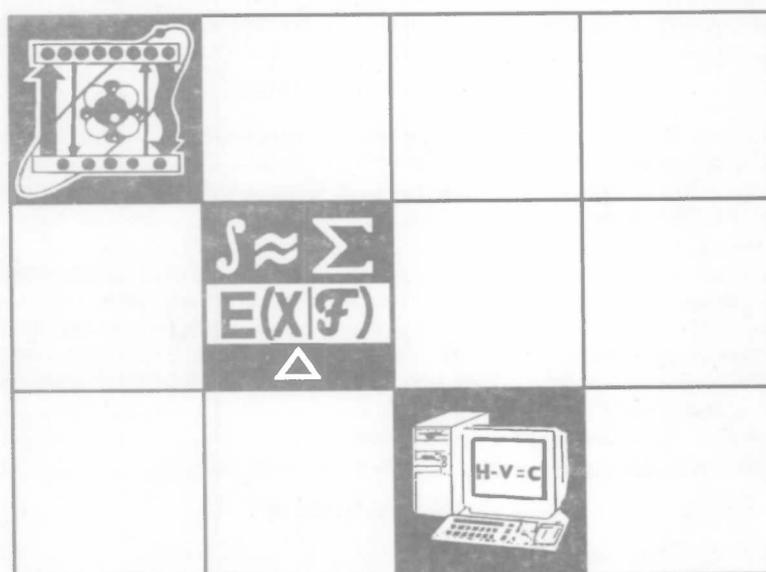
ВЕСТНИК

Белорусского государственного
университета

СЕРИЯ 1

Физика
Математика
Информатика

2/2000



СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

<i>Губарь Н.Б., Урбанович А.И.</i> Вырожденное попутное двухволновое смещение в кубических средах с молекулярными либрациями.....	5
<i>Миксюк Ю.И., Толстик А.Л.</i> Формирование нелинейно-оптического отклика молекулярных систем с участием фотопротолитических процессов.....	11
<i>Станкевич А.И., Могильный В.В.</i> Термоизомеризация азометинов на основе 9-формилантрацена в слоях полиметилметакрилата.....	15
<i>Леонтьев А.В., Иванов А.И.</i> Исследование продуктов травления пленок ПММА ионами кислорода.....	19
<i>Василевская Н.В., Хмельницкий А.И., Черенкевич С.Н., Кулинкович О.Г., Сидерко В.М., Эпштейн О.Л., Лобан В.А.</i> Образование агрегатов поли-N-изопропилакриламида в липидных бислоях.....	23
<i>Воропай Е.С., Самцов М.П., Каплевский К.Н., Чалов В.Н., Луговский А.П.</i> Спектрально-люминесцентные характеристики симметричного трикарбоцианинового красителя (ТИКС) в растворах.....	28
<i>Соловьев В.С., Гусаков Г.А., Крекотень О.В., Семенов Е.А., Воропай Е.С., Самцов М.П., Деменченко А.Н.</i> Состав и пространственное распределение атомов примесей в монокристаллах синтетического алмаза.....	31
<i>Комаров Ф.Ф., Людчик О.Р., Петров С.А., Соловьев В.С.</i> Воздействие на кремний ускоренных потоков лазерно-эрозивной плазмы тяжелых металлов.....	38
<i>Гречаников Э.Е., Шепелевич В.Г.</i> Структура и электрические свойства сплава Вi-15 ат.% Sb, легированного серой и германием.....	41
<i>Дудчик Ю.И., Кольчевский Н.Н., Комаров Ф.Ф.</i> Формирование микрочулок жесткого рентгеновского излучения при помощи преломляющей линзы.....	43

МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА

<i>Габасова О.Р.</i> Оптимальная политика фирмы с двумя технологическими способами производства.....	49
<i>Мирончик В.М., Саечников В.А.</i> Программные средства полуавтоматической оцифровки картографической информации в геоинформационных системах.....	52
<i>Бойко А.В.</i> Стабилизация двойного перевернутого маятника на подвижной платформе ограниченными управлениями.....	58
<i>Миروتин А.Р.</i> Генераторы голоморфных полугрупп как функции генераторов C_n -полугрупп.....	61
<i>Мельников О.И., Шилак А.Н.</i> Построение транзитивной редукции ациклического орграфа.....	65
<i>Дегтяренко Н.А., Зверович Э.И.</i> Нахождение спектра и собственных функций одного сингулярного интегрального оператора с эллиптической функцией в качестве ядра.....	68

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

<i>Поклонский Н.А.</i> Инерционное экранирование индукционного электрического поля в резисторе при включении его в сверхпроводящую цепь.....	73
<i>Корнийчук М. Б., Анищик В. М., Чижик С. А.</i> Изменение топографии поверхности кобальта, имплантированного ионами бора.....	76
<i>Зверович И.Э.</i> Бипороговые графы.....	78
<i>Мататова И. В., Прокашева В. А.</i> О подвижных особенностях неавтономных кубических систем двух дифференциальных уравнений специального вида.....	80
<i>Кричаевец Е. Я., Мататов В. И.</i> О подвижных особенностях системы двух дифференциальных уравнений с рациональными правыми частями специального вида.....	83
<i>Аль-Дабабсах Авни Файез.</i> (Иордания). О подформации Фраттины формаций конечных n -арных групп.....	86
<i>Котов В.М.</i> Одна задача теории расписаний.....	87
<i>Семенчук В.Н.</i> Конечные группы с заданной системой подгрупп.....	89

НАШИ ЮБИЛЯРЫ

Александр Петрович Хапалюк.....	92
---------------------------------	----

ВЕСТНИК

**Белорусского государственного
университета**

НАУЧНО-ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Издается с января 1969 года
один раз в четыре месяца

СЕРИЯ 1

**Физика
Математика
Информатика**

2/2000

Май



МИНСК
"УНІВЕРСІТЭЦКАЕ"

Главный редактор В.Г. РУДЬ

Редакционная коллегия серии:

П.Д. КУХАРЧИК (*ответственный редактор*),
В.М. АНИЩИК, 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, Э.И. ЗВЕРОВИЧ, Ф.Ф. КОМАРОВ,
А.И. КОМЯК, В.И. КОРЗЮК, М.Д. МАРТЫНЕНКО, В.И. МИРОНЕНКО,
С.Г. МУЛЯРЧИК, И.В. СОВПЕЛЬ, А.К. ФЕДОТОВ, А.Ф. ЧЕРНЯВСКИЙ,
Н.И. ЮРЧУК

Учредитель:
Белорусский государственный университет
Регистрационный №805

ВЕСТНИК БЕЛОРУССКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА
Серия 1: Физ. Мат. Информ. 2000. № 2

Редактор *И.А. Лешкевич*
Художественный редактор *В.Г. Мищенко*
Технический редактор и корректор *Г.И. Хмарун*

Набор и верстка выполнены в редакции журнала *Ю.И. Денисовым*

Подписано в печать 02.06.2000. Формат 70x108 1/16. Бумага офс. Печать офс. Усл. печ. л. 8,4. Усл. кр.-отт. 8,92. Уч.-изд. л. 10,28. Тираж 480 экз. Заказ 434.
Цена 250 р.

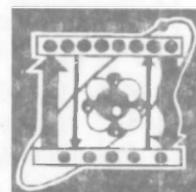
Издательство "Універстацкае", 220048, Минск, пр.Машерова, 11.
Адрес редакции: 220080, Минск, Университетский городок, тел. 206-64-52.

Отпечатано с готовых диапозитивов заказчика в Издательском центре БГУ.
220030, Минск, ул. Красноармейская, 6.

ПОЗДРАВЛЯЕМ
профессора
Александра Владиславовича
КОЗУЛИНА
с избранием на должность ректора
Белорусского
государственного университета.

Желаем крепкого здоровья,
плодотворного труда,
творческих успехов
на благо нашего университета.

*Редакция и редколлегии
журнала «Вестник БГУ»*



УДК 535.34

Н.Б. ГУБАРЬ, А.И. УРБАНОВИЧ

ВЫРОЖДЕННОЕ ПОПУТНОЕ ДВУХВОЛНОВОЕ СМЕЩЕНИЕ В КУБИЧЕСКИХ СРЕДАХ С МОЛЕКУЛЯРНЫМИ ЛИБРАЦИЯМИ

In this work we have investigated the degenerate co-directional two-wave mixing (TWM) process of ultrashort pulses in cubic media under simultaneous observation of orientational Kerr effect and molecular librations. We have obtained equations describing the TWM-process and made their numerical simulations.

В первых работах по нестационарному частотно-вырожденному взаимодействию ультракоротких импульсов (УКИ) света в нелинейных средах исследовалась возможность энергообмена между ними. В результате было показано, что в средах с локальным откликом при стационарном взаимодействии энергообмен в вырожденном случае невозможен [1,2]. Однако в нестационарном режиме, как установлено в [3,4], такой энергообмен возможен и при определенных условиях может приводить к эффективной перекачке энергии от одного импульса к другому. Попутное двухволновое смешение (ДВС) в керровских средах (т.е. в средах с кубической нелинейностью) исследовано в [5–9].

Известно, что в среде, состоящей из анизотропных молекул, в нелинейный отклик дают вклад молекулярные либрации [10,11]. Первое упоминание о либрациях как особом типе демпфированного молекулярного движения было сделано в [12]. В сильном электрическом поле вектор поляризации, обусловленный либрационными движениями, осуществляет ангармонические колебания с частотой ω . В [13] было установлено, что либрации молекул могут наблюдаться в жидкостях, состоящих из несферических молекул с несимметричной линейной поляризуемостью, поскольку либрационный вклад в показатель преломления зависит от разности поляризуемостей молекулы поперек и вдоль ее оси, которая для сферически симметричных молекул равна нулю.

В жидкостях с анизотропными молекулами в сильных электрических полях одновременно наблюдаются и ориентационный эффект Керра, и молекулярные либрации. В работах [12–16] было исследовано многоволновое смешение и нестационарный энергообмен (НЭО) между ультракороткими импульсами в керровских средах с учетом либраций молекул. В частности, показано, что либрации могут существенно влиять на взаимодействие импульсов. Они вызывают модуляцию огибающей в виде серий пиков разной интенсивности с длительностью, коррелирующей с периодом либраций t_l . В случае компрессии импульсов при встречном ДВС либрации могут приво-

дуть к возникновению узкого пика на переднем фронте, причем пиковая интенсивность увеличивается почти в 5 раз, а длительность импульса уменьшается в 10 раз по сравнению с входными значениями. Режим оптимальной компрессии достигим при некотором определенном соотношении времени релаксации либраций t_r и длительности входных импульсов t_p .

В данной работе проведено подробное теоретическое исследование попутного вырожденного ДВС в кубических средах с учетом либраций молекул. Получены уравнения, описывающие перекачку энергии между двумя импульсами. Проанализированы выражения для керровского ориентационного, либрационного и интерференционного вкладов в энергообмен между импульсами. Проведено численное моделирование полученных выражений для различных параметров среды и входного излучения.

Зададим поле излучения в среде E в виде суммы двух УКИ с медленно изменяющимися амплитудами $E_1(z, t)$ и $E_2(z, t)$:

$$E = E_1 \exp(ik_1 z - i\omega t) + E_2 \exp(ik_2 z - i\omega t) + \text{к.с.}, \quad (1)$$

здесь ω и k_j – частота и проекции волновых векторов импульсов на ось z . Для определенности положим, что мощный импульс E_1 (накачка) распространяется вдоль оси z , а слабый импульс E_2 (сигнал) – под некоторым малым углом к ней ($|E_1| \gg |E_2|$). $k_1 = (\omega/c)n_0$, n_0 – показатель преломления среды.

Вклады в показатель преломления вследствие ориентационного эффекта δn_k и молекулярных либраций δn_l описываются уравнениями [15]:

$$t_k \frac{d\delta n_k}{dt} + \delta n_k = n_{2k} |E|^2, \quad (2)$$

$$t_l^2 \frac{d^2 \delta n_l}{dt^2} + t_l \frac{d\delta n_l}{dt} + \delta n_l = n_{2l} |E|^2, \quad (3)$$

где t_k и t_r – время релаксации ориентационного и либрационного керровского откликов. $t_l = 1/\omega_l$ и ω_l – период и частота либраций, n_{2k} и n_{2l} – соответственно постоянные, учитывающие вклад в показатель преломления n_0 среды от каждого эффекта, $|E| = |E_1 + E_2|$.

Решения уравнений (2) и (3) имеют вид:

$$\delta n_k = \frac{n_{2k}}{t_k} \int_{-\infty}^{\infty} |E|^2 \exp\left(-\frac{t-t'}{t_k}\right) dt', \quad (4)$$

$$\delta n_l = \begin{cases} \frac{2n_{2l}}{\sqrt{t_r^2 - 4t_l^2}} \int_{-\infty}^t |E|^2 \exp\left(-\frac{t_r(t-t')}{2t_l^2}\right) \operatorname{sh}\left[\frac{\sqrt{t_r^2 - 4t_l^2}}{2t_l^2}(t-t')\right] dt' & \text{при } t_r > 2t_l, \\ \frac{2n_{2l}}{\sqrt{4t_l^2 - t_r^2}} \int_{-\infty}^t |E|^2 \exp\left(-\frac{t_r(t-t')}{2t_l^2}\right) \operatorname{sin}\left[\frac{\sqrt{4t_l^2 - t_r^2}}{2t_l^2}(t-t')\right] dt' & \text{при } t_r < 2t_l, \\ \frac{n_{2l}}{t_l^2} \int_{-\infty}^t |E|^2 (t-t') \exp\left(-\frac{t_r(t-t')}{2t_l^2}\right) dt' & \text{при } t_r = 2t_l. \end{cases} \quad (5)$$

Используя стандартную методику [17] и уравнения (4,5), получим укороченные уравнения для амплитуд:

$$\frac{dE_1}{dz} + \frac{1}{v} \frac{dE_1}{dt} = i\mu E_1 \int_0^t G(t-t') |E_1|^2 dt', \quad (6)$$

$$\frac{dE_2}{dz} + \frac{1}{v} \frac{dE_2}{dt} = i\mu \left(E_2 \int_0^t G(t-t') |E_1|^2 dt' + E_2 \int_0^t G(t-t') E_2 E_1^* dt' \right) \quad (7)$$

где

$$G(t-t') = G_k(t-t') + G_l(t-t'), \quad (8)$$

вклады в энергообмен между импульсами из-за эффектов Керра и либраций равны соответственно $G_k(t-t') = \exp[(t'-t)/t_k]$,

$$G_l(t-t') = v\eta \begin{cases} \frac{2}{b} \exp(-a(t-t')) \operatorname{sh}[ab(t-t')] & \text{при } \gamma > 2, \\ \frac{2}{b_0} \exp(-a(t-t')) \operatorname{sh}[ab_0(t-t')] & \text{при } \gamma < 2, \\ 2a(t-t') \exp(-a(t-t')) & \text{при } \gamma = 2, \end{cases} \quad (9)$$

$$\eta = \frac{n_{2l}}{t_{2k}}, \quad \gamma = \omega t_r, \quad v = \frac{t_r}{t_r}, \quad \mu = \frac{kn_{2k}}{n_0 t_k}, \quad a = \frac{\gamma}{2t_l}, \quad b = \sqrt{1-4/\gamma^2}, \quad b_0 = \sqrt{4/\gamma^2-1}.$$

Пусть E_1 и E_2 являются прямоугольными импульсами длительности t_p :

$$E_j(z, t) = \begin{cases} E_{j0}, & 0 \leq t \leq t_p, \\ 0, & t < 0, t > t_p. \end{cases} \quad (10)$$

Для тонких сред можно опустить временную производную в (6), (7). В приближении неистощающейся накачки уравнение (6) имеет решение:

$$E_1 = E_{10} \exp[i\mu A(t)z |E_{10}|^2], \quad (11)$$

где $A(t) = t_k (1 - \exp[-t/t_k]) + \eta v B$,

$$B = \begin{cases} \frac{1}{b} \left(\frac{1 - \exp[-\lambda_- t]}{\lambda_-} - \frac{1 - \exp[-\lambda_+ t]}{\lambda_+} \right) & \text{при } \gamma \geq 2, \\ \frac{2}{1+b^2} \frac{b_0 - [\sin ab_0 t + b_0 \cos ab_0 t] \exp[-at]}{ab_0} & \text{при } \gamma < 2, \\ 2 \frac{1 - (1+at) \exp[-at]}{a} & \text{при } \gamma = 2, \end{cases}$$

где $\lambda_{\pm} = a(1 \pm b)$. С помощью подстановки $E_2(z, t) = \varepsilon_2(z, t) \exp[i\mu A(t)z |E_{10}|^2]$ уравнение (7) для слабой волны принимает вид:

$$\frac{d\varepsilon_2}{dz} = i\mu |E_1|^2 \int_0^t G(t-t') \varepsilon_2 dt'. \quad (12)$$

Будем искать решение уравнения (12) методом последовательных приближений. Представим $\varepsilon_2(z, t)$ в виде ряда по степеням z :

$$\varepsilon_2(z, t) = E_{20}(t) [1 + a_1(t)z + a_2(t)z^2 + \dots]. \quad (13)$$

Подставляя (13) в (12), находим:

$$a_1(t) = i\mu |E_{10}|^2 \int_0^t G(t-t') dt', \quad (14)$$

$$\begin{aligned} a_2(t) &= (1/2) i\mu |E_{10}|^2 \int_0^t G(t-t') a_1(t') dt' = \\ &= -(1/2) \mu^2 |E_{10}|^4 \int_0^t G(t-t') \int_0^{t'} G(t'-t'') dt'' dt'. \end{aligned} \quad (15)$$

Подставляя (14), (15) в (13), найдем выражение для интенсивности слабого импульса в случае вырожденного ДВС:

$$|\varepsilon_2(z, t)|^2 \approx |E_{20}|^2 [1 + (|a_1|^2 - 2 a_2) z^2]. \quad (16)$$

С учетом (14), (15) можно записать:

$$\frac{|\varepsilon_2|^2}{|E_{20}|^2} \approx 1 + \mu^2 z^2 |E_{10}|^4 \left[\left(\int_0^t G(t-t') dt' \right)^2 - \int_0^t G(t-t') \int_0^{t'} G(t'-t'') dt'' dt' \right]. \quad (17)$$

Используя (8), найдем:

$$\frac{|\varepsilon_2|^2}{|E_{20}|^2} \approx 1 + \mu^2 z^2 |E_{10}|^4 [f_k(t) + f_l(t) + f_{int}(t)], \quad (18)$$

где $f_k(t)$, $f_l(t)$, $f_{int}(t)$ – керровский, либрационный и интерференционный вклады в энергообмен соответственно:

$$\begin{aligned} f_k(t) &= \left(\int_0^t G_k(t-t') dt' \right)^2 - \int_0^t G_k(t-t') \int_0^{t'} G_k(t'-t'') dt'' dt', \\ f_l(t) &= \left(\int_0^t G_l(t-t') dt' \right)^2 - \int_0^t G_l(t-t') \int_0^{t'} G_l(t'-t'') dt'' dt', \\ f_{int}(t) &= 2 \int_0^t G_k(t-t') dt' \cdot \int_0^t G_l(t-t') dt' - \int_0^t G_k(t-t') \int_0^{t'} G_l(t'-t'') dt'' dt' - \\ &\quad - \int_0^t G_l(t-t') \int_0^{t'} G_k(t'-t'') dt'' dt'. \end{aligned}$$

Подставив (9) в (17), получим выражения для вкладов в виде

$$f_k(t) = \frac{-1 + \exp[-t/t_k] + t/t_k \exp[-t/t_k]}{1/t_k^2} \exp[-t/t_k], \quad (19)$$

$$f(t) = v^2 \eta^2 B^2 - v^2 \eta^2 \times$$

$$\left[\begin{aligned} & \frac{1}{b^2 \lambda_-} \left[\frac{1-e^{-\lambda_- t}}{\lambda_-} - \frac{1-e^{-\lambda_+ t}}{\lambda_+} + \frac{e^{-at} \operatorname{sh} abt}{ab} - te^{-\lambda_- t} \right] - \\ & \frac{1}{b^2 \lambda_+} \left[\frac{1-e^{-\lambda_- t}}{\lambda_-} - \frac{1-e^{-\lambda_+ t}}{\lambda_+} - \frac{e^{-at} \operatorname{sh} abt}{ab} + te^{-\lambda_+ t} \right], \quad \gamma \geq 2, \\ & \frac{4e^{-at}}{ab_0^2(1+b_0^2)} \left\{ \frac{b_0}{a+ab_0^2} (b_0 e^{at} - \sin ab_0 t - b_0 \cos ab_0 t) - \frac{\sin^3 ab_0 t}{2ab_0} + \cos ab_0 t \right\} \times \\ & \times \left(\frac{t}{2} - \frac{\sin 2ab_0 t}{4ab_0} \right) - b_0 \sin ab_0 t \left(\frac{t}{2} + \frac{\sin 2ab_0 t}{4ab_0} \right) + b_0 \cos ab_0 t \frac{\sin^2 ab_0 t}{2ab_0} \Big\}, \quad \gamma \leq 2, \\ & \frac{\gamma^2}{t_1^2} \left[\frac{t}{a^3} (1-e^{-at}) - \frac{t^2 e^{-at}}{2a^2} - \frac{at-1+e^{-at}}{a^4} - \frac{t^3 e^{-at}}{6a} \right], \quad \gamma = 2, \end{aligned} \right] \quad (20)$$

$$f_{in}(t) = 2t_k (1 - \exp[-t/t_k]) \eta v B - \eta v \times$$

$$\left[\begin{aligned} & \frac{1}{b\lambda_-} \left[t_k - t_k e^{-t/t_k} - \frac{e^{-\lambda_- t} - e^{-t/t_k}}{ab - a + 1/t_k} \right] - \frac{1}{b\lambda_+} \left[t_k - t_k e^{-t/t_k} - \frac{e^{-\lambda_+ t} - e^{-t/t_k}}{1/t_k - ab - a} \right] - \\ & \frac{t_k}{b} \left[\frac{1-e^{-\lambda_- t}}{\lambda_-} - \frac{1-e^{-\lambda_+ t}}{\lambda_+} - \frac{e^{-\lambda_- t} - e^{-t/t_k}}{ab - a + 1/t_k} + \frac{e^{-\lambda_+ t} - e^{-t/t_k}}{1/t_k - ab - a} \right], \quad \gamma \geq 2, \\ & \frac{2}{ab_0(1+b_0^2)} \left[b_0 t_k (1 - e^{-t/t_k}) - \frac{e^{-at} [(1/t_k - a - ab_0^2) \sin ab_0 t - b_0/t_k \cos ab_0 t] + b_0/t_k e^{-t/t_k}}{(1/t_k - a)^2 + ab_0^2} \right] - \\ & \times \left[\frac{2t_k}{b_0} \left[\frac{ab_0 - a e^{-at} [\sin ab_0 t + b_0 \cos ab_0 t]}{a^2 + ab_0^2} + \frac{e^{-at} [(a - 1/t_k) \sin ab_0 t + ab_0 \cos ab_0 t] - ab_0 e^{-t/t_k}}{(1/t_k - a)^2 + ab_0^2} \right], \quad \gamma < 2, \right. \\ & \left. \frac{\gamma}{t_1} \left[\frac{t_k}{a^2} (1 - e^{-t/t_k}) - \frac{e^{-at} - e^{-t/t_k}}{1/t_k - a} \left(\frac{1}{a^2} - t t_k \right) - \frac{e^{-at} [(1/t_k - a)t - 1] + e^{-t/t_k}}{a(1/t_k - a)^2} \right] - \right. \\ & \left. \frac{\gamma t_k}{t_1} \left[\frac{1 - e^{-at}}{a} t - \frac{e^{-at} + at - 1}{a^2} + \frac{e^{-t/t_k} [(a - 1/t_k)t - 1] + e^{-at}}{(1/t_k - a)^2} \right], \quad \gamma = 2. \right. \end{aligned} \right] \quad (21)$$

Уравнения (19–21) исследовались методами численного моделирования для нормированной переменной $T = t/t_k$ и начальных условий вида (10).

На рис. 1 изображены временные зависимости f_k, f_l, f_{int} для различных γ при $T_l = 0,5, \eta = 0,1; \mu = 1$. Кривая $f_k(T)$, описывающая ориентационный эффект, имеет максимум в области $T \sim 1,6$ ($t \approx 1,6t_k$). Кривые $f_l(T)$ и $f_{int}(T)$, описывающие либрационный и интерференционный отклики, при $\gamma = 1$ имеют осциллирующий характер, но при $\gamma = 2; 3$ они повторяют вид кривой $f_k(T)$.

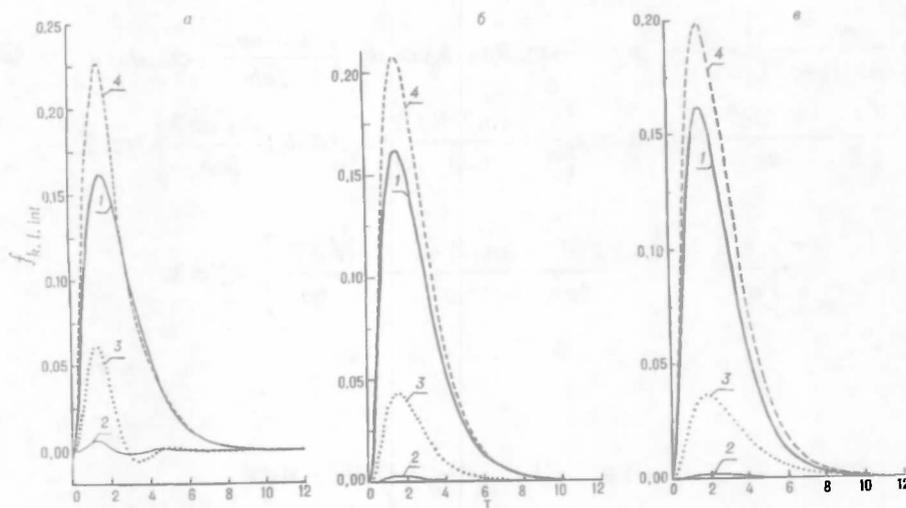


Рис. 1. Временная зависимость f_k, f_l, f_{int} для различных γ при $T_l=0,5; \eta=0,1; \mu=1$: а) $\gamma=1$, б) $\gamma=2$, в) $\gamma=3$; кривая (1) соответствует f_k , (2) — f_l ; (3) — f_{int} ; (4) — $f_k + f_l + f_{int}$

На рис. 2 представлены временные зависимости суммарного отклика $f_k + f_l + f_{int}$ для различных значений T_l . Видно, что при $\gamma=1$ все кривые имеют небольшие осцилляции на заднем фронте, тогда как при $\gamma=2; 3$ они монотонно уменьшаются до нуля. С уменьшением периода либраций T_l максимальная величина суммарного вклада возрастает.

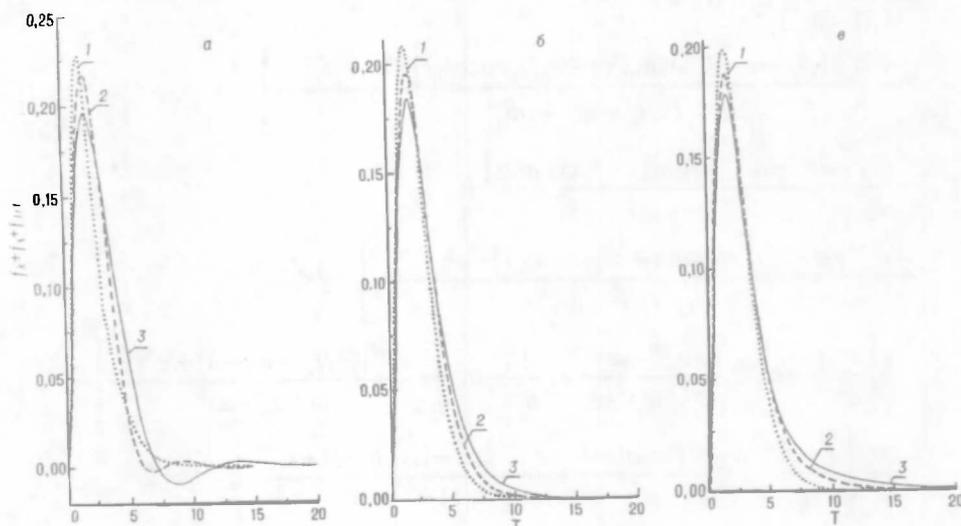


Рис. 2. Временная зависимость суммарного отклика $f_k + f_l + f_{int}$ различных γ и T_l при $\eta=0,1; \mu=1$: а) $\gamma=1$, б) $\gamma=2$, в) $\gamma=3$; кривая (1) соответствует $T_l=0,5$; (2) — 1,0; (3) — 1,5

Таким образом, сам вклад молекулярных либраций в энергообмен между импульсами при их вырожденном попутном двухволновом смешении не слишком велик в отличие от встречной геометрии взаимодействия. Это обусловлено тем, что при попутном взаимодействии разность набегов фаз между сильным и слабым импульсами мала, тем более для тонких сред, тогда как при встречном взаимодействии она значительна, и поэтому энергообмен возможен даже при одинаковых интенсивностях входных импульсов. Однако несмотря на то, что абсолютный вклад либрационных движений молекул при попутном смешении импульсов и не велик, его влияние в сочетании с ориентационным механизмом приводит к изменению пиковой интенсивности слабого импульса на 15–20% по сравнению со случаем, когда учитывается только ориентационный эффект Керра.

Авторы выражают благодарность профессору А.А.Афанасьеву за полезные дискуссии.

1. Чабан А.А. // ЖЭТФ. 1969. Т.57. Вып.1(10). С.1387.
2. Зельдович Б.Я. // Краткие сообщения по физике. 1970. N 5. С.20.
3. Rother W. // Zs.Naturforsch. 1970. Bd.25a. N 7. P.1120.
4. Rother W., Meyer H., Kaiser W. // Zs.Naturforsch. 1970. Bd.25a. N 7. P.1136.
5. Yeh P. // IEEE J.QE-25. 1989. N 3. P.484.
6. Yeh P. // JOSA B. 1986. Vol.3. N 5. P.747.
7. Mack M.E. // Appl.Phys.Lett. 1968. Vol.12. P.329.
8. Shokley R.C. // Appl.Phys.Lett.. 1982. Vol.40. N 11. P.930.
9. O'Meara T.R. // Opt.Engin.. 1982. Vol.21. N 2. P.271.
10. Cheung A.C., Rank D.M., Chiao R.Y., Townes C.H. // Phys.Rev.Lett. 1968. Vol.20. N 15. P.786.
11. Madden P.A., Tildesley D.J. // Mol.Phys. 1985. Vol.55. N 5. P.969.
12. Afanas'ev A.A., Gubar N.B., Samson B.A et al. // ICONO'95. 1995. Vol.1. P.164.
13. Afanas'ev A.A., Gubar N.B., Samson B.A. et al. // SPIE. 1995. Vol.2800. P.232.
14. Apanasevich A.P., Afanas'ev A.A., Gubar N.B., Urbanovich A.I. // Laser Phys. 1996. Vol.6. N 6. P.1050.
15. Губарь Н.Б. // ЖПС. 1997. Т.61. N 6. С.841.
16. Афанасьев А.А., Губарь Н.Б., Вакульчик П.А., Урбанович А.И. // 6 Междунар. конфер. "Актуальные проблемы информатики": Сб. тр. Мн., 1998. Т.3. С.585.

Поступила в редакцию 07.02.2000.

УДК 535.34

Ю.И.МИКСЮК, А.Л.ТОЛСТИК

ФОРМИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКОГО ОТКЛИКА МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ С УЧАСТИЕМ ФОТОПРОТОЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

A theoretical model for the nonlinear-optical response of complex organic compound solutions in conditions of proton phototransfer has been developed. The possibility to realize optical control over the spectroscopic and optical characteristics of a solution by the photoinduced pH of the medium has been demonstrated.

Фотопротолитические превращения, представляющие собой простейшие примеры фотохимических реакций, являются важным звеном многих биологических процессов (зрение, бактериальный фотосинтез, протонный транспорт в клетках и т.д.) и находят широкие технические приложения (перестраиваемые лазеры на красителях, элементы молекулярной электро-

ники. фотохромные материалы, светостабилизаторы полимеров, рН-индикаторы, люминесцентные зонды для исследования микрообъектов). Актуальность исследований фотопротолитических процессов в сложных органических соединениях обусловлена помимо всего прочего поиском новых нетрадиционных методов и сред для оптической обработки информации, управления пространственно-временной структурой световых пучков.

В работе представлены результаты теоретического моделирования фотопротолитических процессов в растворах сложных органических соединений. Проанализировано формирование нелинейно-оптического отклика в молекулярных системах при лазерном возбуждении и исследованы зависимости светоиндуцированного изменения показателя преломления и коэффициента поглощения от интенсивности возбуждающего излучения. Отличительной особенностью рассматриваемых молекулярных систем является формирование сложного нелинейного отклика за счет фотоиндуцированного самовоздействия посредством изменения текущих параметров раствора (состав сольватной оболочки, рН-фактор).

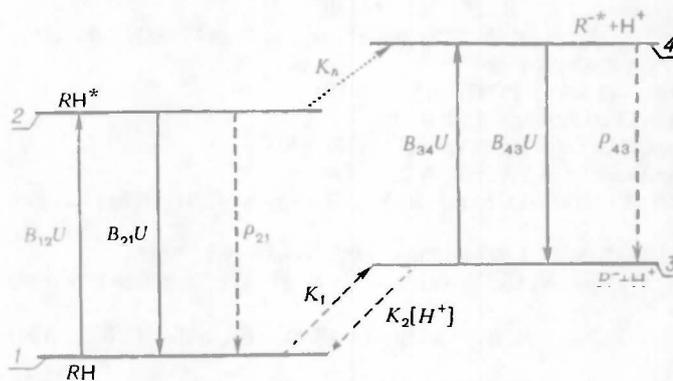


Рис. 1. Схема переходов между энергетическими уровнями исходной формы молекулы RH и ее радикала R (сплошными линиями обозначены вынужденные переходы молекулы под действием излучения; штриховые линии соответствуют спонтанным и безызлучательным переходам).

Для модельных исследований была выбрана схема переходов между энергетическими уровнями исходной молекулы и радикала (рис.1), отвечающая одному из распространенных вариантов протекания реакции фотодиссоциации протона (случай резкого смещения химического равновесия в растворе в сторону прямой реакции при переводе молекул в возбужденное состояние). Использование стандартной процедуры решения системы кинетических уравнений для населенностей уровней в стационарном режиме взаимодействия позволило определить населенности уровней в виде:

$$N_1 = \frac{(N + N_0 - N_H)(B_{21}U + P_{21} + K_n)}{(B_{12} + B_{21})U + P_{21} + K_n}, \quad (1)$$

$$N_2 = \frac{(N + N_0 - N_H)B_{12}U}{(B_{12} + B_{21})U + P_{21} + K_n}, \quad (2)$$

$$N_3 = \frac{(N + N_0 - N_H)[K_1(B_{21}U + P_{21} + K_n) + K_n B_{12}U]}{[(B_{12} + B_{21})U + P_{21} + K_n]K_2 N_H}, \quad (3)$$

$$N_4 = \frac{(N + N_0 - N_H)[K_n B_{12}U + \{K_1(B_{21}U + P_{21} + K_n) + K_n B_{12}U\}(B_{34}U / K_2 N_H)]}{[(B_{12} + B_{21})U + P_{21} + K_n](B_{43}U + P_{43})}, \quad (4)$$

где N – общая концентрация нейтральных молекул и радикалов, N_0 – исходная, N_H – текущая концентрация протонов, $B_{ij}U$ – вероятность вынужденных переходов, P_{ij} – вероятность спонтанных и безызлучательных переходов

между уровнями i и j , K_1 и K_n – вероятности фотодиссоциации протона молекулами, находящимися в основном и возбужденном состояниях. K_2N_H – вероятность присоединения протона в основном состоянии (обратная протолитическая реакция).

Текущая концентрация протонов N_H определяется выражением:

$$N_H = \left(-b + \sqrt{b^2 - 4ac} \right) / 2a, \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} a &= K_2 [(B_{12} + B_{21})U + P_{21} + K_n (B_{43}U + P_{43}) + K_2 K_n B_{12} U], \\ b &= -N_0 K_2 [(B_{12} + B_{21})U + P_{21} + K_n (B_{43}U + P_{43})] - (N + N_0) K_2 K_n B_{12} U + \\ &\quad + [K_1 (B_{21}U + P_{21} + K_n) + K_n B_{12} U] [(B_{34} + B_{43})U + P_{43}], \\ c &= -(N + N_0) [K_1 (B_{21}U + P_{21} + K_n) + K_n B_{12} U] [(B_{34} + B_{43})U + P_{43}] \end{aligned}$$

Заметим, что знаки коэффициентов, входящих в (5), $a > 0$, $c < 0$ определяют однозначность решения уравнений (1)–(4).

Для определения коэффициента экстинкции учитываем поглощение молекул, находящихся в исходной форме, а также их радикалов:

$$\kappa = \frac{\hbar n_0}{2} (N_1 B_{12} - N_2 B_{21} + N_3 B_{34} - N_4 B_{43}), \quad (6)$$

где n_0 – исходное значение показателя преломления (определяется растворителем).

Для нахождения резонансного изменения показателя преломления, связанного со сложным органическим соединением, используем соотношение Крамерса–Кронига (дисперсионное соотношение)

$$n(\omega) = 1/\pi \int_{-\infty}^{\infty} \kappa(\omega') / (\omega' - \omega) d\omega',$$

связывающее действительную и мнимую части комплексного показателя преломления $\tilde{n} = n + i\kappa$ (см., например, [1–3]).

Предложенная теоретическая модель позволяет проанализировать влияние смещения полос поглощения различных форм молекул, вероятностей спонтанных и безызлучательных переходов, а также стокового сдвига полос поглощения и люминесценции на нелинейный отклик среды. Для численного анализа светоиндуцированного оптического отклика сложных органических соединений с фотопереносом протона было выбрано типичное расположение полос поглощения и испускания исходной формы молекул и продукта реакции, отвечающее смещению полосы поглощения радикала в длинноволновую область спектра ($(\omega_0 - \omega_R) / \Delta = 2$, ω_0 и ω_R – центральные частоты полос поглощения исходной молекулярной формы и радикала, Δ – полуширина контуров). При расчетах использовалось приближение гауссовой формы зеркально-симметричных полос поглощения и испускания при стоковом сдвиге в 1.6Δ . Зависимости коэффициента экстинкции κ и показателя преломления n , связанные с переходами в сложных органических соединениях, от частоты зондирующего излучения ω при различных интенсивностях возбуждения I представлены на рис. 2, 3. Рис. 2 отвечает случаю, когда обратная реакция в основное состояние идет на порядок медленнее ($K_2N/P_{21} = 1$ и 10 для рис. 2 и рис. 3 соответственно, κ_0 – начальный коэффициент экстинкции). Видно, что существуют спектральные области, в которых проявляется эффект оптического затемнения или просветления, а также

существуют частоты, на которых коэффициент экстинкции K и показатель преломления n практически не изменяются (изменение K или n при увеличении числа радикалов компенсируется изменениями K , n за счет уменьшения числа молекул в исходной форме). В то же время существуют области частот, где имеет место немонотонная зависимость коэффициента поглощения и показателя преломления от интенсивности возбуждающего излучения.

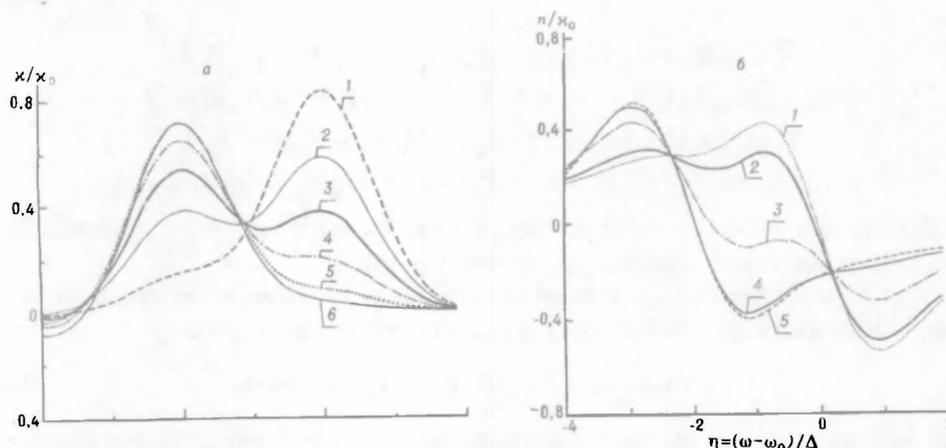


Рис. 2. Зависимость коэффициента экстинкции K (а) и изменения показателя преломления n (б) от частоты сигнальной волны ω при различных интенсивностях возбуждения I : (а) – I –0,03; 2–0,3; 3–1; 4–3; 5–10; 6–30; (б) – I –0,03; 2–0,1; 3–1; 4–10; 5–30; $K_2N/P_{21}=1$

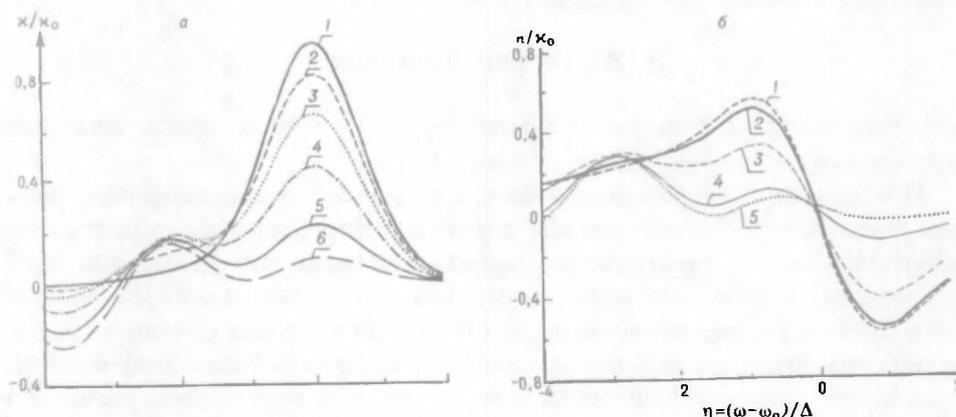


Рис. 3. Зависимость коэффициента экстинкции K (а) и изменения показателя преломления n (б) от частоты сигнальной волны ω при различных интенсивностях возбуждения I : (а) – I –0,03; 2–0,3; 3–1; 4–3; 5–10; 6–30; (б) – I –0,03; 2–0,1; 3–1; 4–10; 5–30; $K_2N/P_{21}=10$

Таким образом, проявление фотопротолитических процессов в растворе сложных органических соединений создает новые возможности управления оптическими свойствами молекулярных систем посредством фотоиндуцированного самовоздействия молекул. Сдвигая кислотно-основное равновесие в растворе, можно управлять спектроскопическими и оптическими характеристиками, осуществляя затемнение в одном спектральном диапазоне при одновременном просветлении в другой спектральной области. Такая ситуация подобна тому, как это достигается изменением рН раствора путем внесения в него кислоты или основания.

1. Pantell R.H., Puthoff H.E. // Fundamentals of Quantum Electronics. New York, 1969.

2. Кабанов В.В., Рубанов А.С. // Докл. акад. наук БССР. 1980. Т.24. №1. С.31.

3. Кабанов В.В., Рубанов А.С., Толстик А.Л. // Квантовая электроника. 1988. Т.15. №8. С. 1681.

Поступила в редакцию 07.02.2000.

УДК 541.64:532.72

А.И.СТАНКЕВИЧ, В.В.МОГИЛЬНЫЙ

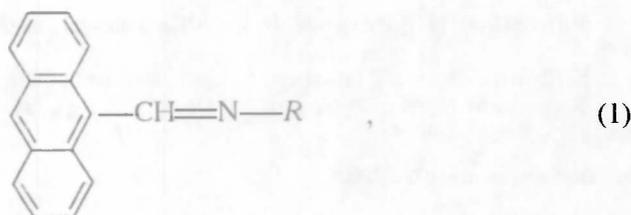
ТЕРМОИЗОМЕРИЗАЦИЯ АЗОМЕТИНОВ НА ОСНОВЕ 9-ФОРМИЛАНТРАЦЕНА В СЛОЯХ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА

Thermal *Z/E*-isomerization of azomethine derivatives of anthracene in thin films of poly(methylmethacrylate) is studied. Enhancing of electron-donating property of nitrogen-connected substituent leads to an inhibition of the reaction due to rotation mechanism predomination over inversion one. A rate of *Z/E*-isomerization becomes comparable with a rate of free volume diffusion from surface of the film making the molecular rearrangement highly sensitive to a relaxation of the polymer matrix.

Обратимо изомеризующиеся фотохромные соединения входят в число основных компонентов многих полимерных фоторегистрирующих сред, а также находят ряд других технических применений [1–3]. Эффективность и скорость молекулярной изомеризации в полимерном окружении определяются как типом фотохрома, полимера и способом приготовления слоя [4], так и динамикой структуры материала в процессе молекулярных превращений [5].

Азометины на основе 9-формилантрацена общей формулы (1) представляют собой гибридные фотохромы, позволяющие в зависимости от концентрации молекул и условий экспонирования проводить фотопревращения полиаценового ядра или азометиновой группы $-CH=N-$. При высокой концентрации таких азометинов (~10 мол.%) основным процессом является фотодимеризация антраценовых фрагментов, что может быть использовано для долговременной записи оптической информации. При более низкой концентрации доминирует *E/Z*-фото- и последующая темновая *Z/E*-термоизомеризация азометиновой группы, способные формировать динамические амплитудные и фазовые оптические изображения [6]. Исследования *Z/E*-термоизомеризации 9-антрилиденаминоэтанола и 9-(10-фенил)антрилиденаминоэтанола в стеклообразном полиметилметакрилате (ПММА) [5] показали, что скорость этого процесса в слоях толщиной ~ 1 мкм полностью определяется скоростью диффузионного поступления свободного объема в слой через его поверхность. Это, по-видимому, связано с необходимостью для осуществления акта молекулярной *Z/E*-термоизомеризации значительного избыточного свободного объема, доставляемого к фотоизомеризованным молекулам в виде диффундирующих кластеров. Вид заместителя *R* при азоте (1) может существенно изменять величину необходимого для *Z/E*-термоизомеризации избыточного объема и, следовательно, скорость процесса.

Целью настоящей работы является исследование электронного влияния заместителей при азоте азометиновой группы соединений (1) на скорость их *Z/E*-термоизомеризации в тонких слоях ПММА.



где $R = n\text{-NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$ (I); $R = n\text{-BrC}_6\text{H}_4$ (II); $R = \text{C}_6\text{H}_5$ (III); $R = n\text{-CH}_3\text{C}_6\text{H}_4$ (IV); $R = n\text{-CH}_3\text{OC}_6\text{H}_4$ (V); $R = (\text{CH}_3)_3\text{C}$ (VI).

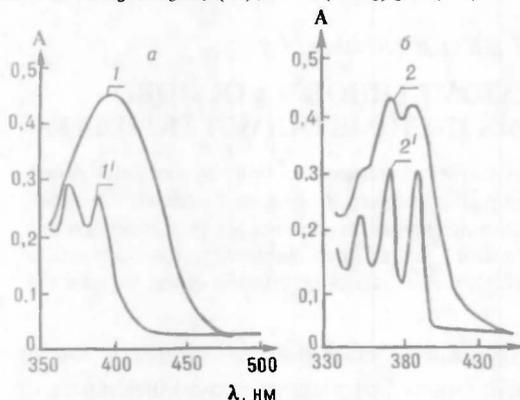


Рис. 1. Спектры электронного поглощения азометинов III и VI: 1, 2 – E-изомеры; 1', 2' – Z-изомеры.

Материал и методика

Для приготовления композиций использовали ПММА с $M_n = 80\ 000$, пересаженный метанолом из раствора в диоксане и высушенный до постоянной массы. Азометины I–VI синтезировали путем конденсации из 9-формилантрацена и соответствующих аминов [7]. Для приготовления пленок использовали 10–20%-ные растворы ПММА в хлорбензоле с добавлением 2 мол. % азометина от количества полимера. Об-

разцы наносили на стеклянные подложки методом центрифугирования. Толщину слоев определяли с помощью интерференционного микроскопа МИИ-4 с точностью $\pm 0,03$ мкм. Основные результаты получены для слоев 1 мкм. Образцы экспонировали светом лампы ДРШ-350 через набор фильтров, выделяющих ртутную линию с $\lambda = 435,8$ нм. Длина волны активирующего излучения соответствует длинноволновому крылу поглощения E-изомеров (рис. 1, кривые 1 и 2), в то время как Z-изомеры практически не поглощают излучения на указанной длине волны (рис. 1, кривые 1' и 2'). В зависимости от скорости Z/E-термоизомеризации такое экспонирование позволяло достигать степени E/Z-фотопревращения от 50 % (для азометинов I–III) до 90 % (для азометинов V, VI). Спектры электронного поглощения образцов регистрировали с помощью спектрофотометра "Specord M-40" до экспонирования, сразу после экспонирования и в процессе темновой Z/E-изомеризации при 293 К. Долю Z-изомера, не подвергшегося Z/E-термоизомеризации, рассчитывали по формуле

$$\alpha_Z = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{A_i^{v_i} - A_{\infty}^{v_i}}{A_0^{v_i} - A_{\infty}^{v_i}} \right| \quad (2)$$

где $A_i^{v_i}$, $A_0^{v_i}$, $A_{\infty}^{v_i}$ – оптическая плотность образца на частоте v_i в данный момент времени, непосредственно после экспонирования и после полной Z/E-релаксации соответственно; n – число частот спектра, по которым определяли степень превращения.

В тех случаях, когда скорость термоизомеризации была высока (азометины I–III), величину α_Z вычисляли из оптической плотности на одной частоте, непрерывно измеряя ее с использованием специальных кинетических программ спектрофотометра.

Результаты и их обсуждение

Электронные спектры изученных *E*-изомеров условно можно разделить на две группы: в одну входят азометины с ароматическими заместителями при атоме азота (см. рис.1а, кривая 1), в другую – с алифатическим заместителем (см. рис.1б, кривая 2). Более выраженный структурный спектр для *E*-изомера азометина VI по сравнению с азометинами I–V, по-видимому, обусловлен уменьшением сопряжения $\text{CH}=\text{N}$ -группы с антраценовым ядром за счет большего поворота этой группы вокруг связи $\text{C}-\text{C}$. Наличие бензольного кольца при атоме азота делает бесструктурным не только спектр *E*-изомера, но и значительно менее структурированными спектры *Z*-изомеров I–V по сравнению с VI (см. рис.1, кривые 1' и 2'). Однако эти спектральные различия для алифатического и ароматических заместителей не коррелируют каким-либо образом со скоростью *Z/E*-термоизомеризации.

На рис.2 приведены зависимости величин $-\ln\alpha_z$ от времени для пленок, содержащих разные фотохромы. В группу “быстроизомеризующихся” фотохромов входят азометины I–III (см. рис.2, кривые 1–3), в то время как *Z*-изомеры азометин V и VI (см. рис.2, кривые 5,6) превращаются на 1.5 – 2 порядка медленнее. Скорость *Z/E*-изомеризации азометина IV имеет промежуточное значение. Для всех зависимостей $\ln\alpha_z$ от времени наблюдается отклонение линейности, обусловленное кинетической неэквивалентностью фотохромных центров. В первом приближении кинетика процесса может рассматриваться как двухэкспоненциальная:

$$C_t = C_\infty - (C_\infty - C_0)[D\exp(-k_1t) + (1-D)\exp(-k_2t)], \quad (3)$$

где C_t, C_∞, C_0 – концентрации *Z*-изомера в текущий, конечный и начальный момент времени, вычисленные из значений α_z ; k_1 и k_2 – константы скоростей *Z/E*-изомеризации для начального и конечного участков кинетических кривых; D – доля “быстрой” составляющей. На рис.3 представлены зависимости $\lg k$, рассчитанные по (3), от σ -констант Гаммета, часто используемые в корреляционных уравнениях и характеризующие меру общего электронного влияния заместителей. Нетрудно заметить, что обе зависимости распадаются на два участка: к первому относятся азометины с выраженными электроноакцепторными свойствами

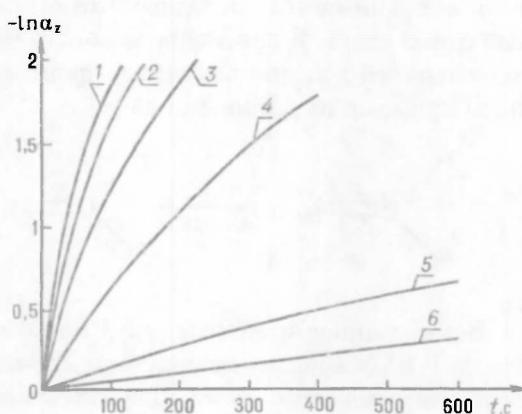


Рис.2. Зависимость степени термоизомеризации (293 К) азометин I–VI от времени. Номер кривой соответствует номеру азометина

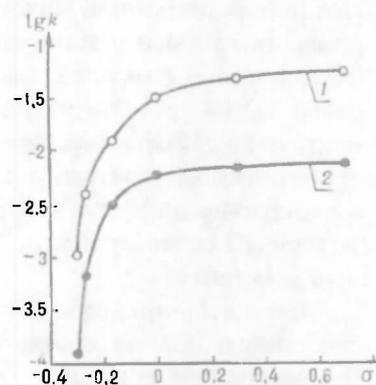
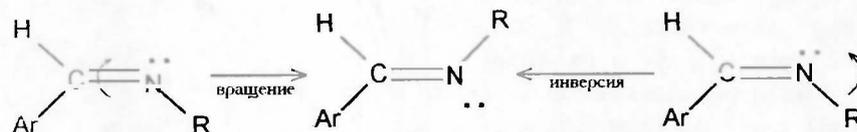


Рис.3. Зависимость величин $\lg k_1$ (1) и $\lg k_2$ (2) азометин I–VI от σ -констант Гаммета

заместителя R при атоме азота, ко второму – азометины с электронодонорными свойствами R .

Известно [8], что увеличение электроотрицательности заместителя при атоме азота приводит к пропорциональному росту энергии активации термической E/Z -изомеризации азометинов в растворах. Когда величины энергии активации этого процесса превышают значения 100 кДж/моль, то протекание термореакции в направлении Z -изомера затруднено, но если это все-таки возможно, то превращение происходит по ротационному механизму. Z -изомеры менее устойчивы, чем E -изомеры, и Z/E -изомеризация характеризуется меньшей энергией активации. Вследствие этого термическая Z/E -изомеризация может проходить по двум механизмам: ротационному или путем инверсии атома азота. Усиление электроакцепторных свойств заместителя (аналог увеличения электроотрицательности) приводит к уменьшению энергии активационного барьера для Z/E -изомеризации. Его величина снижается настолько, что основным становится механизм инверсии атома азота. В противоположность этому введение электронодонорных заместителей в целом замедляет процесс Z/E -изомеризации и меняет механизм процесса на ротационный [3].



Все сказанное и данные рис.3 позволяют предположить, что для азометинов I–III основным механизмом Z/E -изомеризации в слоях ПММА является инверсия атома азота. Для азометина IV ротационный механизм и инверсия атома азота являются, по-видимому, конкурирующими процессами. Наконец, Z -изомеры азометинов V, VI перегруппировываются в более устойчивые E -изомеры по ротационному механизму. Соизмеримую азометинам V,VI скорость Z/E -термоизомеризации в ПММА имеют ранее изученные азометины [5], в состав которых входит $R = \text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ с электронодонорными свойствами (ротационный механизм). Создавать дополнительные затруднения для молекулярной перестройки и увеличивать энергию активации процесса в этом случае могут также водородные связи между гидроксигруппой фотохромной молекулы и карбонильной группой полимерной матрицы. Тем не менее константа скорости их Z/E -термоизомеризации в пленках толщиной 1 мкм (т.е. аналогичных исследованным в настоящей работе) равна $1,2 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$. Эта величина уменьшается до $4,8 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$, когда поверхность слоя связана жестким покровом (сэндвич-структура). Последнее значение можно рассматривать как собственную константу Z/E -изомеризации в отсутствие диффузионной доставки свободного объема к фотохромным молекулам от поверхности, а первое – как практически чисто диффузионную константу.

Малая величина собственной константы и определяющая роль диффузии свободного объема соответствуют очевидной особенности ротационного механизма изомеризации – необходимости локализации в окрестности молекулы значительного избыточного свободного объема [4]. Близость констант Z/E -изомеризации азометинов V, VI к значению, определяемому диффузией свободного объема, указывает на чувствительность этого процесса к

состоянию полимерной матрицы (согласно предполагаемому ротационному механизму).

Термоизомеризация азометинов I–III происходит на 1,5–2 порядка быстрее (см. рис.3), что естественно для инверсионного механизма, при котором объем, охватываемый смещающейся группой атомов, меньше, чем такой же объем при ее вращении вокруг связи C–N. В целом *Z/E*-изомеризация азометинов I–III протекает настолько быстро по сравнению с релаксацией неравновесного постфотолизного состояния полимерной матрицы, что влияние диффузии свободного объема не проявляется. Действительно, уже для азометина III увеличение толщины полимерного слоя с 1 до 5 мкм не уменьшает в пределах ошибки эксперимента константу скорости *Z/E*-изомеризации.

На основании приведенных результатов можно заключить, что собственная константа скорости *Z/E*-термоизомеризации азометинов на основе 9-формилантрацена в ПММА определяется вкладами ротационного и инверсионного механизмов молекулярных перестроек. Как и в случае жидких растворов, усиление электроноакцепторных свойств заместителя при азоте сопровождается сменой ротационного механизма инверсионным. При этом увеличивается собственная константа изомеризации и падает чувствительность фотохрома к процессу диффузии свободного объема от границы слоя (релаксация неравновесного состояния полимерной матрицы после фотоэкспонирования).

1. Гиллет Дж. Фотофизика и фотохимия полимеров. М., 1988.
2. Барачевский В. А., Лашков Г. И., Цехомский В. А. Фотохромизм и его применение. М., 1977.
3. Органические фотохромы / Под ред. А. В. Ельцова. Л., 1982.
4. Victor J. G., Torkelson J. M. // *Macromolecules*. 1987. Vol.20. N 9. P.2241.
5. Могильный В. В., Лазарева А. М. // *Высокомолекулярное соединение*. 1994. Т.36. № 12. С. 2088.
6. Могильный В. В., Сидоренко М. М., Станкевич А. И. // *Вестн. Белорус. ун-та. Сер. I*. 1991. № 2. С. 21.
7. Вейганд К., Хильгетаг Г. *Методы эксперимента в органической химии*. М., 1968. С. 472.
8. Padwa A. // *Chem. Rev.* 1977. Vol.77. N 1. P.37.

Поступила в редакцию 18.02.2000.

УДК 538.21

А. В. ЛЕОНТЬЕВ, А. И. ИВАНОВ

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОДУКТОВ ТРАВЛЕНИЯ ПЛЕНОК ПММА ИОНАМИ КИСЛОРОДА

The relationship between the charged fragments yield and the preliminary irradiation doses was studied.

В настоящее время в микроэлектронике в связи с уменьшением линейных размеров приборов все большее значение получают методы формирования изображения на основе рентгеновской, ионной и электронной литографии. В отличие от фотолитографии проявление рентгено- и ионорезистов осуществляют сухими методами с использованием ионно-лучевых и плазменных технологий. Однако физико-химические процессы, происходящие в полимерах при травлении ионными пучками низких и средних энергий, изучены крайне слабо. Физическое распыление не может адекватно описать зависимость коэффициента распыления от энергии, поэтому необ-

ходимо использовать “фрагментарные” модели [1]. Внедрение прогрессивных высокоразрешающих методов создания изображения в микроэлектронике тесно связано с проверкой имеющихся моделей прямого радиационного травления полимеров, уточнением деталей картины фрагментации, что также весьма важно для оптимизации толщины защитной маски при ионном легировании полупроводников [2,3]. Важной решаемой в ходе выполнения работы задачей являлось исследование возможности идентификации полимеров методом вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС) как исходных, так и подвергнутых ионному облучению, включая высокодозное, при котором существенно изменяется состав мишени.

Материал и методика

В качестве объекта исследований использовали пленки полиметилметакрилата (ПММА) $[C_5H_8O_2]_n$. Выбор ПММА объясняется простотой его структуры и наличием некоторого количества экспериментальных данных по его травлению, а также дальнейшим синтезом на его основе ряда сополимеров. Пленки ПММА толщиной 0,6–0,7 мкм наносили на подложки из монокристаллического кремния методом центрифугирования. Выход продуктов распыления регистрировался как для исходных пленок, так и для облученных различными (от 10^{12} до 10^{16} ион/см²) дозами ионов азота с энергией 300 кэВ.

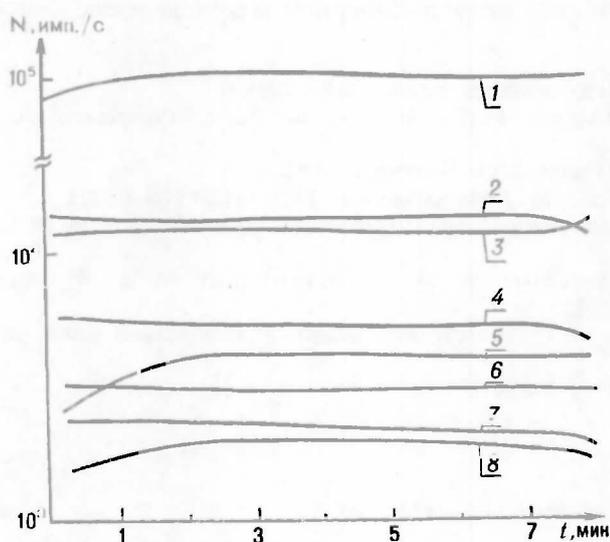


Рис. 1. Выход заряженных фрагментов из ПММА при распылении ионами кислорода:
1- C^+ , 2- CH^+ , 3- C^2+ , 4- C_2H^+ , 5- $C_3H_2^+$, 6- C^3+ , 7- C_3H^+ , 8- $C_3H_2^+$

Исследование выхода продуктов травления пленок ПММА осуществляли на установке САМЕСА IMS 4F. Распыление указанных пленок проводили ионами O^{2+} с энергией 12,3 кэВ. Плотность тока ионов $j=1-5$ мкА/см². Скорость травления составляла для всех образцов примерно 2–3 нм/с. Условия проведения ВИМС-анализа были близки к статическим (СВИМС) [4]. На рис.1 приведен выход продуктов распыления облученных ионами азота ($D=1 \cdot 10^{14}$ см⁻²) пленок ПММА в зависимости от времени травления. Тот факт, что интенсивность всех линий слабо зависит от времени травления, свидетельствует в пользу СВИМС, а также указывает, что модификация структуры облученных ионами азота пленок проведена на всю глубину. Данные об изменении толщины пленок ПММА при облучении ионами N^+ (300 кэВ) представлены в [5].

Результаты и их обсуждение

На рис.2 приведены масс-спектры исходных (2а) и облученных ионами азота ($D=1 \cdot 10^{15}$ см⁻², $E=300$ кэВ) (2б) пленок ПММА. Четко наблюдается выход углеводородных кластеров по сериям $C_n H_{2n+2}^+$ с массовыми числами

$M=12n+m$, где n , m – число атомов углерода и водорода соответственно, $m \leq 2n+2$. В первой серии (13 –CH⁺, 14 –CH₂⁺, 15 –CH₃⁺, 16 –CH₄⁺) выявлены все характеристические пики. Нарушено соотношение интенсивностей линий с $M=14$ и 15. Это может быть объяснено выходом ионов N⁺ и вкладом фрагментов M_{28}^{2+} (CO). Как видно из рис.3, где приведен масс-спектр высокого разрешения неимплантированного ПММА, линия, соответствующая $M=14$, состоит из двух пиков, соответствующих выходу CH₂⁺ и CO²⁺. Отметим, что в работе [6], где исследовали выход продуктов травления ПММА ионами Хе с энергией 4,5 кэВ, пики с $M=13$, 14 вообще не обнаружены. Интенсивность выхода кластеров CH₄⁺ мала в силу высокого потенциала их ионизации (12,3 эВ) и пик с $M=16$ соответствует кислороду. Вторая серия (C₂H⁺ – C₂H₆⁺) начинается с пика, соответствующего $M=24$, и выявлена более полно, чем в [6]. Основное отклонение от правила интенсивностей заключается в том, что интенсивность $I_{m=28} > I_{m=27}$, $I_{m=29}$ из-за выхода CO⁺. Третья серия (C₃H⁺ – C₃H₈⁺) в [6] начинается с $M=37$. Как видно из рис.2а, эта серия хорошо выявляется, и только поведение пиков с $M=39$ и $M=40$ аномально из-за наложения выхода C₂O⁺, что подтверждает рис.3.

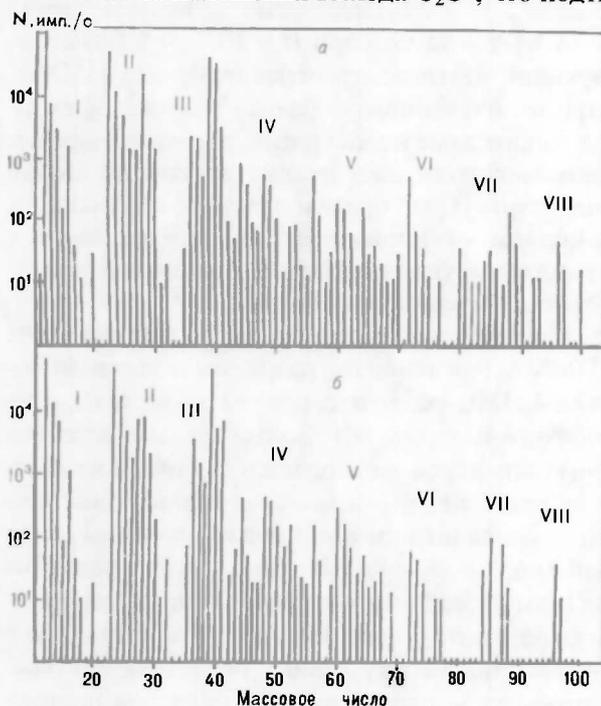


Рис.2. Масс-спектры пленок ПММА:
1 – необлученная, 2 – облученная ионами азота.
Серии углеводородных кластеров I-VIII

соответствующей $M=69$ [6]. В отличие от данных [6] наш масс-спектр содержит линию, соответствующую $M=31$, что говорит об отрыве от основной цепи группы (OCH₃⁺), и тогда идентификация линии $M=69$ подтверждает предположение [6]. Заметим, что его интенсивность существенно меньше, чем по данным [6]. Среди пиков с большой массой выделяются линии с $M=72$ и $M=88$. Представленные масс-спектры значительно сложнее состава газообразных продуктов радиолитического ПММА [7], что говорит о более разнообразных процессах деструкции полимера при травлении ионами.

В промежутке между третьей и четвертой сериями углеводородов четко выявлены следующие пики: 44 – (CO⁺), 45 – (COOH⁺). Четвертая серия начинается с $M=48$ и наиболее интенсивная линия в ней соответствует $M=49$. Весьма интенсивна линия, отвечающая $M=56$ (C₂O₂⁺). Пик, соответствующий отрыву всей боковой цепи в ПММА $M=59$ (CO₂CH₃), существенно меньше, чем $M=56$, что говорит о деструктивных процессах внутри молекулы. В четвертой и пятой серии также присутствуют все компоненты. Анализ линий в них усложняется вследствие ряда наложений. Дискуссионным является вопрос об идентификации линии,

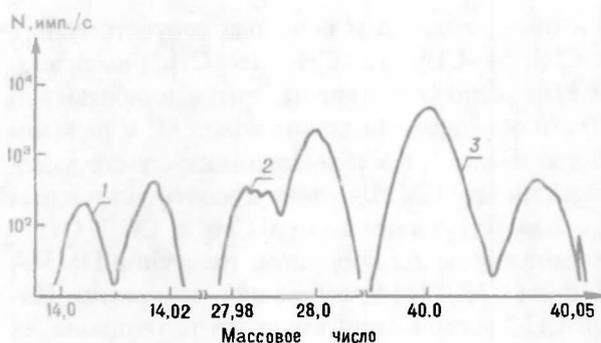


Рис.5. Тонкая структура пиков с массовыми числами $M=14, 28, 40$, полученная в режиме масс-спектропии высокого разрешения

Основные закономерности эволюции масс-спектров ПММА с ростом дозы предварительного облучения ионами азота можно свести к следующему. Как отмечалось в [4], с ростом дозы предварительного облучения увеличивается интенсивность пиков в первых углеводородных кластерах, что считается признаком наличия ненасыщенности. Такой эффект нами не

обнаружен. Интенсивность основных пиков в сериях с низкими значениями m практически не менялась с увеличением D . Нами обнаружено существенное уменьшение выхода кластеров с $M > 70$. Полностью пропадает сигнал следующих кластеров: $M=70, 78-84, 89-95$ уже при $D > 10^{13} \text{ см}^2$. Отметим, что пик с $M=100$, соответствующий отрыву элементарного звена ПММА, присутствует только на спектре необлученного образца. Поэтому идентификация предварительно облученного даже небольшими дозами легких ионов ПММА методом ВИС весьма затруднена и требует детального анализа. Например, идентификация структуры предварительно облученного ПММА возможна по одновременному наличию в ВИС-спектре линий с $M=31$ и 69 , которые не соответствуют углеводородным кластерам и присутствуют даже при дозе облучения ионами азота $D=1 \cdot 10^{15} \text{ см}^2$.

Таким образом, результаты проведенных исследований позволили уточнить картину фрагментации ПММА при ионном травлении и выявили основные особенности изменения ВИС-спектра с ростом дозы предварительного облучения. Как в облученных, так и в необлученных образцах ПММА в сериях углеводородных кластеров наблюдается значительное возрастание интенсивности выхода ионов нечетных масс, по сравнению с четными, что может быть объяснено более низким потенциалом их ионизации. Существенно более сложный вид масс-спектра продуктов травления ПММА, чем в [6], объясняется химической активностью ионов кислорода.

Авторы благодарят Фонд фундаментальных исследований Республики Беларусь за частичную финансовую поддержку данных исследований (проект Ф98-146), а также В.В.Григорьева за предоставление образцов полимеров.

1. Махвиладзе Т.М., Пантелеев Е.Г., Сарычев М.Е. // Мат. моделирование. 1990. Т.2. №3. С.3.
2. Papanicolaou N.A., Thompson P.E., Corazzi R.J. // J.Electronic Materials. 1987. Vol.16. №1. P.33.
3. Комаров Ф.Ф., Леонтьев А.В., Острцов Е.Ф. // Вакуумная техника и технология. 1994. Т.4. №2. С.39.
4. Взаимодействие заряженных частиц с твердым телом: Сб. ст. / Под ред. А.Грас-Марти. М., 1994.
5. Комаров Ф.Ф., Леонтьев А.В., Гранько С.В. и др. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер.1. 1999. №3. С.16.
6. Brinkhuis R.H.G., Van Ooij W.J. // Surf. Interf. Analysis. 1988. Vol.11. P.214.
7. Иванов В.С. Радиационная химия полимеров. Л., 1988.

Поступила в редакцию 31.01.2000.

ОБРАЗОВАНИЕ АГРЕГАТОВ ПОЛИ-N-ИЗОПРОПИЛАКРИЛАМИДА В ЛИПИДНЫХ БИСЛОЯХ

Model of the formation of poly(N-isopropylacrylamide) aggregates in lipid bilayer was constructed. For stationary state the energy interaction between poly(N-isopropylacrylamide) molecules was calculated and distribution function of modifier molecules in different aggregates in dependence on molecular sizes and dielectric permeability inside aggregate was found.

В настоящее время внимание исследователей привлекают полимерные вещества, обратимо реагирующие на небольшие вариации внешних факторов резким изменением своих физических и химических свойств [1–3]. Внешними факторами в зависимости от химической природы полимера могут быть температура, рН, ионная сила, электромагнитное поле, световое воздействие и др. [4]. Поли-N-изопропилакриламид (поли-НИПАА) и его сополимеры относятся к группе веществ, функциональные свойства которых (например, растворимость в воде) зависят от температуры. Нижняя критическая температура растворения (НКТР) поли-НИПАА и большинства его сополимеров в воде находится в области физиологических температур [5]. При нагревании выше НКТР происходит конформационный переход с резким уменьшением удельного объема макромолекулы поли-НИПАА, при этом поверхность молекулы из гидрофильной становится гидрофобной [6].

Изменение конформационного состояния поли-НИПАА при увеличении температуры способствует встраиванию макромолекул в липидные мембраны [7] и позволяет использовать поли-НИПАА в качестве термоиндуцируемого модификатора физико-химических свойств липидных мембран. Экспериментально показано, что сополимеры НИПАА с *n*-гептадецилвинилкетонном изменяют электрофизические свойства плоских бислоев липидных мембран (ПБЛМ) [8]. Термоиндуцированная модификация проводимости ПБЛМ для катионов, по всей видимости, связана с образованием сополимерами НИПАА трансмембранных каналов. Формирование каналов в ПБЛМ является следствием образования молекулярных агрегатов поли-НИПАА. Образование устойчивых агрегатов поли-НИПАА в мембране может осуществляться при условии, что энергия теплового движения молекул поли-НИПАА много меньше, чем энергия взаимодействия между ними, либо сравнима с ней. Первый случай имеет место, когда основную роль в межмолекулярных взаимодействиях играют водородные связи, второй – при определяющей роли универсальных межмолекулярных взаимодействий.

Целью данной работы является моделирование взаимодействия молекул поли-НИПАА, приводящего к агрегации, и изучение распределения молекул модификатора между различными агрегатами при установлении в системе динамического равновесия.

Модель. При температуре выше критической молекулы поли-НИПАА встроены в липидный бислой. Молекула модификатора моделируется цилиндром радиуса r , ось которого располагается перпендикулярно поверхности мембраны, а высота цилиндра соответствует толщине бислоя. Функциональные группы, определяющие дипольный момент, находятся с одной стороны молекулы на поверхности цилиндра (рис.1). Учет химического

строения молекул поли-НИПАА позволяет предположить, что в составе одной молекулы может существовать несколько (n_u) диполей, расположенных вдоль оси цилиндра. Для упрощения модели значение n_u полагаем равным единице.

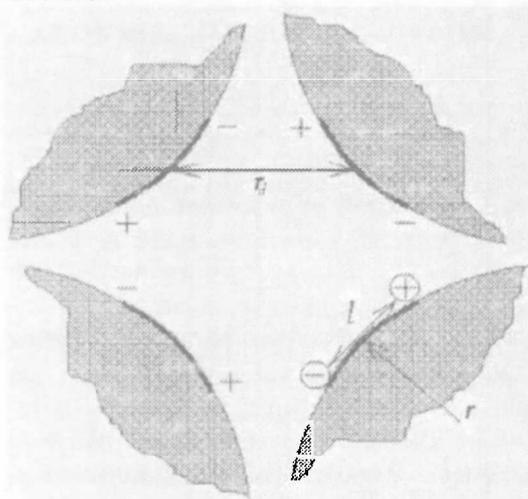


Рис. 1. Схема поперечного сечения агрегата, образованного четырьмя молекулами поли-НИПАА. плоскостью, параллельной плоскости

Вследствие латеральной диффузии в мембране могут формироваться трансмембранные цилиндрические структуры (агрегаты), состоящие из различного числа молекул поли-НИПАА (рис.2).

Поскольку в составе молекулы поли-НИПАА содержатся полярные группы, целесообразным представляется предположение об определяющей роли межмолекулярных диполь-дипольных взаимодействий в образовании агрегатов. В модели учитывается взаимодействие данного диполя только с двумя ближайшими диполями, расположенными в одной с ним

плоскости параллельно поверхности мембраны и принадлежащими соседним молекулам. Расстояние между двумя соседними диполями в агрегатах r_d равно

$$r_d = 2r \left(1 - \sin \frac{\pi}{i} \right), \quad (1)$$

где i – число молекул поли-НИПАА, входящих в состав определенного агрегата.

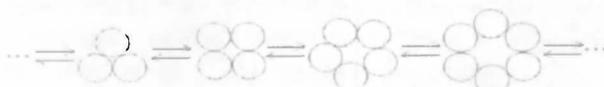


Рис.2. Схема формирования в мембране молекулами поли-НИПАА агрегатов разного размера

Расстояние между двумя соседними диполями не может быть меньше некоторого минимально допустимого значения r_m . Значение r_m полагается

равным 0,3нм, исходя из соображений, что энергия диполь-дипольного взаимодействия меньше энергии водородных связей, а характерные расстояния в случае водородных связей лежат в интервале 0,2–0,3нм [9]. Таким образом, в случае, если расстояние между диполями, вычисленное по формуле (1), меньше 0,3нм, r_d принимает значение r_m .

Обсуждение. Потенциальная энергия притяжения между молекулами модификатора в составе агрегата, состоящего из i молекул, определяется как

$$U_i = \frac{4e^2\theta^2}{\epsilon_p} \left(\frac{-r_d}{r_d^2 - l^2 \cos^2 \frac{\pi}{i}} + \frac{1}{\sqrt{r_d^2 + l^2 \sin^2 \frac{\pi}{i}}} \right) \quad i = \overline{3, n}, \quad (2)$$

в случае отсутствия взаимодействия ($i=1$) считаем $U_i=0$, для $i=2$

$$U_2 = \frac{2e^2\theta^2}{\epsilon_p} \left(-\frac{1}{r_d} + \frac{1}{\sqrt{r_d^2 + l^2}} \right),$$

где e – элементарный заряд; $\pm e\theta$ – заряды диполей; l – длина диполя. Например, для карбонильной группы $\theta=0,44$; $l=0,13$ нм [10]; ϵ_p – диэлектрическая проницаемость внутри агрегата.

Потенциальная энергия взаимодействия молекул модификатора в агрегате зависит от числа молекул, входящих в агрегат, размера молекулы, диэлектрической проницаемости внутри агрегата (рис.3).

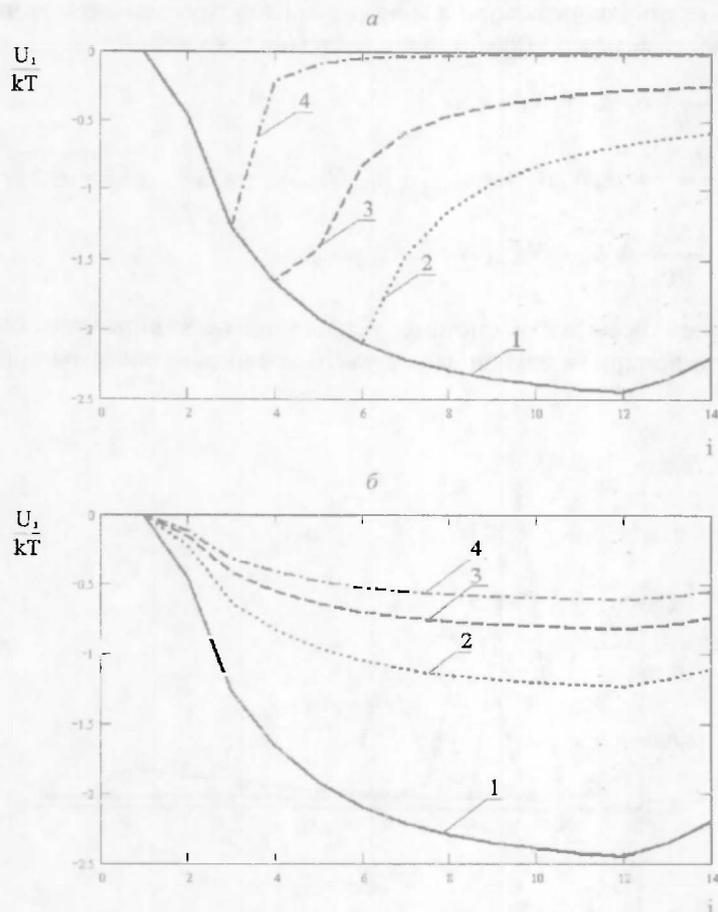


Рис.3. Зависимость величины потенциальной энергии взаимодействия между молекулами поли-НИПАА определенного агрегата от числа молекул модификатора в этом агрегате:

a – при различной величине радиуса молекулы (r): 1–0,2нм; 2–0,3; 3–0,4; 4–1нм и диэлектрической проницаемости внутри агрегата $\epsilon_p=6$; b – при различных диэлектрических проницаемостях ϵ_p внутри агрегата: 1–6; 2–12; 3–18; 4–24 и $r=0,2$ нм

Величина потенциальной энергии определяет вероятность нахождения молекулы поли-НИПАА в определенном агрегате. Диполь-дипольное взаимодействие молекул модификатора, величина энергии которого, как показывает расчет, сравнима с величиной тепловой энергии, приводит к образованию динамических агрегатов. Изменение размера агрегатов происходит за счет последовательного включения (ухода) лишь одной молекулы. Схема переходов молекул модификатора выглядит следующим образом:

$$N_1 \frac{k_1}{g_1} N_2 \frac{k_2}{g_2} \dots \frac{k_{i-1}}{g_{i-1}} N_i \frac{k_i}{g_i} \dots \frac{k_{n-1}}{g_{n-1}} N_n,$$

где $N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_n$ – число структур, образованных одной, двумя, i и n молекулами поли-НИПАА соответственно; ($k_i (i=1, n-1)$) – константы скоростей переходов от структур, образованных i молекулами модификатора, к структурам, образованным $i+1$ молекулами; g_i – константы скоростей переходов от структур, образованных $i+1$ молекулами модификатора, к структурам, образованным i молекулами.

Предполагается, что в начальный момент времени молекулы модификатора равномерно распределены в мембране. Кинетику изменения числа различных агрегатов можно представить системой уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dN_1}{dt} &= -k_1 N_1 N_1 + g_1 N_2, \\ \frac{dN_i}{dt} &= -k_i N_i N_1 + g_i N_{i+1} + k_{i-1} N_{i-1} N_1 - g_{i-1} N_i, \quad i = \overline{2, n-1}, \\ \frac{dN_n}{dt} &= k_{n-1} N_{n-1} N_1 - g_{n-1} N_n. \end{aligned} \quad (3)$$

С течением времени в системе устанавливается динамическое равновесие. В стационарном случае левые части уравнений системы обращаются в нуль.

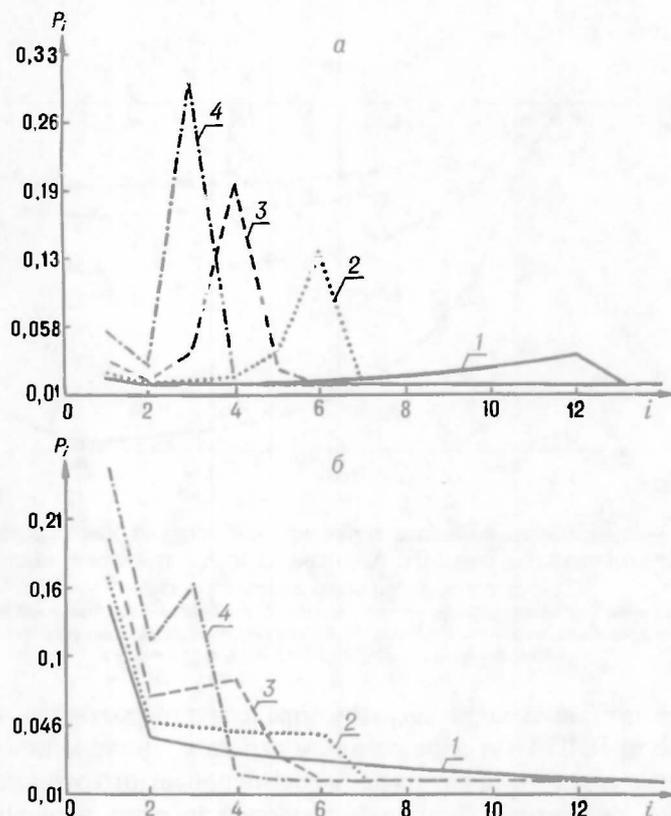


Рис.4 Вероятность нахождения молекулы поли-НИПАА в агрегате, состоящем из определенного числа молекул при различной величине радиуса молекулы (r): 1 – 0,2нм; 2 – 0,3; 3 – 0,4; 4 – 1нм и диэлектрической проницаемости внутри агрегата (ϵ_r): а – б; б – 20

Согласно теории Эйринга [10], константы скоростей определяются выражениями

$$k_i = \frac{kT}{h} \exp\left(\frac{iU_i - (i+1)U_{i+1}}{kT}\right)$$

$$g_i = \frac{kT}{h} \exp\left(\frac{-iU_i + (i+1)U_{i+1}}{kT}\right) \quad (4)$$

где k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура; h – постоянная Планка.

Решение задачи в рамках данной модели позволяет рассчитать вероятность того, что молекула модификатора находится в агрегате, состоящем из определенного числа молекул, в зависимости от радиуса молекулы и диэлектрической проницаемости внутри агрегата (рис.4).

При малых значениях диэлектрической проницаемости внутри агрегата данные зависимости характеризуются наличием ярко выраженного максимума. Интенсивность максимума увеличивается и сдвигается в сторону меньших значений i с ростом радиуса молекулы модификатора. При малых значениях i ($i < 3$) большему значению r соответствует большее значение P_i . С ростом диэлектрической проницаемости внутри агрегата максимумы сглаживаются и при больших значениях ϵ_p зависимости $P_i(i)$ становятся монотонно убывающими. Вероятность образования агрегата с большим числом молекул модификатора увеличивается с уменьшением радиуса молекул. Число молекул модификатора, не входящих в состав агрегатов, увеличивается с ростом диэлектрической проницаемости внутри агрегата.

Таким образом, предложенная математическая модель позволяет вычислить величину потенциальной энергии взаимодействия между молекулами поли-N-изопропилакриламида, получить распределение молекул модификатора между различными агрегатами и оценить размер агрегатов в зависимости от радиуса молекулы и диэлектрической проницаемости внутри агрегата.

1. Ilmain F. // Nature. 1991. Vol. 349. P.400.
2. Hirotsu S., Hirokawa Y., Tanaka T. // J.Chem. Phys. 1987. Vol. 87. №2. P.1392.
3. Ringsdorf H., Venzmer J., Winnik F.M. // Macromolecules. 1991. Vol.24. P.1678.
4. Галаев И.Ю. // Успехи химии. 1995. Т. 64. №5. С.505.
5. Otake K., Inomata H., Konno M. et al. // Macromolecules. 1990. Vol. 23. P.283.
6. Ikeuchi K., Kouchiyama M., Tomita N. et al. // Wear. 1996. Vol. 199. №2. P.197.
7. Kim J.C., Bae S.K., Kim J.D. // J.Biochem. 1997. Vol. 121. P.15.
8. Зайцев М.А., Хмельницкий А.И., Черенкевич С.Н. и др. // Низкоразмерные системы. Мн., 1998. С.19.
9. Пиментел Д., Мак-Клеллан О. Водородная связь. М., 1964. С.34.
10. Lauger P. // Biochim. Biophys. Acta. 1973. Vol. 311. P.423.

Поступила в редакцию 10.03.2000.

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СИММЕТРИЧНОГО ТРИКАРБОЦИАНИНОВОГО КРАСИТЕЛЯ (ТИКС) В РАСТВОРАХ

In water-alcoholic solution over the concentrations 10^{-3} to 10^{-7} M the polymethine dye studied is in the associated state. In blood serum the dye is associated with biological macromolecules. An analysis for the spectral and luminescence properties of the dye in serum has revealed the absence of the dye associates in this medium. In low-polarity solutions the dye takes the form of various-type ion pairs.

Исследование спектрально-люминесцентных свойств полиметиновых красителей (ПК) в биологических системах различной степени сложности является актуальной проблемой. Это связано с перспективами использования ПК в качестве фотосенсибилизаторов для фототерапии [1–9]. В работе приведены результаты исследования спектрально-люминесцентных свойств типичного фотосенсибилизатора индоленинового трикарбоцианинового красителя (ТИКС) в растворах различной природы.

Материал и методика

Исправленные спектры флуоресценции регистрировались с помощью спектрофлуориметра Fluorolog фирмы Spex, спектры поглощения – с помощью спектрофотометра PV 1251 A или Specord UV VIS. Длительность флуоресценции красителя определялась на разработанном в лаборатории импульсном спектрофлуориметре [10, 11]. Характеристики люминесценции полиметиновых красителей зависят от температуры раствора, в связи с чем образцы всегда термостатировались. Набор сред для исследований повторял их в той же последовательности, как при манипуляциях по введению красителя подопытным животным, и включал этиловый спирт, водно-спиртовую смесь (19:1) и сыворотку крови телят. Флуоресценция при изменении концентрации красителя регистрировалась в кюветах разной толщины.

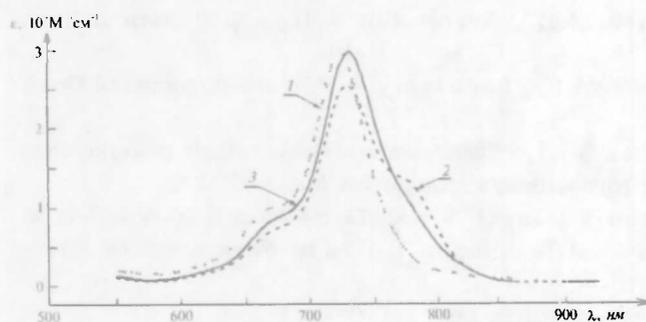
Результаты и их обсуждение

Установлено, что в этиловом спирте в диапазоне концентраций 10^{-7} – 10^{-3} М электронные спектры поглощения красителя сохраняют форму и положение, выполняется закон Бера. Спектры, квантовый выход и длительность флуоресценции для этих растворов также остаются без изменений. При введении красителя в водно-спиртовую смесь его спектр поглощения претерпевает значительные изменения. В спектре, в отличие от раствора в спирте, проявляются два максимума (на длине волны $\lambda_1=670$ нм и $\lambda_2=730$ нм), полуширина спектра увеличивается до 178 нм. В спектрах поглощения при изменении температуры наблюдается изобестическая точка, что свидетельствует о существовании в растворах двух поглощающих центров. Спектры флуоресценции красителя в водно-спиртовой смеси сдвигаются в коротковолновую область по сравнению с органическими растворителями, а квантовый выход флуоресценции уменьшается примерно на порядок. Изменение температуры или концентрации растворов приводит к обратимой деформации спектров поглощения, при нагревании образцов увеличивается интенсивность флуоресценции. Из полученных данных следует, что краситель ТИКС в водно-спиртовом растворе в диапазоне концентраций 10^{-7} – 10^{-3} М находится преимущественно в ассоциированном состоянии.

С целью выяснения агрегатного состояния красителя в крови подопытных животных проведен анализ спектрально-люминесцентных свойств ТИКС в сыворотке крови. Наибольшая концентрация красителя в сыворотке составляла величину такую же, как при его введении подопытным животным (из расчета 5 мг на килограмм массы животного). Спектры поглощения красителя, введенного с максимальной концентрацией из водно-спиртового раствора в сыворотку, приобретают форму, характерную для красителя в мономерном состоянии. Максимум полосы поглощения по сравнению с этанольным раствором испытывает батохромное смещение на 15 нм и расположен на $\lambda=740$ нм. Молярный коэффициент поглощения увеличивается по сравнению с водно-спиртовым раствором более чем в 2 раза (в максимуме составляет величину $\epsilon=1,9 \cdot 10^3 \text{ M}^{-1} \text{ см}^{-1}$). Нагревание в диапазоне $5^\circ\text{C} \div 45^\circ\text{C}$ красителя в сыворотке приводит уже не к разгоранию, а тушению флуоресценции. Полученные данные свидетельствуют, что в сыворотке краситель находится в мономерном состоянии.

Спектрально-люминесцентные характеристики ТИКС в различных средах

Растворитель	$\lambda_{\text{max}}^{\text{ab}}$, нм	$\Delta\lambda$, нм	$\epsilon_{\text{max}} \cdot 10^3 \text{ M}^{-1} \text{ см}^{-1}$	$\lambda_{\text{max}}^{\text{f}}$, нм	ϕ_{f} (10°C)	P, % (20°C)	τ , нс
Этанол	725	50	3,0	750	0,29	25,9	1,4
Вода-этанол (19:1)	670	178	0,7	738	0,02	—	—
Хлористый метилен	730	78	2,5	755	0,20	—	—
Сыворотка крови	740	57	1,9	763	0,30	46,3	1,4



Спектры поглощения красителя ТИКС в этаноле (1); хлористом метиле (2); хлористом метиле, содержащем 10^3 M триметилбензиламмонийхлорид (3)

Наблюдаемое смещение спектров поглощения и флуоресценции ТИКС в сыворотке крови по сравнению с этанольным раствором коррелирует с изменениями в спектрах при переходе к малополярным растворителям. Так, в хлористом метиле также наблюдается смещение максимума полосы

поглощения в длинноволновую область по сравнению с этанолом, увеличивается полуширина с 50 до 78 нм (рисунок). Полученные данные свидетельствуют о низкой диэлектрической постоянной окружения молекул ТИКС в сыворотке крови, что является характерным при образовании комплексов пигментов с биологическими макромолекулами [12]. Измерения степени поляризации флуоресценции показали, что в сыворотке она имеет значение 0,46, близкое к предельно возможному для неподвижных диполей. В этаноле, где время жизни молекул красителя в возбужденном состоянии такое же, как в сыворотке, степень поляризации составляет 0,26. Значение степени поляризации флуоресценции в сыворотке свидетельствует, что молекулы красителя за время жизни в возбужденном состоянии не успевают

изменить свою ориентацию в этой среде. Полученные поляризационные и спектральные данные свидетельствуют о том, что молекулы красителей в сыворотке крови связываются с биологическими макромолекулами.

В спектрах поглощения красителя в хлористом метиле, в отличие от спектров в сыворотке, на длинноволновом крае проявляется плечо в области $\lambda=775$ нм. Вклад новой полосы в суммарный спектр поглощения возрастает при разбавлении раствора красителя от $C=10^{-5}$ М до $C=10^{-6}$ М. Введение в раствор соли – триметилбензиламмонийхлорида – в концентрации $C=10^{-3}$ М приводит к исчезновению длинноволнового плеча и возрастанию поглощения в максимуме полосы. Нагревание раствора красителя в хлористом метиле от 14 до 50°C вызывает падение коэффициента поглощения в максимуме полосы и рост поглощения в длинноволновом плече. Наблюдаемые температурные изменения и солевые эффекты в спектрах поглощения красителя свидетельствуют о существовании в малополярных растворителях ионных пар различных типов. Полоса одной из них лежит в коротковолновой части спектра, а другой – в длинноволновой. Прочность пар зависит от природы аниона, температуры и от полярности растворителя [13, 14]. В связи с этим изменение одного из факторов приводит к смещению равновесия в сторону одного из типов ионных пар. Аналогичные эффекты рассматривались в работе [13] для индолениновых красителей иного строения.

Работа частично выполнена за счет средств Фонда фундаментальных исследований в рамках проекта Ф97-230.

1. Воропай Е.С., Самцов М.П., Луговский А.П. и др. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1996. №3. С. 23.
2. Voropay E.S., Samtsov M.P., Lugovskiy A.P. et al. // Experimental Oncology. 1997. Vol. 19. №1. P. 56.
3. Воропай Е.С., Самцов М.П. // Современные вопросы оптики, радиационного материаловедения, информатики, радиофизики и электроники. Мн., 1997. С. 88.
4. Schastak S.I., Enzmann V., Jungel A. et al. // Laser Medizim. 1997. Vol.13. P. 50.
5. Воропай Е.С., Самцов М.П., Чалов В.Н. и др. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1999. №1. С.8.
6. Diwu Z., Lown W.J. // Pharmac. Ther. 1994. Vol. 63. №1. P. 1.
7. Bellnier D.A., Potter W.R., Lurine A. et al. // Photochem. Photobiol. 1995. Vol. 6. № 5. P. 896.
8. Lipshutz G. S., Castro D. J., Saxton R.E. et al. // Laryngoscope. 1994. Vol. 104. P. 996.
9. Жаврид Э.А., Истомин Ю.П., Александрова Е.Н. и др. // Актуальные проблемы онкологии и медицинской радиологии. Мн., 1999. С. 396.
10. Воропай Е.С., Данилевич В.В., Чернявский А.Ф. // Журн. прикл. спектр. 1993. Т.58. № 1–2. С. 13.
11. Воропай Е.С., Самцов М.П. // Современные вопросы оптики, радиационного материаловедения, информатики, радиофизики и электроники. Мн., 1996. Ч. 2. С. 97.
12. Кочубеев Г.А., Фролов А.А., Гуринович Г.П. // Химическая физика. 1989. Т. 8. №9. С. 1184.
13. Ищенко А.А. Структура и спектрально-люминесцентные свойства полиметиновых красителей. Киев, 1994. С. 232.
14. Райхардт К. Растворители и эффекты среды в органической химии. М. 1991.

Поступила в редакцию 03.01.2000.

СОСТАВ И ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ АТОМОВ ПРИМЕСЕЙ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СИНТЕТИЧЕСКОГО АЛМАЗА

Impurity composition and crystal structure perfection of the synthetic diamonds have been investigated in the present study. The diamonds were grown on high pressure apparatus like "split sphere", using different systems of metal-dissolvents. Sectorial distribution of the impurity leads to a considerable inhomogeneity of the crystal optical characteristics and to the appearance of additional internal strains. For crystals, grown in system Ni-Fe-C, growth sector {111} contains 2,5 times as more nitrogen and several times as more Ni than the growth sector {100}. Crystals, grown in systems, which contain nitrogen and don't contain Ni, have higher degree of crystal perfection. For such crystals sectorial inhomogeneity is not revealed, and according to their optical characteristics they are close to the most perfect natural diamonds.

Значительный прогресс в технологии синтеза алмаза за последнее десятилетие позволил вплотную приблизиться к возможности выращивания крупных монокристаллов приборного качества [1,2]. В перспективе освоение промышленного синтеза таких кристаллов позволит решить проблему дефицита природного алмазного сырья для оптики и электроники. Вместе с тем для достижения этого необходимо решить ряд задач и прежде всего научиться получать высококачественные кристаллы с контролируемым примесным составом и равномерным распределением легирующих и фоновых примесей.

В настоящее время единственным способом, позволяющим выращивать крупные кристаллы алмаза, является метод температурного градиента [3,4], при котором рост кристалла осуществляется в условиях термодинамической стабильности алмаза ($P = 5,2 \div 6,0$ ГПа, $t = 1400 \div 1600$ °С) путем постепенной перекристаллизации углерода источника, растворенного в расплавленном металле, на алмазную затравку. Движущей силой массопереноса углерода является перепад температур, создаваемый между источником и затравкой. В качестве растворителей углерода используются, как правило, металлы группы железа.

Для реализации метода температурного градиента необходима специальная аппаратура, позволяющая создавать и поддерживать в течение нескольких суток высокую температуру и давление. Наибольшее распространение получили аппараты высокого давления (АВД) типа "бэлт", созданные на базе мощных гидравлических прессов [5], и беспрессовые аппараты типа «разрезная сфера» (БАРС) [6]. Структура и примесный состав монокристаллов синтетического алмаза, выращенных с использованием АВД типа «бэлт», изучены достаточно подробно [7–10]. Значительно меньше изучены характеристики кристаллов, выращенных по БАРС-технологии, хотя оптические [11] и геммологические [12] исследования показали, что наряду с общими для всех синтетических алмазов свойствами данные образцы имеют ряд существенных отличий.

В настоящей работе были проведены исследования примесного состава и совершенства кристаллической структуры синтетических алмазов, выращенных на АВД типа «разрезная сфера» с использованием различных систем металлов-растворителей.

Материал и методика

Объектами изучения являлись два монокристалла синтетического алмаза массой $0,7 \div 0,8$ карата, выращенные по БАРС-технологии с использованием

различных металлов-растворителей. Синтез кристаллов проводился на научно-производственном предприятии «Адамас». Калибровка АВД по давлению производилась в холодном виде по фазовым переходам в халькогенидных материалах. Температура в реакционной зоне контролировалась термопарой ТПП, спай которой располагался вблизи источника углерода. При определении абсолютных значений температуры вводилась поправка на давление [13].

Кристалл №1 был выращен в системе Ni-Fe-C при $P=5,4$ ГПа и $T=1450^\circ\text{C}$. Затравка была ориентирована по плоскости {111}. Кристалл имел форму кубооктаэдра, усеченного по оси симметрии L_3 , с второстепенными гранями {110} и {113}. В объеме кристалла отсутствовали видимые невооруженным глазом включения. Кристалл №2 был выращен в системе Fe-Al-C при $P=5,5$ ГПа и $T=1500^\circ\text{C}$. Алюминий в данном случае вводился как геттерирующая добавка для связывания азота [4]. Затравка была ориентирована по плоскости {001}. Кристалл имел форму кубооктаэдра, усеченного по оси симметрии L_4 , с второстепенными гранями {110} и {113}. В призатраваочной области в нижней части кристалла наблюдались два крупных (размером до 1 мм) и несколько мелких включений металла-растворителя. Для оптических исследований из кристаллов были вырезаны плоскопараллельные пластины толщиной $1\div 2$ мм (в дальнейшем пластины №1 и №2). При механической обработке (полировка) пластина №2 расколосась на две части.

Неоднородности внутреннего строения кристаллов алмаза, связанные с неравномерным распределением примесей, включениями и другими вызывающими объемные напряжения макродфектами, исследовались путем анализа в пластинах двулучепреломления [14], который проводился с помощью сопряженной с компьютером камеры, что позволило получать и обрабатывать изображения пластин с поляризационного микроскопа Р-113. Спектры пропускания в спектральном диапазоне $325\div 999$ нм зарегистрированы однолучевым спектрофотометром PV1251a фирмы Solar. Погрешность установки длины волны составляла ± 2 нм. Спектр пропускания образца №2 в области $200\text{--}800$ получен с помощью двухлучевого спектрофотометра Specord M40. Пространственная селекция поверхности образцов осуществлялась путем ограничения светового пучка диафрагмой с диаметром отверстия $0,5$ мм.

Спектры комбинационного рассеяния (далее КР) зарегистрированы при комнатной температуре с помощью спектрометра модели 1403 фирмы Spex. Регистрация спектров осуществлялась по схеме обратного рассеяния, спектральная полуширина щелей спектрометра составляла $0,3$ см^{-1} . Возбуждение производилось излучением Ag^+ -лазера с длиной волны 488 нм и $514,5$ нм. Мощность излучения на образце составляла $0,3\div 0,4$ Вт, а диаметр возбуждающего пучка составлял ~ 10 мкм. Погрешность воспроизводимости спектрометра по частоте в использованном спектральном диапазоне определялась путем анализа серии из 30 спектров, полученных из одной и той же области кристалла алмаза. Среднеквадратичные ошибки определения положения максимумов и полуширины составили $0,1$ см^{-1} и $0,02$ см^{-1} соответственно.

Результаты и их обсуждение

Практически все дефекты кристаллической решетки алмаза, оказывающие существенное влияние на его свойства, проявляются в поглощении света в УФ- и видимом диапазонах спектра [15]. На рис.1 приведены харак-

терные картины двулучепреломления. Для пластины №1 в секторах роста {111} наблюдается практически полное поглощение света в сине-фиолетовой области спектра. Избыточные внутренние напряжения также локализованы в этих секторах. Секторы роста {100}, напротив, обладают достаточно высокой прозрачностью и низким уровнем внутренних напряжений. Подобная неоднородность оптических характеристик кристалла, по-видимому, связана с неравномерным захватом атомов примеси различными секторами роста. Примесный состав основных секторов роста кристалла №1 был исследован путем анализа спектров пропускания в УФ- и видимом диапазонах (рис.2). Для обоих секторов роста характерно наличие сильного поглощения в коротковолновой части спектра ($\lambda < 550$ нм). Для сектора роста {111} полное поглощение наблюдается при $\lambda < 420$ нм, а для сектора роста {100} – при $\lambda < 350$ нм (рис. 2а). В длинноволновой части спектра для сектора роста {100} поглощение света отсутствует. Для сектора роста {111} наблюдается монотонное уменьшение пропускания при приближении к ближней ИК-области, на фоне этого уменьшения заметны слабые широкие полосы с максимумами вблизи 650 и 850 нм (рис. 2б).

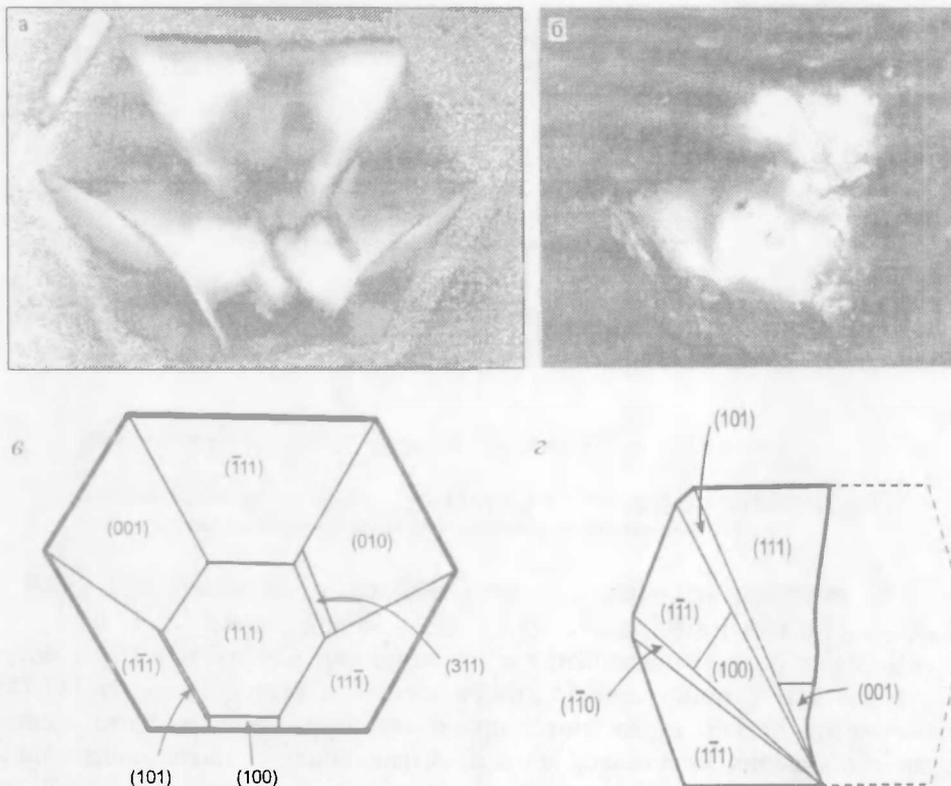


Рис. 1. Фотография пластины №1 в скрещенных поляризаторах (а); схема секториального строения пластины №1(б); фотография пластины №2 в скрещенных поляризаторах (в); схема секториального строения пластины №2 (г)

Поглощение на длинах волн $\lambda < 550$ нм связано с присутствием в решетке алмаза одиночных атомов азота в замещающем положении (С-дефект) [15]. Смещение в секторе роста {100} края примесного поглощения в коротковолновую область говорит о меньшем содержании С-дефектов в этом сек-

торе. Абсолютная концентрация С-дефектов может быть оценена по поглощению на длине волны $\lambda = 477$ нм [15]. Между коэффициентом поглощения (α_{477}) и концентрацией С-дефектов (N_C) существует следующая зависимость:

$$N_C = 2,8 \cdot 10^{18} \alpha_{477} \quad (1)$$

(размерность $N_C - \text{см}^{-3}$; $\alpha_{477} - \text{см}^{-1}$).

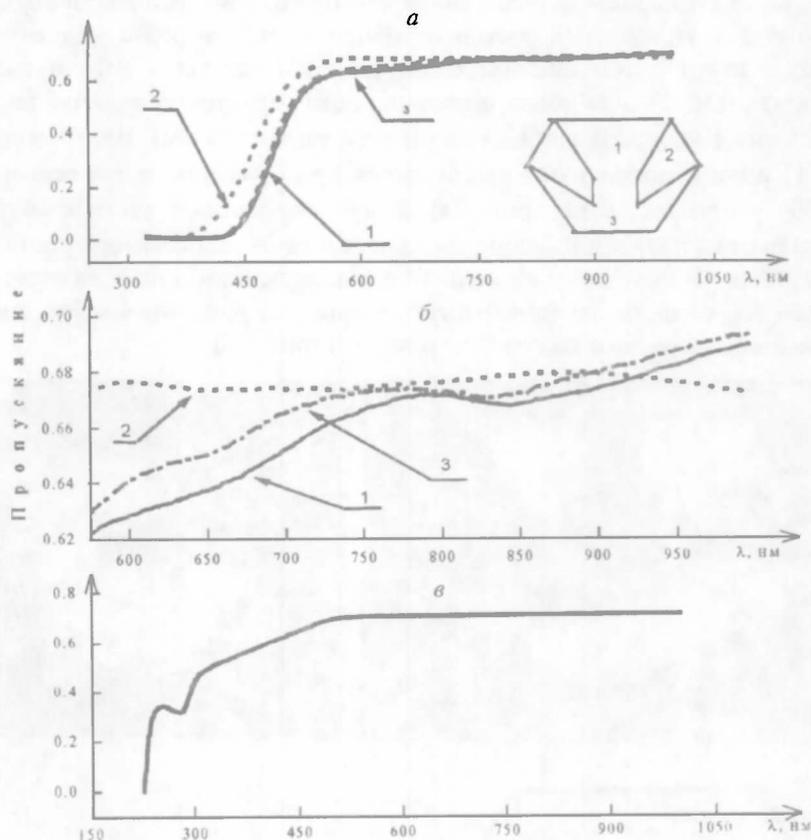


Рис 2. Спектры пропускания: а, б – образец №1 (номера спектров соответствуют отмеченным на пластине секторам); в – образец №2

Для кристалла №1 концентрация С-дефекта в секторах роста $\{100\}$ и $\{111\}$ составляет $1,6 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и $3,9 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ соответственно.

Широкие полосы поглощения с максимумами 650 нм и 850 нм могут быть связаны с присутствием атомов никеля в решетке алмаза [17,18]. Обычно эти полосы проявляются при температуре жидкого азота в спектрах поглощения кристаллов алмаза, выращенных в никельсодержащих системах. Зарегистрированные при комнатной температуре полосы 650 нм и 850 нм свидетельствуют об относительно высокой концентрации примеси никеля в секторе роста $\{111\}$. Монотонное возрастание поглощения при переходе к ближнему ИК-диапазону, наблюдаемое для сектора роста $\{111\}$, по-видимому, обусловлено проявлением разорванных связей на дислокациях [19].

Образец №2 практически прозрачен в сине-фиолетовой области спектра. Секториальное строение не проявляется и в картинах двулучепреломления. Наблюдаемые избыточные внутренние напряжения связаны с включениями

металла-растворителя. Спектр пропускания в УФ- и видимом диапазонах для образца №2 приведен на рис. 2в. Отчетливо виден край истинно фундаментального поглощения алмаза в области 225 нм, что говорит о высокой степени структурного совершенства кристалла. Наряду с этим наблюдается полоса поглощения с максимумом в области 275 нм, связанная с наличием в решетке алмаза С-дефектов [15]. Иные полосы поглощения в УФ- и видимом диапазоне отсутствуют. По интенсивности поглощения на длине волны $\lambda=275$ нм можно определить общую концентрацию азота в исследованном кристалле с использованием выражения [15]:

$$N_C = 1 \cdot 10^{17} \alpha_{275} \quad (2)$$

(размерность N_C – см^{-3} ; α_{275} – см^{-1} [20]).

Для кристалла №2 концентрация азота составляет $4 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. По своим оптическим характеристикам этот кристалл близок к наиболее чистым природным кристаллам типа Па (согласно общепринятой классификации [15]).

В спектрах КР кристаллов кубической сингонии с пространственной группой симметрии O_h^7 , к которым относится алмаз, разрешенным является колебание, соответствующее волновому числу $\sim 1332 \text{ см}^{-1}$, а также обертоны и составные колебания с участием других фононов [16]. Спектр КР первого порядка кристаллов алмаза состоит из одной узкой линии с волновым числом 1332 см^{-1} . Примеси, включения, внутренние напряжения в кристалле, присутствие разупорядоченных или сегрегированных фаз приводят к размыванию и сдвигу рамановской линии, появлению дополнительных широких полос в спектре, полуширина линии 1332 см^{-1} (FWHM-фактор) служит критерием чистоты и качества алмаза.

Спектры КР для каждого из исследованных образцов регистрировались в нескольких точках. Для пластины №1 отдельно рассматривались секторы роста $\{100\}$ и $\{111\}$. Во всех экспериментах в спектрах КР первого порядка наблюдалась узкая линия с волновым числом $1332 \pm 0,5 \text{ см}^{-1}$. Заметного различия в положении максимума рамановской линии для различных секторов роста в образце №1 и между образцами №1 и 2 обнаружено не было. Вместе с тем было отмечено увеличение полуширины линии 1332 см^{-1} с ростом концентрации примесей в исследуемой области (рис. 3а). Наименьший FWHM-фактор $1,69 \text{ см}^{-1}$ был зафиксирован для кристалла №2, что близко к значению $1,65 \text{ см}^{-1}$, определенному в [16] для наиболее совершенного природного алмаза типа Пб. Незначительное уширение рамановской линии, по видимому, связано с наличием включений металла-растворителя. Наибольший FWHM-фактор, равный $2,04 \text{ см}^{-1}$, был зафиксирован в секторах роста $\{111\}$ кристалла №1, которые содержат более высокие концентрации примесей.

Известно, что увеличение полуширины рамановской линии пропорционально упругой деформации кристаллической решетки [21]. При легировании кристаллов деформация возникает вследствие различия в ковалентных радиусах атомов матрицы и примеси [21] и может быть определена из соотношения:

$$\epsilon = [1 + f(\Gamma^3 - 1)]^{1/3} - 1, \quad (3)$$

где f – атомная доля примеси, Γ – отношение ковалентных радиусов атомов растворенной примеси и углерода. В случае атомов азота, расположенных в узлах решетки алмаза (С-дефект), Γ составляет 0,922. Для сектора роста $\{100\}$ кристалла №1 в поглощении света проявляется только примесь азота. Уширение рамановской линии в этой области по сравнению с природным

алмазом типа Пб составляет $0,11 \text{ см}^{-1}$. Если считать, что это уширение вызвано примесью азота, то для сектора роста $\{111\}$ кристалла №1 наличие С-дефектов должно приводить к значению FWHM-фактора, равному $1,92 \text{ см}^{-1}$ (рис. 3б). Более высокое значение FWHM-фактора, определенное для этой области, по нашему мнению, связано с присутствием в секторах роста $\{111\}$ кристалла №1 примеси никеля. Если предположить, что все атомы никеля в решетке алмаза находятся в замещающем положении, с использованием уравнения (3) можно определить концентрацию этой примеси. Проведенные оценки показывают, что с учетом частичной компенсации внутренних напряжений, создаваемых атомами азота и никеля (Γ в случае никеля составляет 1,61), FWHM-фактор, равный $2,04 \text{ см}^{-1}$, соответствует концентрации никеля $\sim 7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Это достаточно разумное значение, которое коррелирует с данными в [22].

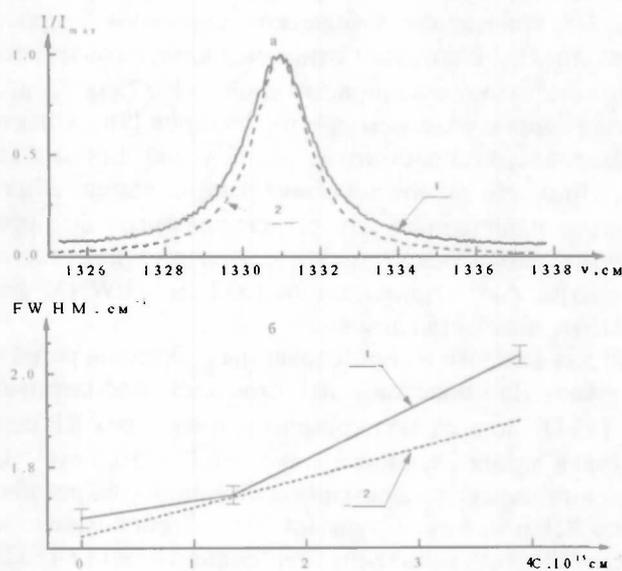


Рис 3. Спектры комбинационного рассеяния – а образца №1 для секторов роста: $\{111\}$ – 1; $\{001\}$ – 2. Значения FWHM-фактора – б для различных секторов кристаллов: 1 – экспериментальные данные; 2 – расчетные значения, полученные из соотношения (3) в предположении, что уширение рамановской линии вызвано только примесью азота

Сравнение полученных нами результатов исследований с приведенными в [7–10] показывает, что исследованные кристаллы синтетического алмаза, выращенные с использованием БАРС-технологии, по примесному составу и характеру распределения примеси близки к кристаллам, получаемым в лабораториях фирмы «De Beers» с использованием АД типа «бэлт». Следует, однако, отметить менее сложное секториальное строение исследованных кристаллов по сравнению с описанными в [8,9].

* * *

На основании проведенных исследований кристаллов синтетического алмаза, выращенных на АД типа «разрезная сфера» с использованием различных систем металлов-растворителей, можно сделать следующие выводы.

1. Для кристаллов, выращенных в системе Ni-Fe-C, наблюдается значительная секториальная неоднородность распределения примеси. Сектор роста {111} содержит в 2,5 раза больше азота и в несколько раз больше никеля, чем сектор роста {100}. Концентрация азота в секторе роста {111} достигает $4 \cdot 10^{19}$ см⁻³, а содержание никеля оценивается на уровне 10^{19} см⁻³. Секториальное распределение примеси приводит к существенной неоднородности оптических характеристик кристалла и возникновению избыточных внутренних напряжений.

2. Кристаллы, выращенные в системах, содержащих геттеры азота и не содержащих никель, имеют более высокую степень кристаллического совершенства. Секториальная неоднородность для них не проявляется. По своим оптическим характеристикам (прозрачность в УФ- и видимом диапазонах спектра, полуширина рамановской линии) эти кристаллы близки к наиболее совершенным природным алмазам.

Работа выполнена частично за счет средств Фонда фундаментальных исследований Республики Беларусь в рамках проекта Ф99-174.

1. Shuji Y. // J.Soc.Mater.Sci.Jap. 1993. Vol.42. N176. P.588.
2. Sumiya H., Satoh S. // Diam.Rel.Mater. 1996. N5. P.1359.
3. Strong H.M., Hanneman R.E. // J.Chem. Phys. 1967. Vol.46. N9. P.3668.
4. Strong H.M., Chrenko R.M. // J.Phys.Chem. 1971. Vol.75. N12. P.3668.
5. Hall H.T. // Rev.Sci.Instr. 1960. Vol.31. N2. P.125.
6. Пальянов Ю.Н., Малиновский И.Ю., Борздов Ю.М. и др. // ДАН СССР. 1990. Т.315. №5. С.1221.
7. Frank F.C., Lang A.R., Evans D.J.F. et.al. // J.Cryst.Growth. 1990. Vol.100. P.354.
8. Burns R.C., Cvetkovic V., Dodge C.N. et.al. // J.Cryst.Growth. 1990. Vol.101. P.257.
9. Wierzchowski W., Moore M., Makepeace A.P.W. et.al. // J.Cryst.Growth. 1991. Vol.114. P.209.
10. Sumiya H., Toda N., Nishibayashi Y. et.al. // J.Cryst.Growth. 1997. Vol.178. P.185.
11. Анцыгин В.Д., Борздов Ю.М., Гусев В.А. и др. // Автометрия. 1995. №5. С.10.
12. Shigley J.E., Fritsch E., Koivula J.I. et.al. // Gems and Gemology. 1993. Vol.29. N1. P.228.
13. Hanneman R.E., Strong H.M. // J.Appl.Phys. 1965. Vol.36. P.523.
14. Варшавский А.С. Аномальное двулучепреломление и внутренняя морфология алмаза. М., 1968.
15. Бокий Г.Б., Безруков Г.Н., Ключев Ю.А. и др. Природные и синтетические алмазы. М., 1984.
16. Solin S.A., Ramdas A.E. // Phys.Rev. 1970. Vol.B1. N1. P.1687.
17. Lawson S.C., Kanda H. // Diam.Rel.Mater. 1993. N.2. P.130.
18. Lawson S.C., Kanda H., Sekita M. // Phil.Mag.B. 1993. Vol.68. N1. P.39.
19. Природные алмазы России / Под ред. В.Б.Кваскова. М., 1997.
20. Chrenko R.M., Strong H.M., Tuft R.E. // Phil.Mag. 1971. Vol.23. P.313.
21. Carruthers J.R., Hoffman R.B., Ashner J.D. // J.Appl.Phys. 1963. Vol.34. P.3389.
22. Самойлович М.И., Безруков Г.Н., Бутузов В.П. // Письма в ЖЭТФ. 1971. Т.14. Вып.10. С.325.

Поступила в редакцию 21.03.2000.

ВОЗДЕЙСТВИЕ НА КРЕМНИЙ УСКОРЕННЫХ ПОТОКОВ ЛАЗЕРНО-ЭРОЗИОННОЙ ПЛАЗМЫ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ

The processes of silicide and wurtzite-phase formation in Si bombarded by Hf, Ta and W beams with 10 keV energy and the dose of irradiation $5 \cdot 10^{15}$ and $2,5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ are investigated by using the methods of TEM and Rutherford backscattering spectroscopy. Possible mechanisms of structure-phase transformations are discussed.

Использование в ионных источниках различного назначения плазмы, создаваемой мощным монохроматическим излучением, является весьма перспективным благодаря возможности получения большого количества ионов любых твердых веществ. В свою очередь, эрозионные потоки, образующиеся при облучении твердотельных мишеней импульсным лазерным излучением, с успехом используются для вакуумного осаждения пленок. Увеличение энергии ионов плазмы путем приложения ускоряющего напряжения позволяет реализовать процесс осаждения, ассистируемого ионным пучком (ion beam assisted deposition) в импульсном режиме. Нестационарный характер процесса, несомненно, должен проявляться в особенностях воздействия таких импульсных потоков на полупроводниковую подложку. Цель настоящей работы и состояла в изучении процессов разупорядочения приповерхностных слоев кремния, подвергнутых интенсивной импульсной обработке ионно-плазменными потоками тугоплавких металлов.

Материал и методика

В настоящей работе для получения низкоэнергетических ионов была применена установка с лазерно-плазменным источником ионов [1]. Для получения плазмы использовался лазер на алюмо-иттриевом гранате, активированном неодимом (АИГ(Nd^{3+})), работающий в режиме модулированной добротности (длина волны 1,06 мкм, длительность и энергия импульса 25 нс и 20 мДж соответственно). Луч мог фокусироваться на мишени из Hf, Ta или W в пятно диаметром до 100 мкм. Вакуум в рабочей камере был $5 \cdot 10^{-5}$ Па. Ионный пучок формировался с помощью электростатического поля определенной конфигурации. Плотность ионного тока в импульсе длительностью около 20 мкс составляла 1–2 мА/см² при ускоряющем напряжении 10 кэВ, а средняя плотность была около 4 мкА/см² при частоте следования ионных импульсов 25 Гц. Доза в пересчете на однократно заряженные ионы составляла $5 \cdot 10^{15}$ и $2,5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$. Часть образцов после имплантации отжигали в вакууме при температуре 800°C в течение 30 мин.

Структуру и фазовый состав модифицированных слоев изучали методами резерфордского обратного рассеяния (РОР) каналированных ионов He^+ , просвечивающей электронной микроскопии и дифракции электронов при ускоряющем напряжении 100 кВ.

Результаты и их обсуждение

Результаты дифракционных исследований образцов после облучения, а также последующей термообработки суммированы в таблице.

Отметим следующие характерные особенности: 1) аморфизация приповерхностного слоя не является сплошной как следовало бы ожидать, исходя из дозово-энергетических параметров пучка тяжелых ионов; 2) для дозы $D = 2,5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ в процессе облучения происходит образование силицидных фаз W и Ta, обогащенных металлом, но оно не имеет места в случае Hf, а

после отжига формируются дисилициды W и Ta и смесь различных фаз силицидов Hf; 3) для дозы $D = 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ в процессе облучения не наблюдается синтез силицидных фаз W, Ta и Hf, а после отжига формируются силициды, обогащенные металлом; 4) во всех случаях образуются включения 2H-Si.

Структурно-фазовый состав облученных образцов

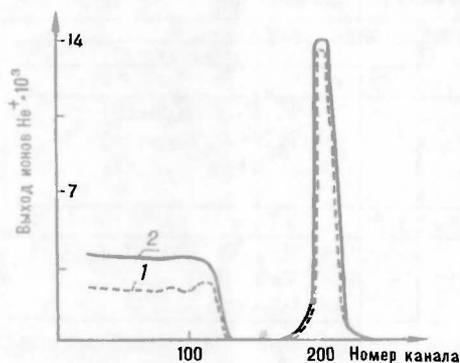
Материал мишени	Состав и структура фаз в приповерхностном слое	
	После облучения	После отжига при 800 °С
Доза имплантации $D = 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$		
Hf	<i>c</i> -Si, микродвойники, <i>a</i> -Si	<i>c</i> -Si, 2H-Si, Hf ₅ Si ₃ (Г)
Ta	2H-Si	<i>c</i> -Si, 2H-Si, Ta ₅ Si ₃ (Г)
W	<i>c</i> -Si, 2H-Si	<i>c</i> -Si, 2H-Si, W ₅ Si ₃ (Т)
	<i>c</i> -Si, 2H-Si	
Доза имплантации $D = 2,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$		
Hf	<i>c</i> -Si, <i>a</i> -Si, 2H-Si, Hf	<i>c</i> -Si, 2H-Si, HfSi (0), HfSi ₂ (0), Hf ₅ Si ₃ (Г)
Ta	<i>c</i> -Si, <i>a</i> -Si, 2H-Si, Ta ₂ Si (Т), Ta ₅ Si ₃ (Г)	<i>c</i> -Si, 2H-Si, TaSi ₂ (Г)
W	<i>c</i> -Si, <i>a</i> -Si, 2H-Si, W ₅ Si ₃ (Т)	<i>c</i> -Si, 2H-Si, WSi ₂ (Т)

Примечание: * *c*-Si – монокристаллический кремний, *a*-Si – аморфный кремний, 2H-Si – гексагональный кремний типа вюрцита; Г – гексагональная, О – орторомбическая, Т – тетрагональная

Детальный анализ полученных результатов показал, что одной из основных причин проявления отмеченных особенностей является присутствие в эрозионной плазме тантала и вольфрама капельной фракции. Вероятно, частицы жидкой фазы выносятся газовым потоком из зоны эрозии, хотя нельзя исключить и образование их при конденсации пара в процессе его расширения в вакууме. Образование силицидных фаз происходит в местах падения частиц на кремниевую подложку и в ближайшей окрестности, где за счет локального нагрева создаются благоприятные термические условия также и для кристаллизации аморфизованного слоя кремния. В случае Hf выраженные следы капельной фракции практически отсутствуют. Возможное объяснение этому – значительно меньшие (примерно на 1000°С) температуры плавления и кипения Hf по сравнению с таковыми для Ta и W, вследствие чего эрозионный поток в случае гафниевого мишени состоит в основном из ионизированных и нейтральных атомов и небольших кластеров. Кроме того, теплота образования силицидов Hf приблизительно в 2 раза выше, чем, например, в случае W. В целом же последовательность формирования силицидных фаз подчиняется известным закономерностям [2].

Несомненный интерес как и при стационарной интенсивной имплантации представляет образование метастабильной вюрцитной фазы кремния. Включения 2H-Si наблюдаются в кристаллизованных областях, т.е. там, где выполняются условия необходимого температурного диапазона для их образования (около 350–700°С [3]). Так же, как и при стационарной сильноточной имплантации [4], включения 2H-Si сосредоточены в основном за областью пробега ионов, о чем свидетельствует наличие характерного размытого пика на спектре РОР для каналированного лучка в области 180–200 каналов (рисунок). Тот факт, что включения 2H-Si наблюдаются и после отжига при 800°С, может свидетельствовать о существенной роли примеси, прежде всего в виде преципитатов второй фазы в области их стабилизации. В этой связи уместно заметить, что 2H-Si не зафиксирован в случае облучения кремния собственными ионами в аналогичных описанным выше ста-

ционных интенсивных режимах [5]. Нам не удалось его обнаружить в экспериментах по "горячей" имплантации P^+ и Ag^+ с низкими (не более 1 мкА/см^2) плотностями ионного тока и дозами не выше $5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$. Таким образом, имплантация ионов примесных элементов с высокими плотностями ионного тока создает специфические условия для образования гексагонального кремния, а также других необычных фаз с участием примеси.



Спектры резерфордского обратного рассеяния ионов He^+ с энергией 1.5 МэВ после обработки кремния плазмой тантала с дозой ионов $2,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$:

1 — спектр для каналированного вдоль $\langle 111 \rangle$ пучка,
2 — спектр для неориентированного пучка

Механизм образования $2H-Si$ до сих пор остается до конца не выясненным. В [3] было предложено, что фазовый переход в Si из алмазоподобной структуры в вюрцитную происходит по мартенситному типу и может быть вызван одноосным напряжением сжатия величиной около 20 ГПа. Мы полагаем, что такие локальные давления могут возникать при генерации имплантируемыми ионами ударных волн либо упругих волн напряжений большой амплитуды и их суперпозицией (в последнем случае проявляется роль интенсивных потоков ионов). Концепция ударных волн была использована в [6] для объяснения многообразия фаз, в том числе и высокого давления, образующихся в Fe при имплантации N^+ . Предполагается, что ударные волны развиваются в процессе диссипации энергии в пике атомных смещений и движутся со сверхзвуковой скоростью, создавая области с экстремально высокими давлениями (десятки и сотни ГПа) и температурами. Из-за весьма короткого времени жизни пика ($10^{-10} - 10^{-12} \text{ с}$) могут формироваться только такие фазы, которые не требуют контролируемых диффузией превращений кристаллической решетки, и их образование возможно только путем деформации решетки. Согласно [7], давление на фронте ударной волны выражается зависимостью $\bar{r} = q / \bar{K}_p$, где q — введенная энергия, отнесенная к единице площади (Дж/м^2), \bar{R}_p — средний проективный пробег иона в кремнии, который в нашем случае составляет около 15 нм [8]. Средний диаметр области наибольшего выделения энергии в ядерных процессах составляет около 4 нм [9]. Таким образом, получаем значение около 8,5 ГПа. Суперпозиция волн от близко расположенных источников должна повышать это значение, так что в некоторых случаях критерий, представленный в [3], будет выполняться. Достаточно очерченную область локализации включений вюрцитной фазы кремния в диапазоне $\bar{R}_p - 2 \bar{R}_p$ можно объяснить эффектом динамического отжига протяженных дефектов структуры (макроточечных дефектов, каковыми являются и включения $2H-Si$ в матрице) в области максимума упругого торможения ионов [10], которая смещена относительно \bar{R}_p ближе к поверхности.

Работа выполнена при частичной поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований.

1. Альтудов Ю.К., Быковский Ю.А., Неволин В.Н. // Журн. техн. физики. 1980. Т. 50. Вып. 1. С. 178.
2. Мьюрарка Ш. Силициды для СБИС. М., 1986.
3. Tan T.Y., Foll Y., Hu S.M. // Phil. Mag. A. 1981. Vol. 44. N 1. P. 127.
4. Комаров Ф.Ф., Котов Е.В., Новиков А.П. и др. // Физика и техника полупроводников. 1987. Т. 21. Вып. 10. С. 1863.
5. Holland O.W., Narayan J. // Mater. Res.Soc. Symp.Proc. 1984. Vol. 27. P. 235.
6. Rauschenbach B., Kolitsch A., Hohmuth K. // Phys.Stat.Sol.(a). 1983. Vol. 80. N2. P.471.
7. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М., 1967.
8. Буренков А.Ф., Комаров Ф.Ф., Кумахов М.А., Темкин М.М. Пространственные распределения энергии, выделенной в каскаде атомных столкновений в твердых телах. М., 1985.
9. Howe J.M., Rainville M.H. // Nucl. Instr. Meth. B. 1987. Vol. 19/20. N. 1. P. 61.
10. Андреев В.С., Ефимов С.Б., Комаров Ф.Ф. и др. // Письма в ЖТФ. 1985. Т. 11. N 18. С. 1110.

Поступила в редакцию 11.01.2000.

УДК 669.76:5373

Э.Е.ГРЕЧАННИКОВ, В.Г.ШЕПЕЛЕВИЧ

СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА Bi-15 ат.% Sb, ЛЕГИРОВАННОГО СЕРОЙ И ГЕРМАНИЕМ

Quickly quenched foils of Bi-15 at.% Sb, doped germanium and sulphur, have the texture ($10\bar{1}2$). In Bi-15 at.% Sb alloy germanium is an acceptor, sulphur - donor. The electric properties of the alloy depend on impurities and temperature.

Сплавы висмут-сурьма, содержащие 4–20 ат.% Sb, являются узкозонными полупроводниками в области низких температур и используются в качестве термоэлектрических материалов [1]. Олово и теллур ведут себя в данных сплавах как акцептор и донор соответственно [2,3]. Влияние других легирующих элементов, например Ge и S, принадлежащих IV и VI группам, на структуру и электрические свойства сплавов висмут-сурьма изучено недостаточно из-за их малой равновесной растворимости. Но в последние тридцать лет успешно развиваются методы изготовления материалов сверхбыстрой закалкой из жидкого состояния, которые позволяют повысить взаимную растворимость сплавляемых элементов [4], что существенным образом влияет на формирование структуры. В связи с этим цель данного исследования – выяснить закономерности формирования структуры сплава Bi-15 ат.% Sb, легированного германием и серой, а также электрическую активность легирующих элементов и их влияние на электрические свойства тройных сплавов Bi-15 ат.% Sb-Ge и Bi-15 ат.% Sb-S.

Фольги сплавов Bi-15 ат.% Sb, содержащих до 0,8 ат.% германия и серы, были изготовлены сверхбыстрой закалкой из жидкого состояния. Капля расплава (~0.2 г) выплескивалась на внутреннюю полированную поверхность быстро вращающегося медного цилиндра. Их толщина составляла от 20 до 50 мкм. Согласно расчету [5], скорость охлаждения достигала 10^6 К/с.

Металлографические исследования быстрозатвердевшей фольги осуществлены с помощью микроскопа ММУ-3. Травление шлифов происходило в 30%-м растворе азотной кислоты в этиловом спирте. Рентгеноструктурный анализ выполнен на дифрактометре ДРОН-3 в медном излучении. Индици-

рование рентгенограмм проведено согласно [6]. Удельное электросопротивление ρ , коэффициент Холла R и дифференциальная термоэдс α были измерены в интервале 77–300 К.

Быстрозатвердевшие фольги сплава Bi-15 ат.% Sb имеют мелкозернистую структуру. Средний размер зерен $d=4,8\pm 0,6$ мкм. Величина ошибки рассчитана для доверительной вероятности, равной 0,5. Легирование сплава Bi-15 ат.% Sb германием практически не изменяет средний размер зерна, а легирование серой приводит к его уменьшению почти в два раза. Фольги сплавов Bi-15 ат.% Sb-Ge и Bi-15 ат.% Sb-S характеризуются четко выраженной текстурой $(10\bar{1}2)$. Почти 95% объема фольг ориентировано плоскостями $\{10\bar{1}2\}$ параллельно их внешней поверхности. Образование текстур $(10\bar{1}2)$ в полуметаллах и их сплавах обусловлено их кристаллической структурой и ориентацией ковалентных связей, имеющих определяющее влияние на рост кристаллитов.

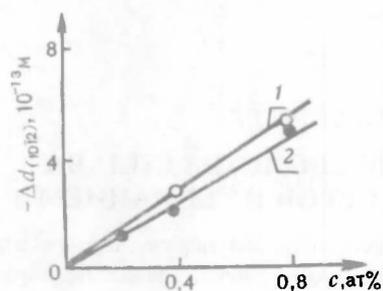


Рис.1. $\Delta d_{(10\bar{1}2)}$ в зависимости от концентрации серы (1) и германия (2)

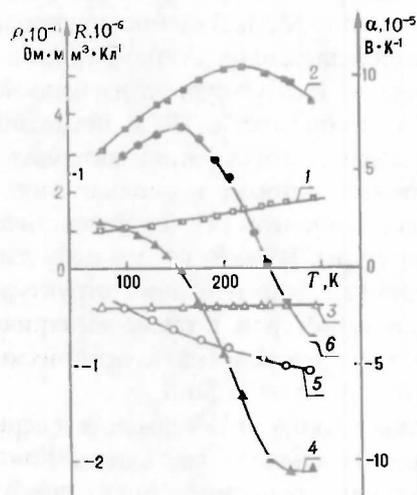


Рис.2. Температурные зависимости ρ (1,2), R (3,4) и α (5,6) для Bi-15 ат.% Sb-0,8 ат.% S (1,3,5) и Bi-15 ат.% Sb-0,8 ат.% Ge (2,4,6)

На рис.1 представлены зависимости межплоскостного расстояния $\Delta d_{(10\bar{1}2)}$, определяемого по положению дифракционной линии $(2\bar{0}24)$, от концентрации Ge и S в сплаве Bi-15 ат.% Sb. Их линейный характер указывает на то, что быстрозатвердевшие сплавы Bi-15 ат.% Sb-0,8 ат.% Ge и Bi-15 ат.% Sb-0,8 ат.% S являются твердыми растворами.

Зависимости кинетических свойств фольг сплавов Bi-15 ат.% Sb-0,8 ат.% Ge и Bi-15 ат.% Sb-0,8 ат.% S от температуры приведены на рис.2. Наблюдается монотонное увеличение удельного электросопротивления, абсолютного значения дифференциальной термоэдс с повышением температуры и постоянство величины коэффициента Холла фольги сплава Bi-15 ат.% Sb-0,8 ат.% S в интервале 77–300 К. Кроме того, коэффициент Холла и дифференциальная термоэдс в указанном интервале температур отрицательны. Наблюдаемые факты указывают на то, что кинетические свойства данного сплава определяются электронами. Это возможно при условии, что сера является донором в сплаве Bi-15 ат.% Sb. Концентрация и подвижность электронов, рассчитанные в рамках однозонной изотропной

модели, равны $n=9 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3}$ и $\mu=0,6 \frac{\text{см}^2}{\text{Вс}}$ при 77 К. Электрическая актив-

ность легирующих элементов в висмуте, сурьме и их сплавах характеризуется коэффициентом отдачи $\eta = \frac{\Delta n}{\Delta c}$ (Δn – изменение концентрации электронов, вызванное изменением концентрации легирующего элемента Δc). Расчет показал, что величина коэффициента отдачи для серы в сплаве Bi-15 ат. % Sb равна $\eta = 0,04$.

Положительный знак R и α фольг сплава Bi-15 ат. % Sb-0,8 ат. % Ge в низкотемпературной области обусловлен дырками. Последнее возможно, если Ge в сплаве Bi-15 ат. % Sb является акцептором. Концентрация и подвижность дырок равны $p = 1,3 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-3}$ и $v = 0,15 \frac{\text{см}^2}{\text{вс}}$ при 77 К. Коэффициент отдачи для германия в сплаве Bi-15 ат. % Sb равен $\eta = -0,05$ в низкотемпературной области. Температурные зависимости $\rho(T)$ и $\alpha(T)$ имеют максимум. Также $R < 0$ и $\alpha < 0$ в области комнатных температур. Такое поведение кинетических свойств вызвано появлением в зоне проводимости из-за теплового возбуждения электронов, подвижность которых значительно выше подвижности дырок [1].

Работа выполнена при поддержке Фонда фундаментальных исследований Республики Беларусь (проект № Ф98-054).

1. Гицу Д.В., Голбан Т.М., Канцер В.Г., Мунтяну Ф.Н. Явления переноса в висмуте и его сплавах. Кишинев, 1983.
2. Voiko M.P., Redko N.A. // Phys. Stat. Sol (b). 1987. Vol.140. P.K 121.
3. Issi G-P., Saunders G.A. // Rev. quest. sci. 1974. Vol.145. P. 381.
4. Физическое металловедение / Под ред. Р.У.Кана и П.Хаазена. М., 1987. Т.2.
5. Мирошниченко И.С. Закалка из жидкого состояния. М., 1982.
6. Миркин Л.И. Рентгеноструктурный анализ. М., 1976.
7. Вассерман Г., Гревен И. Текстуры металлических материалов. М., 1969.
8. Шепелевич В.Г. // Кристаллография. 1991. Т.36. №1. С.238.

Поступила в редакцию 28.09.99.

УДК: 621.029

Ю.И.ДУДЧИК, Н.Н.КОЛЬЧЕВСКИЙ, Ф.Ф.КОМАРОВ

ФОРМИРОВАНИЕ МИКРОПУЧКОВ ЖЕСТКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ ПОМОЩИ ПРЕЛОМЛЯЮЩЕЙ ЛИНЗЫ

A new refractive microcapillary lens for hard X-rays is described. The spherical aberrations of the lens are calculated. The possibility of the production of micrometer sized X-ray beams by using the refractive microcapillary X-ray lens and a microfocuss X-ray tube are discussed.

Как известно [1], показатель преломления n рентгеновских лучей в веществе выражается следующим образом:

$$n = 1 - \delta - i\beta, \quad (1)$$

где $1 - \delta$ – действительная часть показателя преломления среды; β – коэффициент, характеризующий поглощение рентгеновского излучения веществом.

Вдали от краев поглощения величина δ обратно пропорциональна квадрату энергии фотонов, а ее значения лежат в диапазоне $10^{-5} - 10^{-7}$. Например, для стекла $\delta = 7 \cdot 10^{-6}$, $\beta = 9,5 \cdot 10^{-8}$ для рентгеновских фотонов с энергией 8 кэВ. Малое значение величины δ делает практически невозможным осуше-

ствление фокусировки пучков рентгеновского излучения с помощью двояковогнутой линзы [1], поскольку фокусное расстояние такой линзы F , определяемое соотношением:

$$F=R/2\delta, \quad (2)$$

где R – радиус линзы, достаточно большое (10–50 м) даже при небольших значениях (сотни микрометров) апертуры линзы.

В свою очередь, развитие синхротронной техники и появление синхротронов третьего поколения, таких как SPring-8 (Япония), ESRF (Франция), APS (США), а также успехи фирм KEVEX и PHILIPS в разработке мощных микрофокусных рентгеновских трубок, делают оправданным интерес даже к таким, казалось бы неэффективным с практической точки зрения (из-за малости апертуры), преломляющим линзам для рентгеновских лучей [2].

Попытки уменьшить фокусное расстояние линзы привели к созданию “многоэлементной” преломляющей рентгеновской линзы для фотонов с энергией 5–30 кэВ, впервые предложенной А.Снегиревым и др.[3], которая состоит из большого числа (10–300) двояковогнутых линз, изготовленных из материала с малым порядковым номером (бериллий, углерод, полимер, алюминий) и расположенных соосно. Фокусное расстояние такой линзы определяется следующим соотношением [3]:

$$F=R/(2\delta N), \quad (3)$$

где N – число линз. Как видно из (3), фокусное расстояние “многоэлементной” линзы в N раз меньше, чем фокусное расстояние одной линзы, и может достигать значения 1 м при $R=0,5$ мм, что вполне приемлемо для практического применения. Теоретически достижимое значение плотности фотонов в фокусе линзы в 100–1000 раз превышает значение плотности потока фотонов в исходном пучке [3]. На практике к настоящему времени достигнуто усиление плотности потока, равное 177 для фотонов с энергией 15 кэВ [4].

Конструкция линзы допускает целый ряд технических решений: известны цилиндрические линзы, имеющие диаметр 1–2 мм и полученные методом сверления 50–100 последовательно расположенных отверстий в пластине из алюминия или бериллия [3]. Роль линз здесь играют перешейки между отверстиями. В [4] сообщается о реализации рентгеновского микроскопа, содержащего в качестве фокусирующего элемента составную параболическую линзу диаметром 0,9 мм, изготовленную из алюминия методом прессования. В работе [5] описаны сферические линзы диаметром 1–2 мм, представляющие набор газовых пузырей в органической жидкости, расположенных в V-образной кювете.

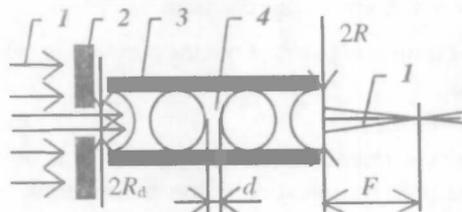


Рис. 1. Схема микрокапиллярной рентгеновской линзы:

1 – рентгеновские лучи; 2 – диафрагма; 3 – стеклянный микрокапилляр; 4 – капля жидкости

Конструкция рентгеновской линзы, описанная в [3], была развита в работе [6] и реализована как микрокапиллярная преломляющая линза для рентгеновских лучей (рис. 1). В отличие от описанной в [3] цилиндрической, микрокапиллярная линза пригодна для передачи изображения в рентгеновских лучах. Линза состоит из стеклянного микрокапилляра, заполненного большим количеством двояковогнутых микролинз. Идея ос-

нована на хорошо известном факте, что капля жидкости, помещенная в стеклянный капилляр, под действием сил поверхностного натяжения принимает форму двояковогнутой линзы. В качестве наполнителя капилляров могут быть использованы различные жидкости или полимеры, основными элементами состава которых являются углерод, водород и азот. Используя метод, описанный нами в [6], можно сформировать 100–500 микролинз из промышленного эпоксидного клея в капилляре радиусом $R=0,1-0,3$ мм. Недостатком метода является высокое значение толщины линзы $d=0,1-1$ мм и, как следствие, небольшое значение пропускания линзы при значениях диаметра канала капилляра больших, чем 0,3 мм, и для фотонов с энергией 10–30 кэВ. Линза была применена на синхротроне Spring-8 для фокусировки рентгеновского излучения с энергией фотонов 18 кэВ и в качестве объектива рентгеновского микроскопа [7].

Цель данной работы состоит в описании методики приготовления микрокапиллярной рентгеновской линзы с уменьшенным значением толщины линзы d и изложении алгоритма вычисления рентгенооптических параметров – фокусного расстояния и размера фокусного пятна.

Методика приготовления микрокапиллярной линзы основана на последовательном выдувании пузырьков воздуха внутри капилляра, заполненного жидкостью. В капилляр 1, заполненный жидкостью–материалом линзы, вводился капилляр 2, соединенный с баллоном сжатого воздуха. Воздух через капилляр 2 поступал в капилляр 1 в форме газового пузыря. Рост пузыря визуально контролировался. При радиусе пузыря, равном радиусу капилляра 1, капилляр 2 перемещался на несколько микрометров от полученного пузыря и процесс повторялся. Жидкость, заключенная между двумя пузырями, имеет форму двояковогнутой сферической линзы. Данная методика фактически не имеет ограничений на число линз. Фотография микрокапиллярной линзы, изготовленной описанным способом, показана на рис. 2. Воздушные пузыри между линзами показаны светлыми кружками. Диаметр канала капилляра – 0,8 мм. Линзы изготовлены из глицерина (химическая формула глицерина – $\text{H}_8\text{C}_3\text{O}_3$, плотность – $1,26 \text{ г/см}^3$). Важным параметром линзы является ее толщина, которая для данного материала линзы зависит от диаметра канала капилляра. Было установлено, что зависимость толщины линзы, изготовленной из глицерина, от радиуса капилляра может быть аппроксимирована следующим линейным соотношением:

$$d=0,12R+d_0, \quad (4)$$

где $d_0=13$ мкм. Приведенное соотношение оставалось верным для глицериновых линз, полученных в стеклянных капиллярах с радиусом канала от 50 мкм до 1000 мкм.

Важными параметрами линзы являются: пропускание, фокусное расстояние, размер фокусного пятна, коэффициент усиления плотности потока фотонов в фокальной плоскости.

Пропускание линзы T , равное отношению числа фотонов, прошедших через линзу, к числу фотонов на входе, можно оценить по пропусканию центральной части линзы, используя формулу:

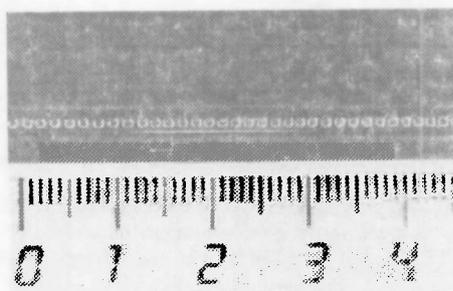


Рис. 2. Фотография линзы (Диаметр канала капилляра 0,8 мм.)

$$T = \exp(-\mu N d), \quad (5)$$

где μ – показатель поглощения рентгеновских фотонов в материале линзы.

В первом приближении форма микрокапиллярной линзы может быть принята как сферическая, а радиус кривизны линзы R связан с радиусом капилляра R_c [8] следующим соотношением:

$$R = R_c / \cos \Theta, \quad (6)$$

где Θ – краевой угол. Для капель воды или глицерина, расположенных на поверхности стекла, краевой угол Θ равен 0° .

Сферическая линза обладает соответствующими aberrациями, которые приводят к размытию пучка в фокусе. Учет сферических aberrаций представляет достаточно сложную проблему, простейшее решение которой состоит в рассмотрении хода лучей в фокусе для конкретной линзы. На рис. 3 показаны траектории рентгеновских фотонов с энергией 8 кэВ, формирующих фокусное пятно линзы. Линза имеет следующие параметры: $R=100$ мкм, $N=74$, $d=25$ мкм; микролинзы также изготовлены из глицерина. Источник излучения расположен на расстоянии 50 м от линзы. Как видно из рисунка, не все лучи пересекают оптическую ось в фокальной плоскости, что приводит к размытию фокусного пятна. Для случая, когда источник излучения находится на бесконечном расстоянии от линзы, радиус пучка R_F в фокусе можно определить аналитически при помощи теории aberrации третьего порядка [9]:

$$R_F = R_d^3 / F^2 [n^2 - (2n+1)K + (n+2)K^2/n] / [2(n-1)^2], \quad (7)$$

где R_d – радиус диафрагмы линзы; n – действительная часть комплексного показателя преломления, $K=0.5$ для симметричной двояковогнутой линзы.

Как следует из соотношений (2) и (3), траектории рентгеновских лучей вблизи оси “многокомпонентной” линзы совпадают с траекториями лучей, формируемых одной линзой с увеличенным показателем преломления и равным $1-N\delta$. Делая такую замену, можно упростить уравнение (7) до следующего вида:

$$R_F = 0,5 R_d^3 / R^2. \quad (8)$$

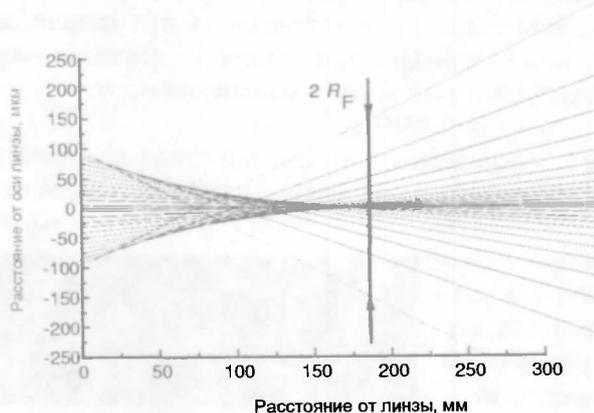


Рис.3. Траектории рентгеновских лучей, формирующих фокусное пятно (Точечный источник расположен на расстоянии 50 м от линзы, сделанной из глицерина; радиус линзы – 100 мкм, число линз – 74, энергия фотонов – 8 кэВ.)

Указанная замена и, как следствие, уравнение (8) справедливы для лучей, распространяющихся на определенном расстоянии от оси, задаваемом радиусом диафрагмы R_d . Сравнение результатов для R_F , полученных путем моделирования траекторий рентгеновских фотонов, с результатами расчетов по формуле (8) показали, что формула (8) может применяться при условии $R_d < 0,6R$. Для случая диафрагмы большего радиуса

размер фокусного пятна превышает значение, полученное из соотношения (8), в 2–4 раза. Несмотря на то, что размер пучка в фокальной плоскости

достаточно большой, распределение плотности интенсивности в фокусе имеет ярко выраженный центральный пик, ширина которого определяется дифракционными ограничениями.

Простейший способ уменьшения сферических aberrаций линзы состоит в использовании диафрагмы, которая, однако, приводит к дифракционному размытию центрального пика в фокальной плоскости. Согласно дифракционной теории Эйри, радиус дифракционного пятна R_{diff} зависит от апертуры линзы и определяется как [9]:

$$R_{diff}=0,61 \lambda F/R_d, \quad (9)$$

где λ – длина волны рентгеновского излучения.

Минимальный радиус пятна в фокусе R_{min} для данной линзы равен:

$$R_{min}=0,35 (\lambda^3 R/\delta^3/N^3)^{1/4} \quad (10)$$

и может быть получен путем уменьшения радиуса диафрагмы до оптимальной величины R_{d-opt} , которая рассчитывается из условия $R_F=R_{diff}$:

$$R_{d-opt}=(1,22 \lambda F R^2)^{1/4}. \quad (11)$$

Полученные формулы для пропускания линзы (T), размеров фокусного пятна (R_{min}) и диафрагмы (R_{d-opt}) могут быть использованы для оценки интенсивности потока рентгеновского излучения в фокусе линзы при использовании в качестве источника излучения микрофокусной рентгеновской трубки. Размещая такую трубку на расстоянии от линзы, превышающем удвоенное фокусное расстояние, можно получить уменьшенное (вплоть до 1 микрона) изображение источника, что может быть использовано на практике. При этом источник располагают на таком расстоянии L_I от линзы, чтобы радиус изображения источника был равен R_{min} , определяемому aberrационными и дифракционными ограничениями для данной линзы. Расстояние L_I между источником радиуса R_a и линзой рассчитывается из параксиального уравнения для линейного увеличения линзы:

$$L_I=F(R_a/R_{min}+1). \quad (12)$$

В качестве примера проведем оценки потока фотонов характеристического излучения K_α линии атомов меди (энергия фотонов – 8 кэВ) в фокусе рентгеновской микрокапиллярной линзы, изготовленной из глицерина. Предполагается, что в качестве источника излучения используется микрофокусная рентгеновская трубка с медным анодом, имеющая следующие рабочие параметры [10]: радиус фокусного пятна трубки $R_a=25$ мкм, напряжение на аноде $U_a=20$ кВ, ток анода $i_a=180$ мА. Число характеристических фотонов K_α линии атомов меди, испускаемых трубкой в единичный телесный угол и в единицу времени при указанных значениях тока и напряжения, равно $2,7 \cdot 10^{13}$ фот/(с·стрд).

Исходными данными для расчета являются: размер пятна в фокусе линзы – R_{min} , радиус капилляра (линзы) – R и размер (радиус) источника – R_a . Исходя из этих параметров, можно определить: 1) число линз – N из уравнения (10); 2) фокусное расстояние – F из уравнения (3); 3) радиус диафрагмы R_{d-opt} из уравнения (11); 4) расстояние от источника до линзы – L_I из уравнения (12). При известном числе линз N пропускание T определяется из уравнений (4), (5).

Пусть линза имеет радиус 100 мкм. Коэффициент поглощения рентгеновских фотонов с энергией 8 кэВ в глицерине $\mu=9,75$ см⁻¹. Для получения фокусного пятна диаметром 1 мкм число линз N должно быть равным 99. Пропускание такой линзы $T=0,09$, а фокусное расстояние $F=110$ мм. Радиус оптимальной диафрагмы: $R_{d-opt}=21$ мкм, расстояние от источника до линзы:

$L_1=5,6$ м. При заданных параметрах системы (R_{d-opt} , L_1 , T) и числе испускаемых трубкой фотонов можно определить поток фотонов dN/dt в фокусе линзы: $dN/dt=105$ фот/с. Размер фокусного пятна, как уже указывалось, равен 1 мкм. Современные детекторы рентгеновского излучения позволяют регистрировать его потоки величиной 1 фот/с [11] и, следовательно, ожидаемые значения интенсивности пучка в фокусе линзы являются вполне достаточными. например для целей микротопографии. Приведенные выше параметры линзы позволяют оценить отношение G плотности потока фотонов в фокальной плоскости к плотности потока фотонов на входе в линзу: $G=(R_{d-opt}/R_F)^2 T=159$.

Проведенные расчеты показали возможность получать интенсивные пучки рентгеновского излучения микронных размеров от мощных микрофокусных рентгеновских трубок с помощью преломляющих линз, что делает перспективным их использование в первую очередь для формирования изображений объектов в жестком рентгеновском диапазоне спектра и создания рентгеновского микроскопа.

Работа частично финансировалась Фондом фундаментальных исследований Республики Беларусь (проект Ф 97-036).

1. Мишкетт А., Оптика мягкого рентгеновского излучения. М., 1989.
2. Suehiro S., Miyaji H., Hayashi H. // Nature. 1991. Vol. 352. №8 P.385.
3. Snigirev A., Kohn V., Snigireva I., Lengeler B. // Nature. 1996. Vol. 384. №7 P. 49.
4. Lengeler B., Schroer C.G., Richwin M et all. // Applied Physics Letters. 1999. Vol.74. №26. P.3924.
5. Kohmura Y., Awaji M., Suzuki Y., Ishikawa T. // Proc. SPIE, 1998. Vol. 3449. P. 185.
6. Dudchik Yu.I., Kolchevsky N.N. // Nucl. Instrum. Methods A. 1999. Vol. 421. P. 361.
7. Kohmura Y., Awaji M., Suzuki Y., Ishikawa T., et al. // XRM 99 Conf. Abstracts, Berkeley, California, 1999. P.41.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. // Гидродинамика. М., 1986.
9. Борн М., Вольф Э. // Основы оптики. М., 1973.
10. Aristov V.V., Starkov V.V., Shabel'nikov L.G, et all. // Optics Commun. 1999. Vol. 161. №3. P. 203.
11. Attaelmanan A., Rindby A., Voglis P., Shermeat A. // Nucl. Instrum. Methods B. 1993. Vol. 82. P. 481.

Математика и информатика



УДК 517.977

О.Р. ГАБАСОВА

ОПТИМАЛЬНАЯ ПОЛИТИКА ФИРМЫ С ДВУМЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМИ СПОСОБАМИ ПРОИЗВОДСТВА

An optimal control problem with state and mixed constraints is under consideration. Using sufficient optimality conditions we get open loop and positional solutions of the problem which provide the synthesis of optimal policy of a firm with two homogeneous production activities.

Рассмотрим задачу, поставленную в работе [1].

Оптимальная траектория задачи (5) [1] определяется набором функциональных множителей Лагранжа $\mu(t)$, $\mu_1(t)$, $\mu_2(t)$, $\nu_1(t)$, $\nu_2(t)$, $t \in T$, которые вдоль траектории принимают либо положительные, либо нулевые значения. Часть оптимальной траектории, на которой ни один из множителей не изменяет своего значения с положительного на нулевое или, наоборот, с нулевого на положительное, будем называть дугой. Пронумеруем дуги, составляющие оптимальную траекторию, от 1 до 6: 1) $\mu > 0$, $\mu_1 > 0$, $\mu_2 = 0$, $\nu_1 = 0$, $\nu_2 > 0$; 2) $\mu > 0$, $\mu_1 = 0$, $\mu_2 = 0$, $\nu_1 = 0$, $\nu_2 > 0$; 3) $\mu > 0$, $\mu_1 = 0$, $\mu_2 > 0$, $\nu_1 = 0$, $\nu_2 > 0$; 4) $\mu > 0$, $\mu_1 = 0$, $\mu_2 > 0$, $\nu_1 = 0$, $\nu_2 = 0$; 5) $\mu > 0$, $\mu_1 = 0$, $\mu_2 > 0$, $\nu_1 > 0$, $\nu_2 = 0$; 6) $\mu = 0$, $\mu_1 = 0$, $\mu_2 > 0$, $\nu_1 > 0$, $\nu_2 = 0$. Промежуток времени, когда движение происходит по j -й дуге, обозначим через T_j . Проанализируем поведение элементов задачи (5) [1] на дугах 1 – 6.

Дуга 1. Из условий дополняющей нежесткости имеем: $D(t) = 0$, $K_1(t) = 0$, $K(t) = (1+k)X(t)$, $t \in T_1$. Из первого прямого уравнения следует, что $\dot{X} > 0$. Из (2), (3) [1] получаем, что $\dot{K} > 0$. Инвестиции $I(t)$, $t \in T_1$, вдоль дуги 1 меняются по закону $I(t) = S - k[S - (a + r + wl_2)K] - wl_2K$. Из второго условия стационарности получаем $dS/dQ < C_{12}$. При подстановке второго сопряженного уравнения в первое имеем $\dot{\lambda}_1 < 0$. Из второго сопряженного уравнения и второго условия стационарности следует, что ν_2 убывает, μ_1 возрастает.

Дуга 2. Из условий дополняющей нежесткости имеем: $D(t) = 0$, $K(t) = (1+k)X(t)$, $t \in T_2$. Условия стационарности дают $Q = Q_{12}$, т.е. выпуск продукции на дуге 2 постоянен. Из прямой системы находим законы изменения $I(t)$, $K_1(t)$, $t \in T_2$: $K_1(t) = q_2K/(q_2 - q_1) - Q/(q_2 - q_1)$, $I(t) = rK + (1+k)S - (a + r + wl_2)K + w(l_2 - l_1)K_1$. При исследовании сопряженных переменных получаем: $\dot{\lambda}_1$, ν_2 и μ_1 убывают.

Дуга 3. Из условий дополняющей нежесткости имеем: $D(t) = 0$, $K(t) = K_1(t)$, $K(t) = (1+k)X(t)$, $t \in T_3$, – используется первый технологический способ. Из прямой системы следует, что вдоль дуги 3 $\dot{X} > 0$, $\dot{K} > 0$. Уравнение для ин-

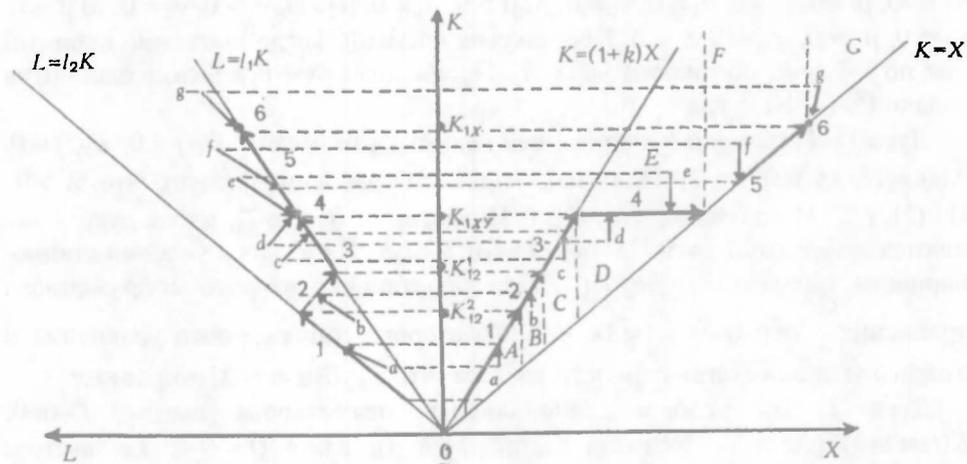
вестиций находим из прямой системы и уравнения $K(t)=(1+k)X(t):I(t)==(1+k)S-k(a+r)K+(1+k)wl_2K, t \in T_3$. Исследуя сопряженную систему и условия стационарности, имеем: λ_1, ν_2 и μ_2 убывают.

Дуга 4. Из условий дополняющей нежесткости имеем: $D(t) \equiv 0, K(t) = K_1(t), t \in T_4$, – используется первый технологический способ. Второе сопряженное уравнение и второе условие стационарности дают $\lambda_1[a_1 \frac{a_2}{l_2} - (a+r + wl_1)] = 0$, т.е. на дуге 4 выполняется тождество $dS/dQ = C_{1XY}$. Инвестиции равны $I(t) = \frac{1}{a} K_{1XY}$. При исследовании сопряженной системы и условий стационарности получаем: λ_1 убывает, μ_2 возрастает.

Дуга 5. Из условий дополняющей нежесткости имеем: $D(t) \equiv 0, K(t) = K_1(t)$, – используется первый технологический способ, $K(t) = X(t), t \in T_5$, – кредит не используется. Из прямой системы следует, что $X(t) > 0, K(t) > 0, \dot{I}(t) > 0, t \in T_5$. Из сопряженной системы и второго условия стационарности получаем: λ_1, μ_2 убывают, а ν_1 возрастает.

Дуга 6. Из условий дополняющей нежесткости имеем: $K(t) = K_1(t)$, – используется первый технологический способ, $K(t) = X(t), t \in T_6$, – кредит не используется. Первое условие стационарности дает $\lambda_1(t) \equiv 1, t \in T_6$. Из второго сопряженного уравнения и второго условия стационарности следует $dS/dQ = C_{1X}$. Отсюда получаем, что $Q(t) = Q_{1X}$, а, значит, $K(t) = K_{1X}, X(t) = X_{1X}, D(t) = D_{1X} = rX_{1X} + S - (a+r+wl_1)K_{1X}, I(t) \equiv 1/a K_{1X}$. Множители Лагранжа μ_2 и ν_1 на дуге 6 постоянны. Фазовая точка (X_{1X}, K_{1X}) называется состоянием блаженства.

Множество начальных состояний (X_0, K_0) , для которых существуют допустимые управления задачи (5) [1], состоит из точек (X_0, K_0) , принадлежащих множеству $\Omega = \{(X_0, K_0) : X_0 \leq X^*, X_0 \leq K_0 \leq (1+k)X_0\}$ (рисунок).



Рассмотрим случай дорогого кредита ($r > i$). Множество допустимых состояний Ω разобьем на части А, В, С, D, Е, F, G. Для каждой части из произвольных точек построим допустимые траектории.

$$A = \left(\begin{array}{l} X(0) = X_0, K(0) = (1+k)X(0) \\ D_0 = 0, I_0 = (1+k)X_0 - K_0 \end{array} \right) \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow 6;$$

$$\begin{aligned}
B &= \left(\begin{array}{l} X(0) = X_0, K(0) = (1+k)X(0) \\ D_0 = 0, I_0 = (1+k)X_0 - K_0 \end{array} \right) \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow 6; \\
C &= \left(\begin{array}{l} X(0) = X_0, K(0) = (1+k)X(0) \\ D_0 = 0, I_0 = (1+k)X(0) - K_0 \end{array} \right) \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow 6; \\
D, E &= \left(\begin{array}{l} X(0) = X_0, K(0) = K_{1XY} \\ D_0 = 0, I_0 = K_{1XY} - K_0 \end{array} \right) \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow 6; \\
F &= \left(\begin{array}{l} X(0) = X_0, K(0) = X(0) \\ D_0 = 0, I_0 = X(0) - K_0 \end{array} \right) \rightarrow 5 \rightarrow 6; \\
G &= \left(\begin{array}{l} X(0) = X_{1X}, K(0) = K_{1X} \\ D_0 = X_{1X} - X_0, I_0 = K_{1X} - K_0 \end{array} \right) \rightarrow 6.
\end{aligned} \tag{1}$$

Скачки $(\Delta X(0), \Delta K(0))$ фазовых переменных задачи (1) – (4) [1] в начальный момент $t=0$ равны:

$$\begin{aligned}
A: \Delta X(0) &= 0, \Delta K(0) = (1+k)X(0) - K_0; \\
B: \Delta X(0) &= 0, \Delta K(0) = (1+k)X(0) - K_0; \\
C: \Delta X(0) &= 0, \Delta K(0) = (1+k)X(0) - K_0; \\
D, E: \Delta X(0) &= 0, \Delta K(0) = K_{1XY} - K_0; \\
F: \Delta X(0) &= 0, \Delta K(0) = X(0) - K_0; \\
G: \Delta X(0) &= X_{1X} - X_0, \Delta K(0) = K_{1X} - K_0.
\end{aligned}$$

Чтобы доказать, что построенные на рисунке траектории являются оптимальными, достаточно проверить условия оптимальности (трансверсальности) на их левых концах.

Область А. $X(0)=X_0, K(0)=(1+k)X(0)$. Точка $(X(0), K(0))$ лежит на дуге 1, вдоль которой $\lambda_1(t) > 1$; $e_1 = X_0 - X(0) = 0 \Rightarrow \xi_1 > 0$; $e_2 = K(0) - X(0) > 0 \Rightarrow \xi_2 = 0$, $e_3 = (1+k)X(0) - K(0) = 0 \Rightarrow \xi_3 > 0$, $e_4 = X_0 - X^* > 0 \Rightarrow \xi_4 = 0$; $\xi_3 + \lambda_2 = 0$, так как $\lambda_2(+0) = 0 \Rightarrow \xi_3 = 0$; $-1 - \xi_1 + \xi_3(1+k) + \lambda_1(+0) = 0 \Rightarrow \xi_1 \geq 0 \Rightarrow -1 - \xi_1 = -\lambda_1(+0) \Rightarrow \xi_1 \geq 0$. Таким образом, все условия оптимальности на допустимой траектории, выходящей из области А, выполняются. Значит, она является оптимальной.

Область В. $X(0)=X_0, K(0)=K_{12}$. Точка $(X(0), K(0))$ лежит на дуге 2, где $\lambda_1(t) \geq 1$; $e_1 = X_0 - X(0) = 0 \Rightarrow \xi_1 > 0$; $e_2 = K(0) - X(0) > 0 \Rightarrow \xi_2 = 0$, $e_3 = (1+k)X(0) - K(0) = 0 \Rightarrow \xi_3 > 0$, $e_4 = X_0 - X^* > 0 \Rightarrow \xi_4 = 0$; $\xi_3 + \lambda_2 = 0$, $-1 - \xi_1 + \xi_3(1+k) + \lambda_1(+0) = 0 \Rightarrow \xi_1 \geq 0 \Rightarrow -1 - \xi_1 = -\lambda_1(+0) \Rightarrow \xi_1 \geq 0$. Таким образом, все условия оптимальности выполняются и поэтому допустимая траектория, выходящая из области В, является оптимальной.

Область С. $X(0)=X_0, K(0)=(1+k)X(0)$. Точка $(X(0), K(0))$ лежит на дуге 3, где $\lambda_1(t) > 1$; $e_1 = X_0 - X(0) = 0 \Rightarrow \xi_1 > 0$; $e_2 = K(0) - X(0) > 0 \Rightarrow \xi_2 = 0$, $e_3 = (1+k)X(0) - K(0) = 0 \Rightarrow \xi_3 > 0$, $e_4 = X_0 - X^* > 0 \Rightarrow \xi_4 = 0$; $\xi_3 + \lambda_2 = 0$, $-1 - \xi_1 + \xi_3(1+k) + \lambda_1(+0) = 0 \Rightarrow \xi_1 > 0 \Rightarrow$ все условия оптимальности на допустимой траектории, выходящей из области С, выполняются \Rightarrow она является оптимальной.

Области D,E. $X(0)=X_0, K(0)=K_{1XY}$. Точка $(X(0), K(0))$ лежит на дуге 4, где $\lambda_1(t) > 1$; $e_1 = X_0 - X(0) = 0 \Rightarrow \xi_1 > 0$; $e_2 = K(0) - X(0) > 0 \Rightarrow \xi_2 = 0$; $e_3 = (1+k)X(0) - K(0) > 0 \Rightarrow \xi_3 = 0$; $e_4 = X_0 - X^* > 0 \Rightarrow \xi_4 = 0$; $-1 - \xi_1 + \lambda_1(+0) = 0 \Rightarrow \xi_1 > 0 \Rightarrow$ все условия оптимальности на допустимой траектории, выходящей из областей D,E, выполняются \Rightarrow она является оптимальной.

Область F. $X(0)=X_0$, $K(0)=X(0)$. Точка $(X(0), K(0))$ лежит на дуге 5, где $\lambda_1(t) \geq 1$; $e_1=X_0-X(0)=0 \Rightarrow \xi_1 > 0$; $e_2=K(0)-X(0)=0 \Rightarrow \xi_2 > 0$, $e_3=(1+k)X(0)-K(0) > 0$, $\Rightarrow \xi_3 = 0$; $e_4=X_0-X_* > 0 \Rightarrow \xi_4 = 0$; $\xi_2 + \lambda_2 = 0$, $-1 - \xi_1 - \xi_2 + \lambda_1(+0) = 0 \Rightarrow \xi_1 > 0 \Rightarrow$ все условия оптимальности выполняются \Rightarrow допустимая траектория, выходящая из области F, является оптимальной.

Область G. $X(0)=X_{1X}$, $K(0)=K_{1X}$. Точка $(X(0), K(0))$ лежит на дуге 6, где $\lambda_1(t) > 1$. $e_1=X_0-X(0) > 0 \Rightarrow \xi_1 = 0$; $e_2=K(0)-X(0)=0 \Rightarrow \xi_2 > 0$, $e_3=(1+k)X(0)-K(0) > 0 \Rightarrow \xi_3 = 0$, $e_4=X_0-X_* > 0 \Rightarrow \xi_4 = 0$; $\xi_2 + \lambda_2 = 0$, $-1 - \xi_2 + \lambda_1(+0) = 0 \Rightarrow \lambda_1(+0) = 1 \Rightarrow$ все условия оптимальности выполняются \Rightarrow допустимая траектория, выходящая из области G, является оптимальной.

Перейдем к синтезу оптимальных управлений типа обратной связи (оптимальной политики фирмы). Обозначим через $t_0 < \infty$ наибольший момент времени, когда, двигаясь по магистрали, можно впервые из множества Ω достичь состояния блаженства. Нетрудно проверить, что если $z \geq t_0$, то

$$D^0(\tau | \tau, P) = D^0(0, P) = D^0(P), \quad I^0(\tau | \tau, P) = I^0(0, P) = I^0(P), \quad (2)$$

$$K_1^0(\tau | \tau, P) = K_1^0(0, P) = K_1^0(P), \quad \text{если } 0 \leq \tau \leq t_0.$$

Свойство (2) означает, что определенные в (1) оптимальные программные управления не зависят от τ , и, следовательно, правила (2) и рисунок задают синтез оптимальной политики фирмы.

Работа частично финансируется Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (Ф98 – 014).

1. Габасова О. Р. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1999. № 3. С. 72.

Поступила в редакцию 04.02.99

УДК 681.3

В.М. МИРОНЧИК, В.А. САЕЧНИКОВ

ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА ПОЛУАВТОМАТИЧЕСКОЙ ОЦИФРОВКИ КАРТОГРАФИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ В ГЕОИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМАХ

The main principles of functioning and developing of the software tools of semi-automatic's digitizing the map's information are described. The base algorithms of semi-automatic digitizing the map's objects are described.

Современные методы обработки пространственно-распределенных данных, используемые геоинформационными системами (ГИС), требуют достаточно высокой точности преобразования картографической информации в цифровую форму* [1]. Проблема совершенствования процесса оцифровки картографической информации остается весьма актуальной также и потому, что практически для большинства из существующих средств автоматической оцифровки необходима последующая трудоемкая и кропотливая работа по коррекции получаемых цифровых слоев [2,3].

Следует отметить также, что эффективное использование возможностей ГИС типа ArcView достигается при интегрировании с ними программных

* Zerler M. Inside ARC/INFO (Руководство к ГИС ARC/INFO. Корпорация ESRI); ArcView User Manual (Руководство к ГИС ArcView. Корпорация ESRI).

средств оцифровки на этапе предварительной обработки картографической информации [4].

Целью настоящей работы являлась разработка программных средств полуавтоматической оцифровки картографической информации, адаптированных для работы совместно с геоинформационной системой.

Рассмотрим основные функциональные возможности и достоинства разработанных программных средств полуавтоматической оцифровки картографической информации, а также возможности обмена данными с геоинформационной системой ArcView корпорации ESRI, являющейся стандартом де-факто на рынке ГИС-систем.

1. Функциональные возможности программного средства цифровой обработки картографической информации

Программное средство цифровой обработки картографической информации DigStyle предназначено для полуавтоматической обработки предварительно отсканированных географических карт и планов. Данный продукт обладает широким набором средств для получения и обработки цифровой картографической информации. В качестве базового используется shp-формат хранения цифровой информации геоинформационной системы ArcView. Возможен также оперативный обмен информацией с ГИС ArcView на основе стандартного протокола обмена данными DDE (Dynamic Data Exchange) среды Windows. Разработанное программное средство придерживается принципов наибольшей схожести интерфейса и наименований с ГИС ArcView для сохранения единообразия навыков работы с обеими программами.

2. Алгоритмы работы цифровой обработки картографической информации

2.1 *Полуавтоматическая оцифровка линий.* Для полуавтоматической оцифровки линий на растре используется алгоритм, основанный на отслеживании восьми направлений d_i , $i=0, 1, \dots, 7$ и центрировании в соответствии с полученными расстояниями. Направления d_i выбираются стандартным образом в соответствии со структурой растровых изображений (рис. 1).

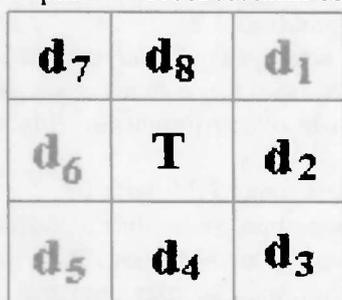


Рис. 1. Направления движения при оцифровке

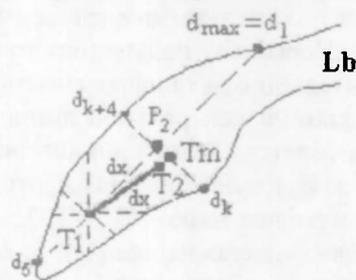


Рис. 2. Схема нахождения второй направляющей точки цифровой линии Ld , с помощью восьми направлений оценки

Схематично алгоритм работы оцифровщика выглядит следующим образом (рис. 2). Пусть Lb – линия на растре, имеющая цвет C , которую необходимо перевести в цифровую форму, т.е. получить линию Ld , соответствующую линии Lb и представленную как множество точек $\{T_i\}$, причем данные точки выбираются таким образом, чтобы максимально точно и кор-

ректно передавать форму и положение исходной линии на растре. В первую очередь необходимо определить начальную точку и направление движения при оцифровке линии на растре, т.е. исходные данные для создания линии Ld . Данная задача решается в следующей последовательности.

1. Задаются начальные точки $T1$ и $T2$ линии Ld . В зависимости от установок необходимо указать:

- 1) только одну точку $T1$ с автоматическим поиском второй точки $T2$;
- 2) две точки для ручного (не автоматического) указания направления оцифровки.

В первом случае для поиска второй точки используется оценка расстояния по восьми направлениям и движение в сторону наибольшего, т.е. фактически отрезок Ld_i строится в каждом направлении $d_i, i=1, 2, \dots, 8$. Начальной точкой для отрезка служит точка $T1$ (первая точка линии) цвета C , а конечной – точка Bd_i , получаемая при движении в соответствующем направлении $d_i, i=1, 2, \dots, 8$ от данной точки $T1$ до исчерпания всех точек цвета C в данном направлении либо до края рисунка.

2. Далее оцениваем длины всех отрезков $Ld_i, i=1, 2, \dots, 8$ и находим отрезок наибольшей длины. Предполагая, что линия продолжается в данном направлении d_{max} , выставляем точку $P2$, беря ее как точку, лежащую на прямой $(T1, Bd_{max})$ на некотором расстоянии dx от точки $T1$. Величина dx зависит от требуемой скорости оцифровки, сглаженности линии и емкости памяти (так как влияет на количество точек). В случае выбора малой величины dx (например, $dx=1$, т.е. шаг равен одному пикселу раstra) из-за большого объема проверяемых точек алгоритм будет работать медленнее. При этом будут отслеживаться практически все неровности растровой линии Lb , что в результате даст зубчатую линию Ld , что повлечет увеличение затрат памяти на ее хранение. В случае выбора большой величины dx (например, $dx=10$) вследствие меньшего объема проверяемых точек алгоритм будет работать быстрее, но в этом случае из-за излишне большого шага точность будет достаточно низкой, возможно даже срезание изгибов линии Lb , если они имеют радиус меньший, чем dx . Практически было проверено, что наиболее оптимальными следует считать величины $dx=3,4,5$.

3. Поскольку полученная точка $P2$ может некорректно располагаться относительно оси оцифровываемой линии на растре, т.е. далеко отклоняться от искомой центральной линии, ее необходимо отцентрировать. Для этого применяется следующий алгоритм:

- за базовую точку для центрирования берем точку $P2$ (цвета C);
- находим точки $Bd_i, i=1, 2, \dots, 8$, получаемые при движении в соответствующих направлениях $d_i, i=1, 2, \dots, 8$ от данной базовой точки $P2$ до исчерпания всех точек цвета C в данном направлении либо до края рисунка;
- оцениваем суммы длин отрезков $Ld_i+Ld_{(i+4)}, i=1, 2, \dots, 4$ и находим сумму отрезков наименьшей длины $Ld_k+Ld_{(k+4)}$. Берем отрезок $[Bd_k, Bd_{(k+4)}]$ и находим центральную точку данного отрезка Tm ;
- на прямой $(T1, Tm)$ определяем точку $T2$, которая находится на расстоянии dx от точки $T1$ в направлении Tm .

Таким образом, автоматически получаем $T2$ – вторую направляющую точку линии Ld (см. рис.2). Возможен вариант с использованием нескольких проходов, т.е. полученная точка снова центрируется и на основании этого получается новое приближение направляющей точки. Очевидно, что при установке точки $T1$ далеко от начала линии на растре можно выбрать

ложное направление движения, т.е. положение точки $T2$. В этом случае необходимо предусмотреть дополнительные проверки.

Таким образом, после определения местонахождения точек $T1$ и $T2$, задающих начальную точку и направление движения при оцифровке линии Ld , необходимо найти следующую точку $T3$ данной линии. Алгоритм ее определения аналогичен расчету точки $T2$. Он заключается в следующем (рис.3).

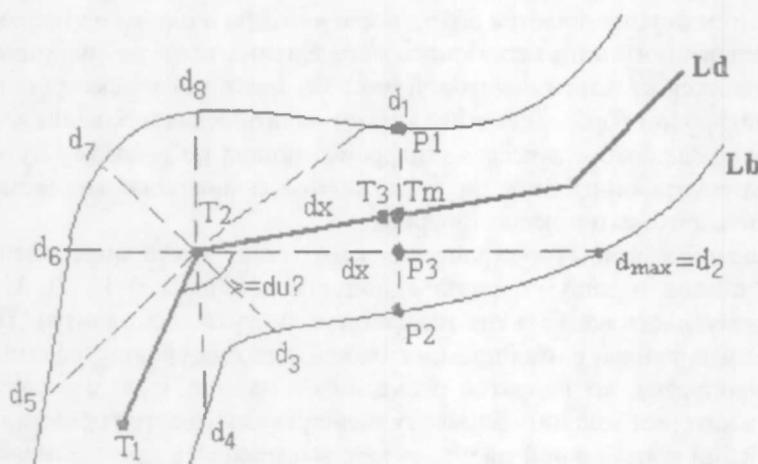


Рис.3. Схема нахождения точек цифровой линии Ld , с помощью восьми направлений оценки

1. За базовую точку берется последняя рассчитанная точка линии Ld , т.е. в данном случае $T2$. Оцениваются расстояния до краев растрового образа линии Ld_i , $i=1, 2, \dots, 8$ для каждого из направлений d_i , $i=1, 2, \dots, 8$. В направлении d_{max} , при котором расстояние Ld_{max} принимает наибольшее значение, на расстоянии dx от точки $T2$ выставляем точку $P3$.

2. Проверяем данную точку на корректность по направлению, которое должно быть таким, чтобы исключить возможность оцифровки по уже оцифрованной части линии Lb , т.е. для предотвращения сдвигания линии Ld . Для этого можно применить несколько способов, но наиболее простым вновь является проверка по направлению. Если две последние точки линии Ld ($T1$ и $T2$) и точка $P3$ задают угол (с вершиной в точке $T2$), величина которого меньше некоторого заранее заданного значения du , зависящего от толщины линии, тогда данная точка $P3$ отвергается и ведется поиск направления с максимальным расстоянием от точки $T2$ до края Lb , исключая уже просмотренное направление, и в этом направлении снова выставляется точка $P3$. При исчерпании всех восьми направлений d_i , $i=1, 2, \dots, 8$ происходит остановка автоматической оцифровки и управление передается пользователю.

3. В случае корректности точки $P3$ по направлению производится центрирование точки аналогично центрированию точки $T2$, уже описанному нами. При необходимости полученную точку $T3$ можно снова проверить на корректность по направлению.

Аналогичным образом продолжаем рассчитывать следующие точки линии Ld до получения результата – оцифрованной линии Lb , либо до некоторого проблемного места на Lb , где данный алгоритм не может самостоятельно продолжить оцифровку и требуется вмешательство человека.

Данный алгоритм достаточно прост для реализации и не требует сложных математических вычислений, что положительно сказывается на скорости работы.

2.2 Полуавтоматическая оцифровка контуров. Для оцифровки контуров используется алгоритм отслеживания границ заданной одноцветной области D_c , где C – цвет данной области [4,6]. При этом после выставления некоторой точки внутри данной области проводится поиск одной из граничных точек и затем осуществляется обход всего контура в одном из направлений. В случае неверного автоматического определения контура (например, контур разбивается на части некоторой линией) можно скорректировать полученный цифровой образ. Для этого можно начать редактирование фигуры и в той точке, где автоматическая оцифровка пошла по ложному пути, вручную продолжить оцифровку до прохождения сомнительного места. Затем продолжить автоматическую оцифровку.

При сканировании географических карт имеет место определенное искажение цветов и зашумливание одноцветных областей [5–7]. С учетом этих обстоятельств введена так называемая виртуальная палитра. Поскольку растровые файлы, служащие подложкой для оцифровки, редактировать не рекомендуется, то вводятся псевдонимы цветов, т. е. создается файл данных, в котором каждому элементу палитры указывается некоторый цвет. Данный файл виртуальной палитры дает возможность при применении соответствующего ему растрового файла заменить палитру данного файла заданными величинами.

2.3. Обмен данными с ГИС ArcView. Кроме обмена информацией с геоинформационной системой ArcView при помощи shape-файлов (стандартного формата данной ГИС), разработанное средство оцифровки может использовать протокол динамического обмена данными DDE, стандартным образом поддерживаемый системой Windows (рис.4).

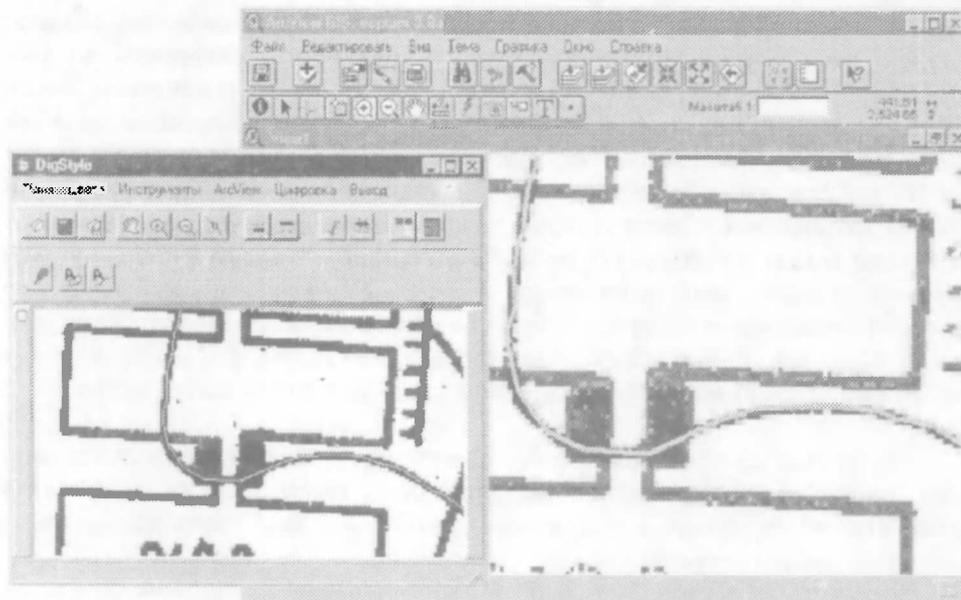


Рис.4. Результат работы инструмента полуавтоматической оцифровки линии, переданный из DigStyle в ArcView (в ArcView для улучшения видимости линии на фоне неочищенного растра ее толщина увеличена)

Данный протокол позволяет оцифровщику работать в тесной связи с ГИС ArcView в среде Windows 95/98/NT. В процессе оцифровки цифровая информация может оперативно обрабатываться в ГИС (например, к цифровым объектам привязываются определенные данные или идентификаторы). Обмен информацией реализован через промежуточное приложение ArcSocket, служащее клиент-сервером DDE для связи между ArcView и DigStyle. Выбор отдельного приложения ArcSocket для использования в качестве промежуточного интерфейса между ArcView и DigStyle вызван в первую очередь тем, что ArcSocket в перспективе допускает расширение до сетевых масштабов, т.е. возможность обеспечить совместную работу ArcView и DigStyle на разных машинах, объединенных в локальную сеть.

Основными преимуществами средств полуавтоматической оцифровки подобного типа являются:

- тесная интеграция с приложением, использующим конечный результат оцифровки картографической информации;
- возможность оперативной обработки оцифрованной информации с использованием средств целевой геоинформационной системы;
- возможность использования средств геоинформационной системы непосредственно для целей приложения, осуществляющего предварительную обработку цифровой информации.

К недостаткам же можно отнести:

- невозможность обеспечить такую же эффективную работу с другими ГИС. Но поскольку в мире существует большое количество универсальных оцифровщиков, предназначенных для работы независимо от других программных продуктов, то при необходимости можно использовать их для предварительной обработки информации.

Таким образом, разработано программное средство, позволяющее достаточно быстро и удобно производить оцифровку картографической информации по растровой подложке для использования в ГИС ArcView. Программный модуль используется в составе комплекса предварительной обработки информации для автоматизированной системы поддержки принятия решений по предотвращению чрезвычайных ситуаций природного и техногенного характера (АСППР-ЧС). Комплекс предназначен для прогнозирования развития паводковой обстановки при наводнениях в пойме реки Припять, радиационной опасности на объектах захоронения радиационных отходов, а также химической опасности на объектах сосредоточения значительных объемов сильнодействующих ядовитых веществ.

1. Antenucci J.C., Brown K., Croswell P.L., Kevany M.J. Geographic Information Systems. A guide to the technology. Van Nostrand Reinhold. New York, 1991.
2. Principles of Geographical Information Systems // Oxford, 1998.
3. Albaredes G. // Dynamic GIS. 1993. Vol.2. N 5. P.32.
4. Самошкин М. А. Автоматизация ввода – вывода и обработки данных на основе рекурсивного представления информации. Мн., 1996.
5. Семенов О.И., Абламейко С.В., Старовойтов В.В., Берейшик В.И. Методы обработки и формирования растровых изображений. Мн., 1996.
6. Шикин Е.В., Боресков А.В. Компьютерная графика. М., 1995.
7. Шлихт Г.Ю. Цифровая обработка цветных изображений. М., 1997.

Поступила в редакцию 16.02.99.

СТАБИЛИЗАЦИЯ ДВОЙНОГО ПЕРЕВЕРНУТОГО МАЯТНИКА НА ПОДВИЖНОЙ ПЛАТФОРМЕ ОГРАНИЧЕННЫМИ УПРАВЛЕНИЯМИ

A digital controller with minimizing control intensity criteria for the system of a double inverted pendulum on a cart is considered. The algorithm is implemented on a PC and some results are presented.

1. В [1] рассматривается задача стабилизации в верхнем положении двух шарнирно соединенных стержней, свободно закрепленных на подвижной платформе, которая может двигаться по наклонной прямой (рис. 1).

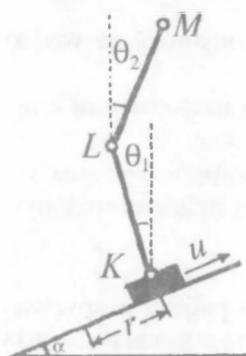


Рис. 1

Математическая модель системы имеет вид

$$\dot{x} = Ax + bu + gd, \quad (1)$$

где $x = (r, \theta_1, \dot{\theta}_1, \theta_2, \dot{\theta}_2) \in R^6$ – вектор состояния, $u \in R$ – скалярное управление, $b, g \in R^6$, $A \in R^{6 \times 6}$, $d \in R$ – параметры системы, r – удаление платформы от начального положения, θ_1 – угол между вертикалью и стержнем KL , θ_2 – угол между вертикалью и стержнем LM , $\dot{r}, \dot{\theta}_1, \dot{\theta}_2$ – соответствующие скорости, $d = \sin \alpha$, α – угол наклона прямой, по которой происходит движение платформы.

Параметры системы имеют следующие численные значения:

$$b = (0; 0; 0; 46,11; -63,75; 71,13),$$

$$g = (0; 0; 0; -24,09; 33,31; -37,17),$$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -4,722 & 0,1402 & -4,624 & 0,01916 & -9,9441 \\ 0 & 34,99 & -13,26 & 6,394 & -0,1902 & 0,186 \\ 0 & -39,04 & 62,42 & -7,133 & 0,3999 & -0,6451 \end{pmatrix}$$

В [1] построена линейная обратная связь $u = k'x$, которая стабилизирует систему (1) относительно состояния равновесия $(0, 0; 0; 0; 0; 0) \in K$ и может принимать любые значения (т. е. ограничения на управление не накладывались).

Цель настоящей работы – описать алгоритм стабилизации системы (1) ограниченными управлениями. В основе алгоритма лежат методы оптимального управления, описанные в [2].

2. Параметрами алгоритма является действительное число $h > 0$ и натуральные числа m и N . Обозначим $v = mh$, $\theta = Nh$.

Будем рассматривать задачу (1), полагая, что платформа движется по горизонтали, т. е. $\alpha = 0$.

Доступным управлением назовем кусочно-постоянную функцию $u(t)$, заданную на промежутке $T = [0, \theta]$, если $u(t) = u_j$, $t \in [(j-1)h, jh]$, $j = \overline{1, N}$ и $|u(t)| \leq L$, $t \in T$.

Доступное управление $u(t)$, $t \in T$, называется допустимым для состояния z , если траектория $x(t)$, $t \in T$, системы

$$\dot{x} = Ax + bu, \quad x(0) = z$$

удовлетворяет условию $x(\theta) = 0$.

Качество допустимого управления оценим значением функционала

$$\rho(u) = \max_{t \in T} |u(t)|.$$

Оптимальным программным управлением для состояния z будем называть допустимое управление $u^0(t) = u^0(t|z)$, $t \in T$, если на нем критерий качества достигает минимума $\rho(u^0) = \min \rho(u)$ по всем допустимым управлениям.

По определению, оптимальное программное управление является решением задачи

$$\rho(z) = \min_u \rho,$$

$$\dot{x} = Ax + bu, \quad x(0) = z, \quad x(\theta) = 0, \quad |u(t)| < \rho, \quad t \in T. \quad (2)$$

Для решения задачи (2) приведем ее к другому виду, записав конечное состояние $x(\theta)$ по формуле Коши:

$$x(\theta) = F(\theta)x(0) + \int_0^\theta F(\theta-t)bu(t)dt = F(\theta)x(0) + \sum_{j=1}^N u_j \int_{(j-1)h}^{jh} F(\theta-t)bdt. \quad (3)$$

Положим $\xi_j = \frac{u_j}{\rho}$, $j = \overline{1, N}$, $\xi_0 = \frac{1}{\rho}$ и разделим (3) на ρ . Задача (2) примет вид:

$$\xi_0 \rightarrow \max, \\ F(\theta)x(0)\xi_0 + \sum_{j=1}^N \xi_j \int_{(j-1)h}^{jh} F(\theta-t)bdt = 0, \quad (4)$$

$$\xi_0 \geq 0, \quad |\xi_j| \leq 1, \quad j = \overline{1, N}.$$

Задача (4) называется в [2] сопровождающей для задачи стабилизации.

3. Процесс функционирования системы представляет собой циклическое выполнение следующих трех шагов.

1) Для текущих момента τ и состояния системы $x(\tau)$ регулятор строит оптимальное программное управление на отрезке $[\tau, \tau + \theta]$, приводящее систему в момент $\tau + \theta$ в ноль.

2) Регулятор подает в систему посчитанное управление на отрезке $[\tau, \tau + \nu]$.

3) В момент $\tau + \nu$ система попадает в некоторое состояние $x(\tau + \nu)$. Теперь текущим моментом считается $\tau + \nu$.

Таким образом, вырабатываемое регулятором управление является программно-позиционным. В [2] доказывается, что интенсивность вырабатываемого управления не возрастает в цикле, а в моменты времени, отстоящие друг от друга на расстояние θ , убывает. Доказательство устойчивости стабилизируемого движения [2] можно провести методом функций Ляпунова.

Для построения оптимального программного управления на первом шаге решается сопровождающая задача (4), которая является задачей линейного программирования. В процессе работы системы приходится решать ряд та-

Зависимость максимума интенсивности управления и времени переходного процесса от параметров θ и h при $\nu = \theta/2$

$\theta\nu$	$5h$	$7h$	$10h$
0,7	22,70/37*	16,70/40	15,80/64
0,8	12,70/37	9,49/51	8,99/66
0,9	7,81/37	5,93/54	5,63/70
1,0	5,19/38	4,06/58	3,80/76
1,1	3,66/39	2,97/66	2,71/81
1,2	2,78/40	2,30/77	2,05/95
1,3	2,23/44	1,86/91	1,61/128
1,4	1,90/48	1,55/108	1,31/188
1,5	1,66/54	1,33/131	1,12/248
1,6	1,48/62	1,16/161	0,99/297

*Слева от черты указан максимум интенсивности, справа – время переходного процесса

ких задач, но они различаются только первыми столбцами в матрице основных ограничений. Это различие тем меньше, чем меньше ν . Поэтому для решения этих задач удобно использовать двойственный метод, выбирая в качестве начальной опоры $K_{оп}(\tau+\nu)$ в момент $\tau+\nu$ оптимальную опору $K_{оп}^*(\tau)$ сопровождающей задачи с предыдущего шага. Известно, что на построение оптимальной опоры $K_{оп}^*(\tau)$ потребуется небольшое число итераций двойственного метода.

Запуск системы производится после построения оптимальной опоры $K_{оп}^*(0)$.

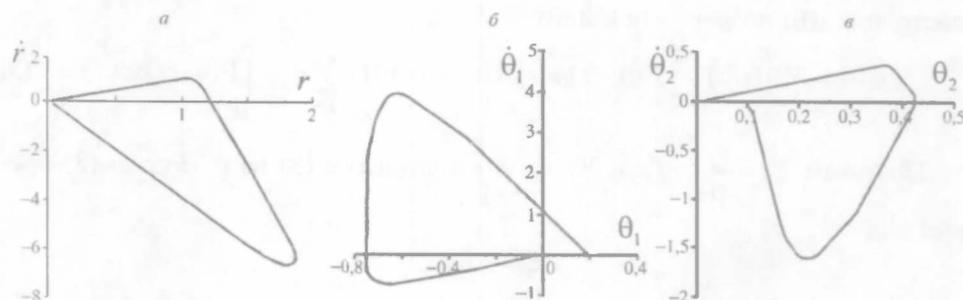


Рис.2

4. Программа, реализующая алгоритм п. 2-4, была написана и протестирована на ПЭВМ. Входными данными были параметры m , N , θ и начальное состояние системы $x(0)$. Процесс моделирования останавливался в момент, когда система оказывалась в состоянии, норма которого в 10 раз меньше нормы состояния $x(0)$. Для решения сопровождающей задачи использовался адаптивный алгоритм [3]. Из-за погрешности машинных вычислений и быстрого роста фундаментальной матрицы $F(t)$ при увеличении t значения параметра θ были ограничены интервалом $[0,35; 1,85]$. В таблице и на рис. 2 приведены результаты работы программы для начального состояния $x(0) = (0; 0,2; 0,1; 0; 0; 0)$.

Для $\theta=1,0$, $m=2$, $h=0,1$ проекции фазовых траекторий на подпространства состояния изображены на рис. 2. Время переходного процесса – 38ν .

¹ Furuta K., Kajiwara H., Koguge K. // International J. Control. 1980. 32. № 5.

² Габасов Р., Ружицкая Е. А. // Кибернетика и системный анализ. №1. 1989. С. 1.

³ Габасов Р., Кириллова Ф. М. Конструктивные методы оптимизации. Ч. II Задачи управления. Мн., 1984.

Поступила в редакцию 09.03.99.

ГЕНЕРАТОРЫ ГОЛОМОРФНЫХ ПОЛУГРУПП КАК ФУНКЦИИ ГЕНЕРАТОРОВ C_0 -ПОЛУГРУПП

It is shown that under certain conditions the function of the Shoenberg class T of an arbitrary generator of a C_0 -semigroup in the Banach space X is a generator of a holomorphic semigroup in X .

Для произвольного генератора A равномерно ограниченной C_0 -полугруппы T в банаховом пространстве X Йосидой [1], Балакришнаном [2] и Като [3] (см. также [4, гл. IX]) доказано, что его дробная степень есть генератор голоморфной полугруппы в X . В работе предлагается способ построения генераторов голоморфных полугрупп, использующий T -исчисление генераторов C_0 -полугрупп [5] (менее полная версия T -исчисления для одномерного случая появилась ранее в [6]). Всюду ниже $\text{Gen}(X)$ и $\text{Hol}(X)$ обозначают множества генераторов равномерно ограниченных C_0 -полугрупп и голоморфных полугрупп в X соответственно. Все меры предполагаются регулярными и борелевскими.

Приведем некоторые необходимые определения и факты из [5]. Говорят, что функция $\psi: (-\infty, 0) \rightarrow (-\infty, 0]$ принадлежит классу T_1 , если она обладает абсолютно монотонной производной. Отметим, что (с точностью до аффинных замен переменных) класс T_1 содержит положительные и отрицательные дробные степени, логарифм, арккосинус, а также полилогарифмы всех порядков и представляет собой конус, замкнутый относительно операции композиции. Каждая функция ψ из T_1 имеет интегральное представление

$$\psi(s) = c_0 + c_1 s + \int_0^{\infty} (e^{-su} - 1) d\mu(u) \quad (s < 0), \quad (1)$$

причем $c_0 = \psi(0)$, $c_1 = \psi'(-\infty)$, и положительная мера μ , сосредоточенная на $(0, +\infty)$, определяется по ψ однозначно.

Для любого $t \geq 0$ функция $g_t(s) = e^{-st}$ абсолютно монотонна и ограничена на $(-\infty, 0]$, а потому имеет интегральное представление

$$g_t(s) = \int_0^{\infty} e^{-sr} dv_t(r),$$

где v_t – ограниченная положительная мера на \mathbf{R}_+ , также определяемая однозначно.

Если оператор A из $\text{Gen}(X)$ порождает полугруппу T , то для любой функции ψ из T_1 с интегральным представлением (1) положим при $x \in D(A)$

$$\psi(A)x = c_0 x + c_1 Ax + \int_0^{\infty} (T(u) - I)x d\mu(u)$$

(I – единичный оператор в X). Известно [5, теорема 4.1], [6, теорема 1], что $\psi(A)$ расширяется до генератора равномерно ограниченной C_0 -полугруппы

$$g_t(A)x := \int_0^{\infty} T(r)x dv_t(r), \quad (2)$$

который мы также обозначаем $\psi(A)$.

Поскольку дробные степени принадлежат T_1 , естественно поставить вопрос, для каких еще функций ψ из T_1 включение $\psi(A) \in \text{Hol}(X)$ справедливо для любого оператора A из $\text{Gen}(X)$. Далее ответ на этот вопрос выводится из

подходящей оценки некоторого зависящего от параметра повторного интеграла, связанного с ψ . Рассмотрены примеры, показывающие содержательность полученного условия.

Связь Т-исчисления с исчислением Хилле–Филлипса. Наш основной результат будет следствием теоремы, связывающей Т-исчисление [5,6] с исчислением Хилле–Филлипса [7, гл. XV]. Пусть a – ограниченная комплексная мера на \mathbf{R}_+ и

$$g(s) = \int_0^{\infty} e^{sr} da(r) = (La)(-s) (s \leq 0)$$

(L – преобразование Лапласа). Тогда для любого оператора A из $\text{Gen}(X)$, порождающего полугруппу T , авторы [7] полагают (ср. с (2))

$$g(A)x = \int_0^{\infty} T(r)x da(r) (x \in X)$$

(наши обозначения несколько отличаются от обозначений в [7]). Далее мы будем рассматривать наиболее важный для приложений случай, когда $da(r) = f(r)dr$, где f принадлежит пространству $L^1(\mathbf{R}_+)$ функций из $L^1(\mathbf{R})$, сосредоточенных на \mathbf{R}_+ .

Теорема 1. Пусть функция ψ из \mathbf{T}_1 имеет вид (1), причем $c_0 = c_1 = 0$, и $g(s) = (Lf)(-s)$, где $f \in L^1(\mathbf{R}_+)$. Если

$$k(f, \mu) := \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} |f(r-u) - f(r)| dr d\mu(u) < \infty,$$

то

- 1) функция $h(s) := \psi(s)g(s)$ представима в виде $(Lb)(-s)$, где b – ограниченная комплексная мера на \mathbf{R}_+ полной вариации $\|b\| < k(f, \mu)$;
- 2) для любого оператора A из $\text{Gen}(X)$, порождающего полугруппу T с оценкой $\|T(t)\| \leq M$, имеем $h(A) = \psi(A)g(A)$ и $\|h(A)\| \leq Mk(f, \mu)$.

Доказательство. 1). Предположим сначала, что $\psi(s) = e^{-su} - 1$, $u > 0$. Тогда, учитывая, что f сосредоточена на \mathbf{R}_+ ,

$$\begin{aligned} (e^{su} - 1)g(s) &= (e^{su} - 1) \int_0^{\infty} e^{sr} f(r) dr = \int_0^{\infty} e^{s(r+u)} f(r) dr - \int_0^{\infty} e^{sr} f(r) dr = \\ &= \int_u^{\infty} e^{sr} f(r-u) dr - \int_0^{\infty} e^{sr} f(r) dr = \int_0^{\infty} e^{sr} (f(r-u) - f(r)) dr. \end{aligned}$$

Таким образом, в этом случае $db(r) = db^u(r) := (f(r-u) - f(r))dr$.

Пусть теперь ψ имеет представление (1) с $c_0 = c_1 = 0$. По доказанному выше

$$h(s) = \int_0^{\infty} (e^{su} - 1)g(s) d\mu(u) = \int_0^{\infty} \left(\int_0^{\infty} e^{sr} db^u(r) \right) d\mu(u). \quad (3)$$

Поскольку

$$\|b^u\| = \int_0^{\infty} |f(r-u) - f(r)| dr,$$

вектор-функция $u \mapsto b^u$ μ -интегрируема в смысле Бохнера в силу конечности $k(f, \mu)$. Поэтому

$$b := \int_0^{\infty} b^u d\mu(u)$$

есть ограниченная комплексная мера на \mathbf{R}_+ и

$$\|b\| \leq \int_0^{\infty} \|b^u\| d\mu(u) = k(f, \mu).$$

Формула (3) теперь может быть записана в виде $h(s) = (Lb)(-s)$, что и доказывает первое утверждение теоремы.

2). Так как $h(s) = (Lb)(-s)$, в силу определения меры b имеем при всех A из $\text{Gen}(X)$ и x из X

$$h(A)x = \int_0^{\infty} T(r)x db(r) = \int_0^{\infty} \left(\int_0^{\infty} T(r)x db^u(r) \right) d\mu(u).$$

При этом

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} T(r)x db^u(r) &= \int_0^{\infty} T(r)x(f(r-u) - f(r))dr = \\ &= \int_u^{\infty} T(r)x f(r-u)dr - \int_0^{\infty} T(r)x f(r)dr = \\ &= \int_0^{\infty} T(r+u)x f(r)dr - \int_0^{\infty} T(r)x f(r)dr = \int_0^{\infty} (T(u) - I)T(r)x f(r)dr = \\ &= (T(u) - I)g(A)x. \end{aligned}$$

Поэтому

$$h(A)x = \int_0^{\infty} (T(u) - I)g(A)x d\mu(u) = \psi(A)g(A)x.$$

Наконец, так как $\|b\| < k(f, \mu)$, то

$$\|h(A)\| \leq \int_0^{\infty} \|T(r)\| d\|b\|(r) \leq M \|b\| \leq Mk(f, \mu).$$

Замечание 1. Если дополнительно к условиям теоремы 1 предположить, что f неотрицательна и не возрастает на \mathbf{R}_+ , то

$$k(f, \mu) = 2 \int_0^{\infty} \int_0^u f(r) dr d\mu(u). \quad (4)$$

Доказательство. В самом деле, как показано в доказательстве теоремы 1

$$\begin{aligned} \|b^u\| &= \int_0^{\infty} |f(r-u) - f(r)| dr = \int_0^u f(r) dr + \int_u^{\infty} (f(r-u) - f(r)) dr = \\ &= \int_0^u f(r) dr + \int_0^{\infty} f(r) dr - \int_u^{\infty} f(r) dr = 2 \int_0^u f(r) dr. \end{aligned}$$

Замечание 2. Пусть в дополнение к условиям теоремы 1 f неотрицательна, непрерывна на \mathbf{R}_+ , а также возрастает при $0 < r < r_0$ и убывает при $r > r_0$. Если для $u > 0$ мы обозначим через $r(u)$ (единственный) корень уравнения $f(r-u) = f(r)$, то $u < r(u) < r_0 + u$ и

$$k(f, \mu) = 2 \int_0^{\infty} \int_{r(u)-u}^{r(u)} f(r) dr d\mu(u). \quad (5)$$

Доказательство. Существование, единственность и свойства $r(u)$ сразу следуют из свойств функции f . Далее,

$$|f(r-u) - f(r)| = \begin{cases} f(r), & 0 < r \leq u \\ f(r) - f(r-u), & u < r < r(u) \\ f(r-u) - f(r), & r > r(u). \end{cases}$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \int_0^\infty |f(r-u) - f(r)| dr &= \int_0^u f(r) dr + \int_u^{r(u)} (f(r) - f(r-u)) dr + \\ &+ \int_{r(u)}^\infty (f(r-u) - f(r)) dr = \int_0^u f(r) dr + \int_u^\infty (f(r-u) - f(r)) dr + \\ &+ \int_{r(u)}^u (f(r-u) - f(r)) dr + \int_u^{r(u)} (f(r) - f(r-u)) dr = \\ &= 2 \int_0^u f(r) dr + 2 \int_u^{r(u)} (f(r) - f(r-u)) dr = 2 \int_0^{r(u)} f(r) dr - 2 \int_u^{r(u)} f(r-u) dr = \\ &= 2 \int_0^{r(u)} f(r) dr - 2 \int_0^{r(u)-u} f(r) dr = 2 \int_{r(u)-u}^{r(u)} f(r) dr, \end{aligned}$$

что и доказывает наше утверждение.

Основной результат. Примеры. Наш основной результат легко выводится из теоремы 1. Напомним, что $g_t(s) = e^{t\psi(s)}$, $t > 0$.

Теорема 2. Пусть функция ψ из T_1 имеет представление (1) с $c_0 = c_1 = 0$; $g_t(s) = (Lf_t)(-s)$, где $f_t \in L^1(\mathbf{R}_+)$, $t > 0$. Если $k(f_t, \mu) \leq C/t$ при $0 < t < 1$ с некоторой константой $C > 0$, то $\psi(A) \in \text{Hol}(X)$ для любого оператора A из $\text{Gen}(X)$.

Доказательство. Как отмечено выше, $\psi(A)$ есть генератор C_0 -полугруппы $\mathcal{L}(A)$. Поскольку $(d/dt)g_t(A)x = \psi(A)g_t(A)x$, то теорема 1 дает оценку $\|(d/dt)g_t(A)\| \leq Mk(f_t, \mu) \leq CM/t$, $0 < t < 1$, что и обеспечивает голоморфность полугруппы $\mathcal{L}(A)$ в силу [4, с. 351].

Пример 1 [6, пример 2]. Функция $\psi(s) = -\log(1-s)$, $s < 0$, принадлежит T_1 , причем $d\mu(u) = u^{-1}e^{-u} du$; $f_t(r) = \Gamma(t)^{-1} r^{t-1} e^{-r}$ ($r > 0$). Очевидно, что при $0 < t < 1$ функция f_t принадлежит $L^1(\mathbf{R}_+)$ и убывает на \mathbf{R}_+ . Для оценки $k(f_t, \mu)$ воспользуемся замечанием 1. Имеем при $0 < t < 1$

$$\begin{aligned} k(f_t, \mu) &= 2 \int_0^\infty \left(\int_0^u \Gamma(t)^{-1} r^{t-1} e^{-r} dr \right) u^{-1} e^{-u} du \leq \\ &< 2\Gamma(t)^{-1} \int_0^\infty \left(\int_0^u r^{t-1} dr \right) u^{-1} e^{-u} du = 2/t. \end{aligned}$$

Таким образом, $-\log(I-A) \in \text{Hol}(X) \forall A \in \text{Gen}(X)$.

Пример 2 [6, пример 1]. Пусть $\psi(s) = -(-s)^{1/2}$. Тогда $\psi \in T_1$, причем $d\mu(u) = 2^{-1} \pi^{-1/2} u^{-3/2} du$. Известно [4, с. 358, 369], что $g_t(s) = (Lf_t)(-s)$, где $f_t(r) = 2^{-1} \pi^{-1/2} t r^{-3/2} e^{-t/4r}$. Легко проверить, что функция f_t удовлетворяет условиям замечания 2 с $r_0 = t^2/6$, $f_t(r_0) = C/t^2$ (здесь и ниже все $C_i = \text{const}$). В силу (5)

$$k(f_t, \mu) = 2 \int_0^{r_0} \left(\int_{r(u)-u}^{r(u)} f_t(r) dr \right) d\mu(u) + 2 \int_{r_0}^\infty \left(\int_{r(u)-u}^{r(u)} f_t(r) dr \right) d\mu(u). \quad (6)$$

Поскольку $\int_{r_0}^{r(u)} f_t(r) dr < f_t(r_0)u = C_1 u / t^2$, первое слагаемое в (6) меньше, чем $2^{-1} \pi^{-1/2} C_1 t^{-2} \int_0^{t^2/6} u^{-1/2} du = C_2/t$. Далее,

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \left(\int_{r(u)-u}^{r(u)} f_t(r) dr \right) d\mu(u) \leq \int_0^\infty \left(\int_0^u + \int_u^{r(u)} \right) f_t(r) dr d\mu(u) \leq \\ & \leq \int_0^\infty \int_0^u f_t(r) dr d\mu(u) + \int_0^\infty \int_u^{r(u)} f_t(r) dr d\mu(u), \end{aligned}$$

причем по теореме Фубини

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \int_0^\infty f_t(r) dr d\mu(u) = \int_0^\infty d\mu(u) \int_0^\infty f_t(r) dr = \\ & = \frac{t}{4\pi} \int_0^\infty \left(\int_0^{t^2/2} u^{-3/2} du \right) e^{-t^2/4r} r^{-3/2} dr - \frac{t}{2\pi} \int_0^\infty e^{-t^2/4r} r^{-2} dr = C_3/t. \end{aligned}$$

Наконец, поскольку $f_t(r)$ убывает при $r > r_0$, то при $u > r_0$

$$\int_u^{r(u)} f_t(r) dr \leq f_t(u)(r(u) - u) < r_0 f_t(u).$$

Поэтому

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \int_u^{r(u)} f_t(r) dr d\mu(u) \leq r_0 \int_0^\infty f_t(u) d\mu(u) = \frac{t^3}{24\pi} \int_{t^2/6}^\infty \frac{e^{-t^2/4u}}{u \cdot u^2} du \leq \\ & \leq \frac{t^3}{24\pi} \cdot \frac{6}{t^2} \int_{t^2/6}^\infty \frac{e^{-t^2/4u}}{u^2} du = C_4/t. \end{aligned}$$

Следовательно, все условия теоремы 2 выполнены, и $-(-A)^{1/2} \text{Hol}(X) \forall A \in \text{Gen}(X)$.

1. Yosida K. // Proc. Japan Acad. 1960. Vol. 36. P. 81.
2. Balakrishnan V. // Pacific J. Math. 1960. Vol. 10. P. 419.
3. Kato T. // Proc. Japan Acad. 1960. Vol. 36. P. 91.
4. Йосида К. Функциональный анализ. М. 1967.
5. Миротин А. Р. // Алгебра и анализ. 1999. Т. 11. N 2. С. 142.
6. Он же. // Сиб. мат. журн. 1998. Т. 39. N 3. С. 571.
7. Хилле Э., Филлипс Р. Функциональный анализ и полугруппы. М., 1962.

Поступила в редакцию 11.09.99.

УДК 519.1

О.И.МЕЛЬНИКОВ, А.Н.ШИЛАК

ПОСТРОЕНИЕ ТРАНЗИТИВНОЙ РЕДУКЦИИ АЦИКЛИЧЕСКОГО ОРГРАФА

In the paper an algorithm of complexity $O(|VH|^2)$ for constructing of the transitive reduction of an acyclic digraph is presented.

Пусть задан ориентированный граф $G=(V, E)$, где V – множество вершин, E – множество дуг. Пусть $|V|=n$, $|E|=m$.

Транзитивным замыканием орграфа G называется орграф $\tilde{G}=(V, \tilde{E})$, у которого дуга $(u, v) \in \tilde{E}$ тогда и только тогда, когда в орграфе G существует путь из вершины u в вершину v .

Транзитивной редукцией орграфа G называется минимальный по включению подграф орграфа G , транзитивное замыкание которого совпадает с транзитивным замыканием орграфа G .

В [1] приведен алгоритм сложности $O(mn)$, строящий одновременно транзитивное замыкание и транзитивную редукцию ациклического орграфа.

В [2] представлен алгоритм сложности $O(n^2)$ построения транзитивного замыкания орграфа.

В настоящей работе этот алгоритм использован для построения транзитивной редукции ациклического орграфа. сложность нового алгоритма такая же, как и у исходного.

Пусть G – связный ациклический орграф. Будем считать, что вершины орграфа G занумерованы так, что начало каждой дуги имеет номер меньший, чем ее конец. В противном случае такую нумерацию можно произвести за $O(m)$ операций [3]. Номер вершины v будет обозначаться $N(v)$.

Превратим орграф G в орграф T_0 по следующему правилу: для каждой вершины орграфа G удалим все дуги, входящие в эту вершину, кроме одной, с наибольшей начальной вершиной. Орграф T_0 является объединением корневых деревьев.

Пусть \tilde{T}_0 – транзитивное замыкание орграфа T_0 . Его можно построить за $O(q)$ операций [2], где q – число дуг орграфа \tilde{T}_0 . Поскольку удаление любой дуги из орграфа \tilde{T}_0 нарушает связность одного из корневых деревьев, то T_0 – минимальный по включению орграф, транзитивное замыкание которого совпадает с орграфом \tilde{T}_0 . Следовательно, орграф T_0 является транзитивной редукцией орграфа \tilde{T}_0 .

Рассмотрим удаленные дуги и упорядочим их по убыванию номеров их концов, причем при одинаковом номере концов у нескольких дуг упорядочим эти дуги по убыванию номеров их начал. Пусть e_1, e_2, \dots, e_s – нумерация удаленных дуг, удовлетворяющая введенному порядку.

Пусть орграф \tilde{T}_k есть транзитивное замыкание орграфа $T_k = T_0 + e_1 + e_2 + \dots + e_k$, а орграф \bar{T}_k – транзитивная редукция орграфа T_k и, следовательно, орграфа \tilde{T}_k .

Предположим, что орграфы \tilde{T}_k и \bar{T}_k построены. Пусть $e_{k+1} = (u, v)$ – очередная удаленная дуга. Если $e_{k+1} \in \tilde{T}_k$, то $\tilde{T}_{k+1} = \tilde{T}_k$. В этом случае $\bar{T}_{k+1} = \bar{T}_k$. Рассмотрим случай, когда $e_{k+1} \notin \tilde{T}_k$.

Теорема 1. Если $e_{k+1} \notin \tilde{T}_k$, то $\bar{T}_{k+1} = \bar{T}_k + e_{k+1}$.

Доказательство. Обозначим $T'_{k+1} = \bar{T}_k + e_{k+1}$.

Из определения транзитивной редукции следует, что транзитивные замыкания орграфов \tilde{T}_k и \bar{T}_k совпадают. Следовательно, из соответствующих вершин этих орграфов достижимы одни и те же вершины. Поэтому при добавлении к обоим орграфам одной и той же дуги транзитивные замыкания полученных при этом орграфов будут одинаковыми. Следовательно,

$$\widetilde{T}'_{k+1} = \widetilde{T}_{k+1}. \quad (1)$$

Докажем минимальность орграфа T'_{k+1} , т.е. докажем, что после удаления любой дуги из орграфа T'_{k+1} будет нарушаться равенство (1).

Поскольку в орграфе \widetilde{T}_k отсутствует дуга $e_{k+1}=(u, v)$, то удаление этой дуги из T'_{k+1} приведет к тому, что вершина v не будет достижима из вершины u .

Теперь предположим, что после удаления из \widetilde{T}_{k+1} некоторой ранее добавленной дуги $e_l=(u_l, v_l)$, $0 < l < k+1$, транзитивное замыкание орграфа $T'_{k+1}-e_l$ будет совпадать с орграфом \widetilde{T}_{k+1} .

Дуга e_l должна принадлежать транзитивному замыканию орграфа $T'_{k+1}-e_l$, так как $e_l \in \widetilde{T}_{k+1}$. Следовательно, в орграфе $T'_{k+1}-e_l$ существует единственный (u_l, v_l) -путь, содержащий в качестве промежуточной дугу e_{k+1} , поскольку в противном случае при удалении этой дуги из орграфа $T'_{k+1}-e_l$ вершина v_l будет по-прежнему достижима из вершины u_l , т.е. \widetilde{T}_k не будет транзитивной редукцией.

При добавлении дуги $e_{k+1}=(u, v)$ в транзитивном замыкании могут появиться дуги $e'_i=(u'_i, v'_i)$ такие, что

$$N(u'_i) \leq N(u) < N(v) \leq N(v'_i). \quad (2)$$

Но из правил нумерации удаленных дуг следует, что $N(v_l) \leq N(v)$, причем если $N(v_l) = N(v)$, то $N(u_l) > N(u)$. Таким образом, неравенство (2) не выполняется. Это значит, что никакую ранее добавленную дугу удалить из орграфа T'_{k+1} нельзя.

Предположим, что после удаления некоторой дуги $e_0=(u_0, v_0)$, принадлежащей орграфу T_0 , транзитивное замыкание орграфа $T'_{k+1}-e_0$ будет совпадать с орграфом \widetilde{T}_{k+1} . Рассуждая как и ранее, можно показать, что $N(u_0) \leq N(u) < N(v) \leq N(v_0)$, и существует (u_0, v_0) -цепь $L=(u_0, \dots, u, v, \dots, w, v_0)$, содержащая в качестве промежуточной дугу $e_{k+1}=(u, v)$. В этом случае $N(w) > N(u_0)$, и по правилу построения орграфа T_0 из орграфа G будет удалена дуга (u_0, v_0) .

Теорема доказана.

Используя теорему 1, можно предложить алгоритм построения транзитивной редукции ациклического орграфа G .

Алгоритм B построения транзитивной редукции ациклического орграфа.

1. Построить орграф T_0 .
2. Занумеровать удаленные дуги: e_1, e_2, \dots, e_s .
3. Построить \widetilde{T}_0 . Положить $\widetilde{T}_0 = T_0$.
4. Пусть построены орграфы \widetilde{T}_k и \widetilde{T}_k .

Если $e_{k+1} \in \widetilde{T}_k$, то $\widetilde{T}_{k+1} = \widetilde{T}_k$.

Если $e_{k+1} \notin \widetilde{T}_k$, то $\widetilde{T}_{k+1} = \widetilde{T}_k + e_{k+1}$.

Построить орграф \widetilde{T}_{k+1} .

Алгоритм прекращает работу после выполнения п. 4 для каждой из удаленных дуг. Орграф \widetilde{T}_s является транзитивной редукцией орграфа G .

Теорема 2. Трудоемкость предложенного алгоритма равна $O(n^2)$.

Доказательство. Алгоритм A построения транзитивного замыкания орграфа [2] имеет сложность $O(n^2)$. Орграф G задается списком смежности и матрицей смежности B . В процессе реализации алгоритма используется также матрица смежности B_k орграфа \tilde{T}_k , $k=0, 1, \dots, s$. Будем использовать также C_k – матрицу смежности транзитивной редукции орграфа T_k .

Рассмотрим дополнительные операции, которые выполняются в алгоритме B по отношению к алгоритму A .

При нумерации удаленных дуг для каждой вершины с номером j ($j=1, 2, \dots, n$) просматриваются вершины с номерами $j-1, j-2, \dots, 1$ в указанном порядке. Если в матрице B элемент $b_{ji}=1$, а в матрице C_0 соответствующий элемент равен 0, то дуга (i, j) была удалена в процессе построения орграфа T_0 . Удаленные дуги нумеруются в процессе обнаружения. Нумерация, произведенная подобным образом, требует $O(n^2)$ операций.

Проверка в п.4 наличия или отсутствия дуги e_{k+1} проводится с помощью матрицы B_k за одну операцию.

Во всем остальном алгоритм B не отличается от алгоритма A .

Теорема доказана.

1. Goralčikova A., Koubek V. // Lect. Notes Comput. Sci. 1979. Vol.71. P.301.

2. Мельников О.И., Радчук А.А., Радчук В.Я. // Вестн АН Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. №3. 1996. С.87–88.

3. Рейнгольд Э., Нивергельт Ю., Део Н. Комбинаторные алгоритмы. Теория и практика. М., 1980.

Поступила в редакцию 23.03.99.

УДК 517.948.32:517.544

Н.А. ДЕГТЯРЕНКО, Э.И. ЗВЕРОВИЧ

НАХОЖДЕНИЕ СПЕКТРА И СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ ОДНОГО СИНГУЛЯРНОГО ИНТЕГРАЛЬНОГО ОПЕРАТОРА С ЭЛЛИПТИЧЕСКОЙ ФУНКЦИЕЙ В КАЧЕСТВЕ ЯДРА

The spectrum of a self-adjoint singular integral operator with elliptic function as a kernel is determined. The system of its proper functions in explicit form is constructed.

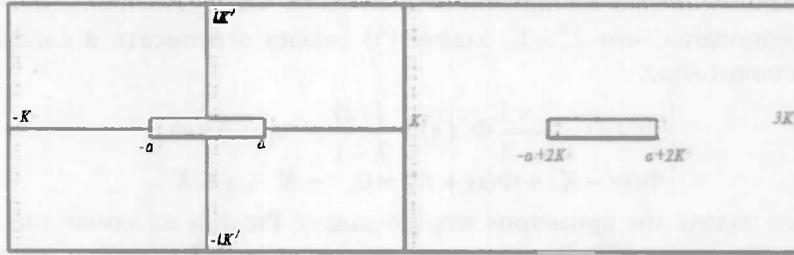
Рассмотрим сингулярное интегральное уравнение

$$\lambda\varphi(x) - \frac{1}{\pi i} \int_{-a}^a \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\operatorname{sn}(\tau-x)} = f(x), \quad -a < x < a, \quad (1)$$

где $\operatorname{sn}(\cdot)$ – эллиптическая функция Якоби [1, с.94] с основными периодами $4K$ и $2iK$ (K и K – некоторые положительные числа), а λ и a – числовые параметры, причем $0 < a < K$. Будем предполагать, что заданная функция $f(x)$ и неизвестная функция $\varphi(x)$ принадлежат пространству $L_2(-a, a)$.

Так как $\operatorname{sn} z \sim z$ при $z \rightarrow 0$, то выражение $\frac{d\tau}{\operatorname{sn}(\tau-z)}$ есть аналог ядра Коши на

торе. Тор, как известно, можно реализовать в виде прямоугольника со сторонами длин $4K$ и $2K$, противолежащие стороны которого параллельны осям координат и попарно отождествлены. В качестве такого прямоугольника зафиксируем, например, прямоугольник вида $[-K, 3K] \times [-iK, iK]$.



В силу свойств эллиптического синуса уравнение (1) представляет собой полное сингулярное уравнение с ядром типа Коши. Поэтому входящий в (1) интегральный оператор ограниченно действует из $L_2(-a, a)$ в $L_2(-a, a)$. Далее, так как функция $\operatorname{sn}(\cdot)$ вещественная на вещественной оси и нечетная, то выполняется тождество

$$\left(\frac{1}{\pi i \operatorname{sn}(x-\tau)} \right) \equiv \frac{1}{\pi i \operatorname{sn}(\tau-x)}. \quad (2)$$

Поэтому интегральный оператор в (1) является самосопряженным (как оператор из $L_2(-a, a)$ в $L_2(-a, a)$). Следовательно, его спектр есть компактное подмножество вещественной оси, а собственные функции, соответствующие различным собственным значениям, — ортогональны [2, 3]. Желая найти в явном виде весь спектр и все собственные функции интегрального оператора в уравнении (1) в пространстве $L_2(-a, a)$, применим метод аналитического продолжения. С этой целью введем в рассмотрение кусочно-аналитическую функцию

$$\Phi(z) := \frac{1}{2\pi i} \int_{-a}^a \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\operatorname{sn}(\tau-z)}, \quad z \notin [-a, a], \quad (3)$$

где все символы в правой части обозначают то же самое, что и в уравнении (1). Эта функция является двойкопериодической с основными периодами $4K$ и $2iK$. Так как дифференциал $\frac{d\tau}{\operatorname{sn}(\tau-z)}$ имеет в точках $\tau = z$, $\tau = z+2K$ простые полюсы с вычетами в них, равными $(+1)$ и (-1) соответственно, то для интеграла (3) на линиях его разрыва $(-a, a)$ и $(-a+2K, a+2K)$, ориентированных слева направо, справедливы формулы Сохоцкого [4]. При $x \in (-a, a)$ они имеют вид:

$$\begin{cases} \Phi^+(x) - \Phi^-(x) = \varphi(x), \\ \Phi^+(x) + \Phi^-(x) = \frac{1}{\pi i} \int_{-a}^a \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\operatorname{sn}(\tau-x)}. \end{cases} \quad (4)$$

Используя эти формулы, а также тождество $\operatorname{sn}(z+2K) = -\operatorname{sn}(z)$, перепишем уравнение (1) в виде следующей задачи линейного сопряжения:

$$\begin{cases} (\lambda - 1)\Phi^+(x) - (\lambda + 1)\Phi^-(x) = f(x), & x \in (-a, a), \\ \Phi(iy - K) + \Phi(iy + K) = 0, & -K < y < K, \\ \Phi(x - iK) = \Phi(x + iK), & -K < x < K. \end{cases} \quad (5)$$

Последнее равенство в краевом условии (5) есть условие аналитической продолжимости функции $\Phi(z)$, поэтому его можно отбросить. Таким образом, можно считать, что неизвестная функция $\Phi(z)$ задана в прямоугольни-

ке $[-K, K] \times [-iK, iK]$, у которого отождествлены пары противоположащих сторон. Предполагая, что $\lambda \neq 1$, задачу (5) можно переписать в следующем равносильном виде:

$$\begin{cases} \Phi^+(x) = \frac{\lambda+1}{\lambda-1} \Phi^-(x) + \frac{f(x)}{\lambda-1}, & x \in (-a, a), \\ \Phi(iy - K) + \Phi(iy + K) = 0, & -K \leq y \leq K. \end{cases} \quad (6)$$

К этой задаче мы применим теорию задачи Римана на замкнутой римановой поверхности [5]. В нашем случае риманова поверхность имеет род $h=1$.

Спектр интегрального оператора в уравнении (1) можно найти из того условия, что в точках спектра неоднородное уравнение (1) разрешимо не при любой функции $f \in L_2(-a, a)$. Учитывая, что спектр самосопряженного оператора в $L_2(-a, a)$ вещественный, будем считать, что $\lambda \in \mathbb{R}$.

Если $\lambda = -1$ или $\lambda = 1$, то задача (5) есть задача об аналитическом продолжении функции $f(x)$ в некоторые области. Такая задача разрешима не при любой функции $f(x)$, поэтому обе точки $\lambda = \pm 1$ являются точками спектра. Далее, если $\frac{\lambda+1}{\lambda-1} < 0$, что равносильно неравенству $-1 < \lambda < 1$, то

можно считать, что $\arg \frac{\lambda+1}{\lambda-1} = \pi$. Поэтому индекс [5, с. 132] коэффициента задачи (6) равен (-1) . Решения этой задачи, имеющие при $z \rightarrow \pm a$ интегрируемые особенности, обладают асимптотикой $(z+a)^{-\frac{1}{2}}$ и, следовательно, соответствующие решения уравнения (1) не могут принадлежать пространству $L_2(-a, a)$. Поэтому будем искать решения задачи (6) в классе ограниченных функций. Но тогда, учитывая, что индекс коэффициента задачи (6) равен (-1) , имеем [5, с.136]: $l = 0, \quad l = 1$, где l – число линейно независимых решений однородной задачи, соответствующей (6) ($f(x) = 0$), а l – число условий разрешимости неоднородной задачи (6). Значит, неоднородное уравнение (1) не является безусловно разрешимым, и поэтому все точки отрезка $[-1, 1]$ являются точками непрерывного спектра интегрального оператора в уравнении (1).

Все остальные точки спектра, если такие существуют, должны удовлетворять неравенству $\frac{\lambda+1}{\lambda-1} > 0$. В этом случае можно считать, что $\arg \frac{\lambda+1}{\lambda-1} = 0$. Тогда индекс коэффициента задачи (6) равен нулю, и решения этой задачи могут быть только ограниченными функциями. Так как индекс коэффициента задачи равен нулю, то при данных предположениях о параметре λ реализуется так называемый “особый случай”: $l - l = 0$ [5, с.137–146]. В этом случае точками спектра (а именно, собственными значениями интегрального оператора в уравнении (1)) будут те значения λ , при которых выполняется равенство $l = l = 1$.

Рассмотрим однородную задачу, соответствующую задаче (6), предполагая, что выполняется условие $\frac{\lambda+1}{\lambda-1} > 0$. Учитывая это условие, можно за-

фиксировать чисто вещественную ветвь функции $\ln \frac{\lambda+1}{\lambda-1}$, что мы и делаем.

Будем также считать, что $\ln(-1) = \pi i$. В “особом случае” нетривиальная разрешимость однородной задачи, соответствующей задаче (6), равносильна существованию таких целых чисел n и m , что выполняется равенство:

$$\frac{1}{2\pi i} \ln \frac{\lambda+1}{\lambda-1} \int_{-a}^a \frac{d\tau}{2K} + \frac{\pi i}{2\pi i} \int_{-iK}^{iK} \frac{d\tau}{2K} + n + m \frac{iK}{K} = 0. \quad (7)$$

Здесь используется тот факт, что в нашем случае комплексно-нормированный базис абелевых дифференциалов первого рода состоит из одного дифференциала $\frac{d\tau}{2K}$. Равенство (7) есть частный случай обобщенной проблемы обращения Якоби [5, с.143]. Вычисляя интегралы в равенстве (7), перепишем его в следующем равносильном виде:

$$\frac{a}{2\pi i K} \ln \frac{\lambda+1}{\lambda-1} + \frac{iK}{2K} + n + m \frac{iK}{K} = 0.$$

Очевидно, что $n = 0$, а числа m и λ связаны следующим образом:

$$\frac{a}{\pi} \ln \frac{\lambda+1}{\lambda-1} = (2m+1)K.$$

Отсюда, считая m произвольным целым числом, находим соответствующие значения параметра $\lambda = \lambda_m$:

$$\lambda_m = \frac{e^{\frac{\pi K}{a}(2m+1)} + 1}{e^{\frac{\pi K}{a}(2m+1)} - 1}, \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (8)$$

Итак, кроме непрерывного спектра, заполняющего отрезок $[-1, 1]$, интегральный оператор в уравнении (1) имеет дискретный спектр $\{\lambda_m | m \in \mathbb{Z}\}$, причем очевидно, что $|\lambda_m| > 1$ и $\lambda_m \rightarrow \pm 1$ при $m \rightarrow \pm \infty$.

При каждом целом m собственному значению λ_m будет соответствовать функция $\Phi_m(z)$ – решение однородной задачи, соответствующей задаче (6), при фиксированном значении $\lambda = \lambda_m$. Это решение можно найти по формуле [5, с. 135]:

$$\Phi_m(z) = \exp \left(\frac{1}{2\pi i} \ln \frac{\lambda_m+1}{\lambda_m-1} \int_{-a}^a \omega(\tau, z) d\tau + \frac{1}{2} \frac{K+iK}{K} \int_{-K-iK}^{K-iK} \omega(\tau, z) d\tau + \frac{\pi m i}{K} z \right) \quad (9)$$

Здесь $\omega(\tau, z) d\tau$ – аналог ядра Коши в прямоугольнике периодов, разрывный вдоль линии $[-K-iK, K-iK]$. В данном случае разрывный аналог ядра Коши [5, с.124] выражается через ζ -функцию Вейерштрасса [1, с.52], построенную по основным периодам $2K$ и $2iK$. Это выражение имеет вид:

$$\omega(\tau, z) d\tau = \zeta(\tau-z) d\tau - \zeta(\tau-z_0) d\tau - \frac{d\tau}{2K} \int_{-K-iK}^{K-iK} [\zeta(t-z) - \zeta(t-z_0)] dt, \quad (10)$$

где z_0 – произвольная фиксированная точка, лежащая внутри прямоугольника периодов и не принадлежащая отрезку $[-a, a]$. С учетом формулы

$$\int_{K-iK}^{K+iK} \omega(\tau, z) d\tau = 2\pi i \int_{z_0}^z \frac{d\tau}{2K} = \frac{\pi i}{K} (z - z_0),$$

подставляя выражение (10) в формулу (9), получим, что функции $\Phi_m(z)$ с точностью до постоянного множителя преобразуются к виду:

$$\Phi_m(z) = \exp \left[\frac{(2m+1)K}{2ai} \left(\int_{-a}^a \zeta(\tau - z) d\tau - \frac{a}{K} \int_{-K-iK}^{K-iK} \zeta(t - z) dt \right) + \frac{\pi iz}{2K} (1+2m) \right]. \quad (11)$$

Теперь, используя формулы Сохоцкого для интеграла типа Коши [5, с.127], можно выписать всю систему собственных функций интегрального оператора в уравнении (1) в пространстве $L_2(-a, a)$. С точностью до постоянного множителя они будут выражаться следующим образом:

$$\begin{aligned} \Phi_m(x) &= \Phi_m^+(x) - \Phi_m^-(x) = \\ &= \exp \left[\frac{(2m+1)K}{2ai} \times \left(\int_{-a}^a \zeta(\tau - x) d\tau - \frac{a}{K} \int_{-K-iK}^{K-iK} \zeta(t - x) dt \right) + \frac{\pi ix}{2K} (1+2m) \right], \quad (12) \\ &\quad -a < x < a, \end{aligned}$$

где m – любое целое число.

Сформулируем полученные результаты.

Спектр интегрального оператора в уравнении (1) состоит из непрерывного спектра, заполняющего сплошь отрезок $[-1, 1]$, и дискретного спектра, все точки которого выражаются посредством формулы (8). Каждому собственному значению соответствует единственная, с точностью до постоянного множителя, собственная функция в пространстве $L_2(-a, a)$, которая вычисляется по формуле (12). Эти собственные функции дают пример новой ортогональной системы функций в пространстве $L_2(-a, a)$.

1. Ахиезер Н.И. Элементы теории эллиптических функций. М., 1970.
2. Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. М., 1981.
3. Ахиезер Н.И., Глазман И.М. Теория линейных операторов в гильбертовых пространствах. М., 1966.
4. Гахов Ф.Д. Краевые задачи. М., 1977.
5. Зверович Э.И. //Успехи мат. наук. 1971. Т. 26. Вып.1(157).С. 113.

Поступила в редакцию 06.04.99.

Краткие сообщения



УДК 621.315.592

Н.А. ПОКЛОНСКИЙ

ИНЕРЦИОННОЕ ЭКРАНИРОВАНИЕ ИНДУКЦИОННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В РЕЗИСТОРЕ ПРИ ВКЛЮЧЕНИИ ЕГО В СВЕРХПРОВОДЯЩУЮ ЦЕПЬ

It is shown that the observed potential difference between the resistor and the screen surrounding the circuit is caused by resistor polarization due to the kinetic energy of electrons of the superconducting coil.

Эдвардс и др. [1, 2] наблюдали появление квадратичного по току I электрического потенциала на резисторе, образующем замкнутую цепь со сверхпроводящей катушкой, относительно заземленного экрана (рисунок). Резистор и электростатический экран были выполнены из латуни. Установлено, что разность потенциалов между центром резистора R и экраном $\Phi_r \propto bI^2$, где b – длина сверхпроводящей проволоки. Величина Φ_r практически не зависела от конфигурационной индуктивности катушки L_c , минимизированной бифилярной намоткой. При токе $I=16$ А, $b \sim 700$ м, $L_c \approx 800$ мкГн и $R=82$ мкОм типичное значение $\Phi_r \approx 5$ мВ. Постоянная времени контура $\tau = L_c / R \approx 10$ с. Сверхпроводящая проволока (NbTi, а также чистый Nb, Pb) диаметром $2a \sim 127$ мкм была покрыта слоем меди (толщиной 19 мкм), электрическое сопротивление которого много больше R . Катушка и резистор погружались в жидкий гелий; сигнальный провод электрометра V присоединялся к центру резистора.

В продолжение работ [3, 4] дадим интерпретацию экспериментов [1, 2]. Опираясь на методические заметки [5–7], прежде всего выясним что именно измеряет вольтметр V . В частности, оценим возникающую в условиях опыта максимальную величину потенциала $\Phi_r \approx \Phi_p$, не рассматривая динамику спада Φ_r во времени.

Далее исходим из того, что полная энергия сверхпроводящей катушки с током I есть сумма энергии магнитного поля $L_c I^2 / 2$ и кинетической энергии направленного движения электронов K_m . Для катушки, намотанной проволокой диаметром $2a$ и длиной b , кинетическая энергия электронов [8]:

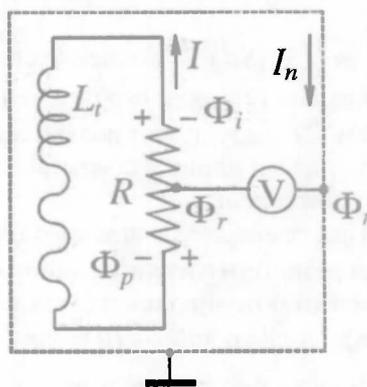


Схема измерений электрического потенциала контура сверхпроводящая катушка-резистор [1, 2] по [3]

$$K_m = \frac{L_k I^2}{2} = \frac{\mu_0 \lambda b}{8\pi a} I^2, \quad (1)$$

где L_k – кинетическая индуктивность, $L_t = L_c + L_k \sim L_c$ – полная индуктивность катушки, $\lambda \ll a$ – лондоновская глубина возбуждения тока в проволоке, μ_0 – магнитная постоянная.

После включения в сверхпроводящую цепь резистора происходит затухание тока во времени t и возникает индукционное электрическое поле, направленное по току (правило Ленца). Индукционная разность потенциалов на концах резистора $U_i \approx -L_c di/dt = IR$; потенциал центра резистора $\Phi = U_i/2$ (здесь и далее относительно бесконечно удаленной точки, где потенциал полагается равным нулю). Вследствие взаимной индуктивности контура и экрана в точке заземления электрометра возникает потенциал Φ_n , пропорциональный току в катушке. Ясно, что Φ_n из-за вихревого характера токов I_n имеет разные значения (и знак) в различных участках экрана.

В начальный момент при включении в цепь металлический резистор проявляет себя "диэлектриком", и сверхпроводящие электроны катушки наносят "инерционный" удар. Происходит смещение всех N электронов проводимости резистора на длину свободного пробега l относительно атомных остатков в противоположном току направлении. В качестве меры смещения зарядов возьмем именно величину l , поскольку при изотропном рассеянии скорость направленного движения электрона проводимости в среднем полностью теряется при одном соударении [9]. В результате резистор поляризуется, потребляя на это часть запасенной в сверхпроводящей катушке энергии [10, 11]. Потенциальная энергия поляризации $W = EP/2$, где E – напряженность электрического поля, $P = qlN$ – дипольный момент, q – модуль заряда электрона. Следовательно, поляризационная разность потенциалов на концах резистора длиной d есть $U_p = Ed$; потенциал центра резистора $\Phi_p = U_p/2$. Фактически электрическое поле поляризации U_p/d "экранирует" индукционное поле U_i/d .

Так как потребляемая на поляризацию резистора энергия W ограничена K_m , то из соотношения $U_p P/2d = L_k I^2/2$ с учетом (1) получаем оценку

$$\Phi_p = \frac{L_k I^2 d}{2qlN} = \frac{\mu_0 \lambda b}{8\pi qalSn} I^2, \quad (2)$$

где $n = N/(Sd)$ – концентрация электронов проводимости в резисторе с площадью поперечного сечения S и длиной d .

Из (2) следует, что поляризационный потенциал Φ_p пропорционален квадрату тока I и длине b сверхпроводящего участка цепи, но не зависит от длины резистора d .

При температуре жидкого гелия вклад добавочного сопротивления перехода резистор–сверхпроводник (критическая температура ≈ 10 К) в создание разности потенциалов на концах резистора пренебрежимо мал [8].

Как только $q(U_p - IR) = 2q(\Phi_p - \Phi_i)$ станет меньше ширины энергетической щели сверхпроводника (≈ 3 мэВ), ток в контуре прекратится.

Таким образом, измеряемая в опытах [1–2] разность потенциалов между резистором и экраном есть $\bar{\Phi} = \bar{\Phi}_p - \bar{\Phi}_n$, где $\bar{\Phi}_p = \Phi_p - \Phi_i$ – потенциал центра резистора (точки присоединения сигнального провода), $\bar{\Phi}_n$ – потен-

циал точки заземления электрометра. Знак $\Phi_i = \Phi_r - \Phi_n$ не должен зависеть от направления тока в контуре для заданной конфигурации электрической схемы.

Проведем количественные оценки. Из параметров латунного резистора $R=82$ мкОм, $d=14$ мм и $S=0,1$ см² находим его удельную электропроводность $\sigma \approx 1,6 \cdot 10^5$ Ом⁻¹·см⁻¹. Концентрация электронов проводимости в латуни (Cu_{1-x}Zn_x) с атомной плотностью 8,65 г·см⁻³ при $x \approx 2$ по данным [12] есть $n=9,8 \cdot 10^{22}$ см⁻³. При температуре жидкого гелия средняя длина свободного пробега электрона проводимости $l = p_F \sigma / (q^2 n)$ определяется квазиимпульсом $p_F = \hbar (3\pi^2 n)^{1/3}$ на поверхности Ферми. Подстановка в (2) значений $\lambda \approx 38$ нм (для Nb и Pb) и $l \approx 10$ нм (для латуни) при $I=16$ А дает $\Phi_p \approx 4$ мВ и $\Phi_i \approx 0,65$ мВ. Разности потенциалов $\Phi_i \approx \Phi_r - \Phi_n \approx 3,3$ мВ (при $\Phi_n=0$) сопоставима с экспериментальной величиной. Энергия магнитного поля $L_c I^2 / 2 \approx 102$ мДж, кинетическая индуктивность $L_k \approx 41$ нГн, кинетическая энергия электронов сверхпроводящего участка цепи $K_m = L_k I^2 / 2 \approx 5,3$ мкДж.

Заметим, что из (2) при $l \ll p_F / n$ следует:

$$\Phi_p = \frac{q \mu_0 \lambda b}{8 \pi a S \sigma p_F} I^2,$$

т. е. по измерению $\Phi_i \approx \Phi_p$ можно определить фермиевский квазиимпульс электрона p_F в резисторе.

Итак, в опытах Эдвардса и др. [1, 2] квадратичное по току электрическое поле контура сверхпроводящая катушка-резистор обусловлено преобладанием электрического поля поляризации резистора над индукционным полем. В известном смысле эти опыты дополняют опыты Толмена и др. (см. [13]), в которых измерялся затухающий ток в замкнутой цепи, обусловленный движением электронов проводимости по инерции после остановки вращающейся несверхпроводящей катушки.

Автор благодарит С.А. Вырко и С.Ю. Лопатина за обсуждения работы.

1. Edwards W. F., Kenyon C. S., Lemon D. K. // Phys. Rev. 1976. Vol.D14. №4. P.922.
2. Lemon D. K., Edwards W. F., Kenyon C. S. // Phys. Lett. 1992. Vol.A162. №2. P.105.
3. Поклонский Н. А., Лопатин С. Ю. // Письма в ЖТФ. 1998. Т.24. №2. С.7.
4. Митянок В. В., Поклонский Н. А. // ЖТФ. 1993. Т.63. №1. С.189.
5. Караханова Х. М., Ковязин Л. М., Трофимов В. А. // УФН. 1990. Т.160. №3. С.145.
6. Ромер Р. // Физика за рубежом (сер. Б): Сб. статей М., 1984. С.79.
7. Фейнберг Е. Л. // УФН. 1997. Т.167. №4. С.155.
8. Шмидт Б. В. Введение в физику сверхпроводников. М., 1982.
9. Киреев П. С. Физика полупроводников. М., 1975.
10. Полевой В. Г. // Изв. вузов. Радиофиз. 1990. Т.33. №7. С.818.
11. Миллер М. А. // Изв. вузов. Радиофиз. 1986. Т.29. №9. С.991.
12. Физические величины: Справ. /Под ред. И.С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. М., 1991.
13. Цидильковский И. М. // УФН. 1975. Т.115. №2. С.321.

Поступила в редакцию 21.03.2000.

ИЗМЕНЕНИЕ ТОПОГРАФИИ ПОВЕРХНОСТИ КОБАЛЬТА, ИМПЛАНТИРОВАННОГО ИОНАМИ БОРА

Topography and phase structure of surface of cobalt implanted with boron ions were investigated with the help of the AFM method. The influence of sputtering on roughness of surface and formation of new phases on the surface was established.

В процессе ионной имплантации происходит существенное изменение геометрии мишени, обусловленное распылением. Обычно эффекты распыления изучают с помощью сканирующей электронной микроскопии, однако в последнее время все более широкое распространение получил метод атомно-силовой микроскопии (АСМ), позволяющий получать качественные изображения поверхности исследуемых материалов. Вопросы формирования изображения в атомно-силовом микроскопе и их интерпретации изложены в [1].

С помощью атомно-силового микроскопа можно также изучать твердость локальных областей поверхности материала. В работе [2] представлены результаты исследования покрытий в режиме фазового контраста, проведенные методом АСМ. Показана возможность оценки микромеханической неоднородности поверхности в “обстукивающем” режиме (tapping mode).

В данной работе приведены результаты исследования топографии и фазового состава поверхности поликристаллических образцов кобальта чистотой 99,98%, имплантированных ионами бора, полученные с помощью атомно-силового микроскопа НАНОТОП-203, использующего вольфрамовый зонд и систему детектирования на базе оптоволоконного интерферометра. Образцы имплантировались ионами бора с энергией 30 кэВ и дозой 10^{16} см⁻²; для предотвращения разогрева образцов плотность ионного тока не превышала 2,5 мкА/см².

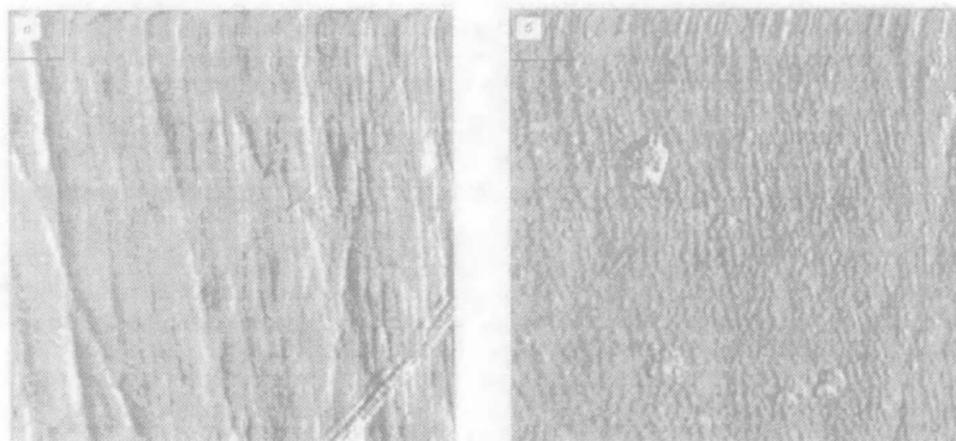


Рис. 1. Топография поверхности:
а – исходного образца (поле сканирования 20,3×20,3 мкм); б – образца, имплантированного ионами бора
(поле сканирования 25×25 мкм)

На рис.1 представлены АСМ-изображения поверхности исходного образца и образца, имплантированного ионами бора. На поверхности образца, имплантированного ионами бора, видны крупные включения округлой

формы микронных размеров и более мелкие наноразмерные включения. Высота самого крупного включения составляет порядка 400 нм, а его диаметр порядка 5 мкм. Средняя величина шероховатости поверхности для исходного образца составляет 240 нм, а для имплантированного ионами бора 150 нм. Это обусловлено тем, что процесс ионной имплантации сопровождается процессом распыления материала образца. В результате этого распыления происходит сглаживание полос, оставшихся после шлифовки.

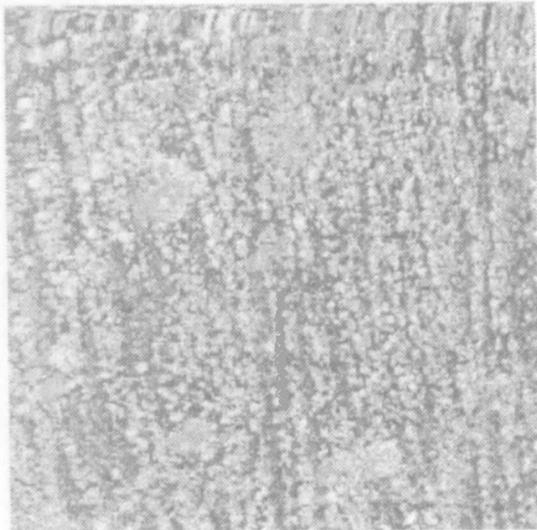


Рис. 2. Фазовое изображение поверхности образца, имплантированного ионами бора (поле сканирования 25×25 мкм)

АСМ-изображение поверхности в режиме фазового контраста приведено на рис.2. На поверхности образца, имплантированного ионами бора, можно наблюдать по меньшей мере три различных фазы. Мелким (наноразмерным) включениям на топографии поверхности (рис.1б) соответствуют наиболее светлые наноразмерные области на фазовом изображении (рис.2). Учитывая, что на фазовом изображении поверхности светлые области соответствуют более твердому (жесткому) материалу, а темные – более мягкому, можно предположить, что светлые области на фазовом изображении поверхности являются включениями боридных

фаз, образовавшимися в результате ионной имплантации. Более крупным (микронным) включениям на топографии поверхности соответствуют более темные области на фазовом изображении. С помощью Оже-спектроскопии установлено, что эти включения являются углеродсодержащими. Они могут образовываться в результате накопления и перераспределения углерода на поверхности образца в процессе ионной имплантации. Наиболее темные области на фазовом изображении соответствуют материалу исходного образца – кобальту.

Таким образом, АСМ-изображения позволяют говорить о структурно-фазовых нано- и микроизменениях в поверхностных слоях кобальта, имплантированного ионами бора. Эти изменения приводят к упрочнению поверхностных слоев кобальта, тем самым улучшая их механические и трибологические свойства [3].

1. Magonov S. N., Whangbo M.-H. Surface Analysis with STM and AFM. Weinheim, 1996.

2. Чижик С. А., Дубравин А. М., Ан Х.-С. // Зондовая микроскопия-2000. Материалы Всерос. совещ. 28 февраля – 2 марта 2000 г. Нижний Новгород, 2000. С.91.

3. Корнийчук М. Б., Анищик В. М. // Взаимодействие излучений с твердым телом: Материалы III междунар. науч. конф. 6 – 8 окт. 1999 г., Минск: В 2 ч. Мн., 1999. Ч.2. С.60.

Поступила в редакцию 21.04.2000.

БИПОРОГОВЫЕ ГРАФЫ

A graph G is called *bithreshold* if there exist threshold graphs $T_i = T_i(V, E)$, $i = 1, 2$, such that $E = E_1 \cup E_2$ and every clique of G is a clique of either T_1 or T_2 .

We obtain a characterization of split bithreshold graphs in terms of forbidden induced subgraphs.

Мы придерживаемся стандартной терминологии книги [1]. Граф G с множеством вершин $VG = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ называется *пороговым*, если существуют вещественные числа w_1, w_2, \dots, w_n и t такие, что множество всех $(0, 1)$ -решений неравенства $w_1x_1, w_2x_2, \dots, w_nx_n < t$ совпадает с множеством характеристических векторов независимых множеств графа G .

Теорема 1 (Хватал и Хаммер [2]). Граф является пороговым тогда и только тогда, когда он не содержит порожденных подграфов $2K_2, P_4$ и C_4 .

Пороговая размерность $t(G)$ графа G есть минимальное число (остовных) пороговых подграфов графа G , объединение которых есть G . Яннакис [6] доказал, что проблема распознавания " $t(G) \leq k$ " является *NP*-полной при любом $k > 3$. Граф G называется *2-пороговым*, если $t(G) < 2$. Сложность проблемы распознавания 2-пороговых графов неизвестна (см., например, [3, с.233]).

Теорема 2 (Хаммер, Махадев и Пелед [5]). Класс всех 2-пороговых графов не имеет конечной характеристики в терминах запрещенных порожденных подграфов.

В связи с исследованием 2-пороговых графов в работе [4] введено следующее определение. Граф называется *бипороговым*, если существуют пороговые графы $T_i = T_i(V, E)$, $i = 1, 2$ такие, что $E = E_1 \cup E_2$ и каждая клика графа G является кликой в T_1 и T_2 . (Кликкой графа называется любое множество вершин, порождающее полный граф.)

Граф G называется *расщепляемым*, если существует разбиение $VG=K \cup S$ на клику K (полная доля) и независимое множество S (пустая доля). Каждый пороговый граф является расщепляемым. Поэтому структуру произвольного графа G с $t(G)=2$ можно представить следующим образом. Пусть T_1 и T_2 – два пороговых графа и $EG=ET_1 \cup ET_2$, причем $VG=VT_1 \cup VT_2$. Разобьем VT_i на полную долю K^i и пустую долю S^i , $i=1, 2$.

Обозначим (рис. 1)

$$A = K^1 \cap K^2, \quad B = K^1 \cap S^2, \quad C = S^1 \cap K^2 \quad \text{и} \quad D = S^1 \cap S^2.$$

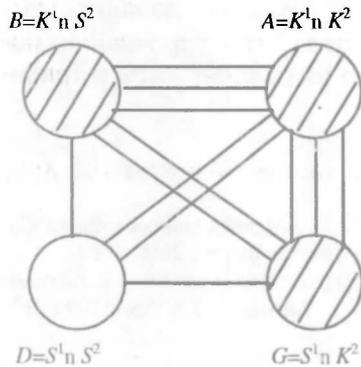


Рис. 1. Структура графа G с $t(G) = 2$

Ясно, что множества A, B и C являются кликами, а D – независимым множеством. Ребра между A и B , а также между A и C порождают полные двупольные графы. Подграфы, порожденные множествами BUD и CUD , являются пороговыми. Подграф, порожденный множеством BUC , является дополнительным к двудольному. Такие бипороговые графы охарактеризованы в работе [5], где поставлена задача характеристики структурных частей бипорогового графа. Наконец, подграф, порожденный множеством BUC , является расщепленным.

Авторы упомянутой работы отмечают, что никакая структурная характеристика бипороговых графов не известна.

Из приведенного строения 2-пороговых графов ясно, что открытой остается в первую очередь проблема характеристики расщепляемых бипороговых графов. Здесь мы дадим такую характеристику.

Теорема 3. Расщепляемый граф является бипороговым тогда и только тогда, когда он не содержит порожденных подграфов G_1, G_2, G_3 , показанных на рис. 2.

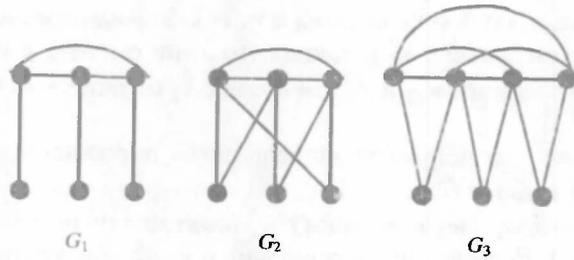


Рис. 2. Запрещенные порожденные подграфы для расщепляемых бипороговых графов

Доказательство.

Необходимость вытекает из того, что каждый из графов G_1, G_2, G_3 не является бипороговым.

Достаточность.

Пусть G – расщепляемый граф с полной долей K и пустой долей S . Предположим, что G не содержит порожденных подграфов G_1, G_2, G_3 .

Вершины $u, v \in S$ назовем *сравнимыми*, если $N(u) \subseteq N(v)$ или $N(v) \subseteq N(u)$. Для графа G построим *граф несравнимости* $C(G)$ с множеством вершин S , в котором две различные вершины смежны тогда и только тогда, когда они не являются сравнимыми в G .

Пусть граф $C(G)$ является двудольным, и $A_1 \cup A_2$ – произвольное разбиение на доли. Покажем, что граф $T_i = G(K \cup A_i)$ является пороговым. Предположим, что T_i содержит четыре попарно различные вершины u, v, w, x такие, что u смежна с v, w смежна с x, v не смежна с w и u не смежна с x . Так как A_i – независимое множество, то $\{u, v\} \not\subseteq A_i$. Без ограничения общности будем считать, что $u \in K$. Тогда $x \in A_i, w \in K$ и $v \in A_i$. Следовательно, u смежна с w и x не смежна с v . Ясно, что вершины v и x не сравнимы и поэтому смежны в $C(G)$. Получаем противоречие с тем, что v и x принадлежат одной доле двудольного графа $C(G)$. По теореме, граф T_i является пороговым. Ясно, что $EG = E T_1 \cup E T_2$ и каждая клика графа G является кликой в T_1 или T_2 .

Пусть теперь граф $C(G)$ не является двудольным. Тогда G содержит порожденный нечетный простой цикл $C = (v_0, v_1, \dots, v_{2k})$, $k > 1$. Покажем, что $k=1$. Каждое ребро xy графа $C(G)$ соответствует двум сравнимым вершинам $x, y \in S$. Если $N(x) \subset N(y)$, то выберем ориентацию \overrightarrow{xy} ребра xy . В случае $N(x) = N(y)$ заменим ребро xy на две дуги \overrightarrow{xy} и \overleftarrow{xy} .

В орграфе \bar{C} , полученном из C указанной ориентации дуг, не существует пары дуг вида $\overleftarrow{v_i v_j}$ и $\overrightarrow{v_j v_i}$. Действительно, при $i=k$ имеем $N(v_i) = N(v_j)$. Так как вершина v_j не сравнима с вершинами v_{i-1} (индексы вычисляются по $\text{mod}(2k+1)$), то v_i также не сравнима с этими вершинами. Поскольку цикл C является порожденным, то $|\bar{C}| = 4$ – противоречие.

Пусть $i \neq k$. Тогда найдутся соседние (по циклу C) вершины v_i и v_{i+1} такие, что \bar{C} содержит дуги $\overleftarrow{v_i v_j}$ и $\overrightarrow{v_j v_{i+1}}$. Тогда $N(v_i) \subset N(v_j) \subset N(v_{i+1})$ – противоречие с тем, что вершины v_i и v_{i+1} не сравнимы. Полученное противоре-

чие показывает, что в \bar{C} каждая вершина является *источником* (т.е. все инцидентные ей дуги – исходящие), либо *стоком* (все инцидентные ей дуги – входящие).

Пусть $k > 2$. Без ограничения общности можно считать, что вершина v_0 является источником. Тогда вершины $v_1, v_3, \dots, v_{2k-1}$ являются стоками, а вершины v_2 и v_{2k} – источниками. Это невозможно, т.к. в C есть только одна из дуг $\overline{v_1 v_{2k}}$ $\overline{v_{2k} v_1}$. Следовательно, $k=1$.

Итак, $C=(v_0, v_1, v_2)$. Так как v_0 не сравнима с v_1 и v_2 , то существуют вершины w_1 и w_2 такие, что w_i смежна с v_0 и не смежна с $v_i, i=1, 2$. Аналогично, существуют вершины x_0 и x_2 , смежные с v_1 и такие, что x_i не смежна с $v_i, i \in \{0, 2\}$. Наконец, существуют вершины y_0 и y_1 , смежные с v_2 и такие, что y_i не смежна с $v_i, i=0, 1$.

Если $w_1 = w_2, x_0 = x_2$ и $y_0 = y_1$, то получаем запрещенный порожденный подграф G_1 , что противоречит выбору G .

Поэтому можно считать, что $w_1 \neq w_2$ и вершина w_1 (соответственно w_2) смежна с v_2 (соответственно v_1). Если вершина x_0 смежна с v_2 , то множество $\{v_0, v_1, v_2, w_1, w_2, x_0\}$ порождает подграф G_2 – противоречие. Поэтому x_0 не смежна с v_1 . Аналогично, y_0 не смежна с v_1 . Тогда множество $\{v_0, v_1, v_2, w_1, w_2, x_0, y_0\}$ порождает подграф G_3 – противоречие. Теорема доказана.

Из доказанной теоремы вытекает полиномиальный алгоритм распознавания расщепляемых бипороговых графов.

1. Харри Ф. Теория графов. М., 1973.
2. Chvatal V., Hammer P.L. // Ann. Discr. Math. 1(1977). P. 145.
3. Golombic M. Ch. Algorithmic graph theory and perfect graphs. New York, 1980.
4. Hammer P.L., Mahadev N.V.R. // SIAM J. Alg. Discr. Meth. 5(1985). P. 497.
5. Hammer P.L., Mahadev N.V.R., Peled U.N. // Discr. Meth. 119 (1993). P. 79.
6. Yannakakis M. // SIAM J. Alg. Discr. Meth. 3(1982) P.351.

Поступила в редакцию 01.09.98.

УДК 517.925.6

И.В.МАТАТОВА, В.А.ПРОКАШЕВА

О ПОДВИЖНЫХ ОСОБЕННОСТЯХ НЕАВТОНОМНЫХ КУБИЧЕСКИХ СИСТЕМ ДВУХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ СПЕЦИАЛЬНОГО ВИДА

The conditions of the uniqueness of movable singularities for a not autonomic cubic system of special variety have been obtained. The classes of functions expressing the solutions of corresponding P-type systems have been established.

Изучению кубических систем двух дифференциальных уравнений на предмет однозначности подвижных особенностей посвящены работы [1–5]. В [4] получена теорема: «Если система $x = P_3(z, x, y), y = Q_3(z, x, y)$ (P_3, Q_3 – полиномы третьей степени по x, y с голоморфными по z коэффициентами) является системой P-типа, то: 1) либо она с помощью линейных преобразований искомых функций приводится к виду, не содержащему кубов искомых функций в обоих уравнениях. 2) либо приводится к одной из систем

$$\begin{cases} x = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 y + \alpha_4 xy + \alpha_5 y^2 + \alpha_6 y^3, \\ y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 y + \beta_3 y^2; \end{cases} \quad (B_1)$$

$$\begin{cases} x = a_0 + a_1 x + a_2 y + a_3 x^2, \\ y = b_0 + b_1 x + b_2 y + b_3 x^2 + b_4 xy + b_5 x^3, \end{cases} \quad (B_2)$$

когда упрощающие линейные преобразования не действуют». В работе [5] кратко изложена методика исследования подвижных особенностей систем (B_1) , (B_2) . Однако коэффициентные условия однозначности подвижных особых точек для указанных систем не получены. Целью настоящей статьи является нахождение условий принадлежности систем (B_1) , (B_2) множеству P , а также определение классов функций, через которые выражаются решения соответствующих систем P -типа.

Рассмотрим более подробно систему (B_1) . При $\beta_1(z) \neq 0$ из второго уравнения имеем

$$x = \frac{y - \beta_0 - \beta_2 y - \beta_3 y^2}{\beta_1}. \quad (1)$$

Исключая из (B_1) переменную $x=x(z)$, получим д. у. второго порядка

$$\begin{aligned} y = & [\alpha_1 + \beta_2 + \frac{\beta_1}{\rho_1} + (\alpha_4 + 2\beta_3)y]y + (\alpha_0\beta_1 - \alpha_4\beta_5)y^3 + \\ & + (\alpha_5\beta_1 - \alpha_1\beta_5 - \alpha_4\beta_2 + \beta_5 - \frac{\beta_1\beta_2}{\rho_1})y^2 + (\alpha_2\beta_1 - \alpha_1\beta_2 + \beta_2 - \alpha_4\beta_0 - \\ & - \frac{\beta_1\beta_2}{\rho_1})y + \alpha_0\beta_1 - \alpha_1\beta_0 + \beta_0 - \frac{\beta_0\beta_1}{\rho_1}. \end{aligned} \quad (2)$$

Вводя новые обозначения коэффициентов

$$(A = \alpha_1 + 2\beta_2 + \frac{\beta_1}{\rho_1}, B = \alpha_0\beta_1 - \alpha_4\beta_5, \dots, F = \alpha_0\beta_1 - \alpha_1\beta_0 + \beta_0 - \frac{\beta_0\beta_1}{\rho_1}), \text{ д. у. (2) бо-}$$

лее кратко запишется так

$$y = [A(z)y + B(z)]y + C(z)y^3 + D(z)y^2 + E(z)y + F(z). \quad (2.1)$$

Если уравнение (2.1) свободно от многозначных подвижных особых точек, то необходимо, чтобы коэффициенты $A(z)$ и $C(z)$ удовлетворяли одному из следующих условий:

1) $A=C=0$; 2) $A=-2, C=0$; 3) $A=-3, C=-1$; 4) $A=-1, C=1$; 5) $A=0, C=2$ [6].

Далее рассматривается каждый из этих случаев отдельно [6], что позволяет получить условия однозначности подвижных особенностей для $x=x(z)$. Д. у. (2.1) охватывает первые десять уравнений из списка Пенлеве – Гамбье [6]. Среди них имеются уравнения, решения которых выражаются через элементарные и эллиптические функции, а также первое и второе уравнения Пенлеве. Так как компонента $y=y(z)$ рациональным образом зависит от x, x (это следует из формулы (3)), то условия однозначности подвижных особенностей для функции $x=x(z)$ обеспечивают это свойство и для функции $y=y(z)$.

Пусть $\beta_1(z) = 0$. При этом условии (B_1) превращается в вырожденную систему

$$\begin{cases} x = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 y + \alpha_4 xy + \alpha_5 y^2 + \alpha_9 y^3, \\ y = \beta_0 + \beta_2 y + \beta_3 y^2. \end{cases} \quad (\tilde{B})$$

Второе уравнение этой системы является уравнением Риккати. С помощью линейного преобразования искомой функции его можно привести к виду $y = -y^2 + b(z)$ (обозначение зависимой переменной оставили прежним), где функция $b(z)$ определенным образом выражается через $\beta_0, \beta_2, \beta_3$. Известно [7], что для решений д. у. Риккати точка $z_0 \in D$ (D – область голоморфности коэффициентов) может быть: 1) либо точкой голоморфности, 2) либо полюсом первого порядка. Соответствующие разложения в ряды функции $y=y(z)$ таковы:

$$1) y = b_0 + b_1(z - z_0) + \dots, |z - z_0| < R_1, \quad (5)$$

$$2) y = \frac{1}{z - z_0} + c_1(z - z_0) + \dots, 0 < |z - z_0| < R_2, \quad (6)$$

причем коэффициенты b_i, c_i выражаются через $\beta_0, \beta_2, \beta_3$. Подставляя ряд (5) в первое уравнение системы (B_1) , получим линейное уравнение первого порядка $x = A_0(z, z_0) + A_1(z, z_0)x$ с голоморфными в окрестности z_0 коэффициентами. По теореме Коши [7], $x=x(z)$ – голоморфная функция в окрестности z_0 . Подставим теперь в первое уравнение системы (B_1) вместо y ряд Лорана [6]. Обозначим через $\tilde{\alpha}_0, \dots, \tilde{\alpha}_9$ коэффициенты первого уравнения системы (B_1) после линейной замены функции $y=y(z)$. Разлагая их в степенные ряды в окрестности z_0 , после упрощений будем иметь линейное д. у. вида $x' = B_0(z, z_0) + B_1(z, z_0)x$, причем $B_0 = \frac{\tilde{\alpha}_4(z_0)}{z - z_0} + \alpha_1(z_0) + \alpha_4(z_0) + \dots$ ($z=z_0$ – полюс первого порядка), $B_1 = \frac{\tilde{\alpha}_9(z_0)}{(z - z_0)^3} + \frac{\tilde{\alpha}_5(z_0) + \tilde{\alpha}_9(z_0)}{(z - z_0)^2} + \dots$ ($z = z_0$ – полюс третьего порядка). Используя формулу для общего решения линейного д. у. первого порядка, получим следующее утверждение.

Теорема 1. Для того чтобы решения вырожденной системы (B_1) имели в области голоморфности коэффициентов полярные подвижные особенности, необходимо, чтобы

$$\frac{\alpha_4(z)}{\beta_5(z)} = n, \text{ где } n - \text{целое число.}$$

Замечание 1 (к теореме 1). Вырожденная система (\tilde{B}_1) в точке голоморфности коэффициентов может иметь или полярную подвижную особенность, или логарифмическую (условие $\frac{\alpha_4(z)}{\beta_5(z)} = n, n \in \mathbb{Z}$, предполагается выполненным).

Замечание 2. По поводу системы (B_2) заметим следующее. Если в системе (B_1) заменить x на y (а y на x) и ввести новые обозначения, то получится система (B_2) . Поэтому отдельно ее рассматривать нет необходимости. Это касается и вырожденной системы (\tilde{B}_2) , которая получается из (B_2) при $a_2(z) \equiv 0$.

Таким образом, все изложенное выше позволяет сформулировать следующий результат.

Теорема 2. Если невырожденные системы д. у. (B_1) и (B_2) являются системами P -типа, то их решения выражаются: 1) либо через элементарные функции, 2) либо через эллиптические функции, 3) либо через функции-решения линейных д. у., 4) либо через функции-решения первого или второго уравнений Пенлеве.

1. Bureau F. J. // Bull. cl. Sci. Acad. roy. Belg. Vol. 67. № 9. P. 512.

2. Прокашева В. А. // Докл. АН БССР. 1984. Т. 28. № 10. С. 869.

3. Прокашева В. А., Удот С. Н. // Докл. АН БССР. 1985. Т. 29. № 1. С. 23

4. Мататов В. И., Михайловская Л. В. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1996. № 1. С. 39.

5. Он же // Дифференц. уравнения. 1998. Т. 34. № 2. С. 216.

6. Айнс Э. Л. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Харьков, 1939. С. 449.

7. Голубев В. В. Лекции по аналитической теории дифференциальных уравнений. М.: Л., 1950.

Поступила в редакцию 22.12.98.

УДК 517.925.6

Е. Я. КРИЧАВЕЦ, В. И. МАТАТОВ

О ПОДВИЖНЫХ ОСОБЕННОСТЯХ СИСТЕМЫ ДВУХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С РАЦИОНАЛЬНЫМИ ПРАВЫМИ ЧАСТЯМИ СПЕЦИАЛЬНОГО ВИДА

The necessary and sufficient conditions for the uniqueness of the movable singularities at the solutions of nondegenerate system are under consideration. Construction algorithm of these conditions is found by Painleve's method.

В работах [1–4] исследованы системы двух дифференциальных уравнений, решения которых не имеют перемещающихся критических точек. Проблема однозначности подвижных особенностей для системы вида

$$x' = \frac{P(x, y)}{Q(x, y)}, \quad y' = \frac{R(x, y)}{Q(x, y)}, \quad \text{где } P, Q, R - \text{однородные полиномы по } x, y,$$

изучена в [1]. Аналогичная задача решена в статье [2] для системы двух уравнений с рациональными правыми частями специального вида при наличии условий Гамильтона. В [3] найдены необходимые и достаточные условия, при выполнении которых решения системы “перекрестного” вида не содержат подвижных многозначных особенностей, а также установлены классы функций, через которые выражаются решения соответствующих систем. Неавтономные системы уравнений с дробно-линейными правыми частями рассмотрены в [4].

Предметом исследования данной статьи является следующая невырожденная система* двух дифференциальных уравнений специального вида:

$$\begin{cases} x' = \frac{\alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 y}{\beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 y}, \\ y' = \frac{\gamma_0 + \gamma_1 x + \gamma_2 y + \gamma_3 x^2 + \gamma_4 xy + \gamma_5 y^2}{\delta_0 + \delta_1 x + \delta_2 y}, \end{cases} \quad (1)$$

где $' = \frac{d}{dz}$, $z \in D$, $D \subset \mathbb{C}$, $(x, y) \in \hat{\mathbb{C}}^2$, $\hat{\mathbb{C}} = \mathbb{C} \cup \{\infty\}$. Коэффициенты системы $\alpha_0 = \alpha_0(z), \dots, \delta_n = \delta_n(z)$ – голоморфные в области D функции, причем

$$|\beta_0| + |\beta_1| + |\beta_2| \neq 0, \quad |\delta_0| + |\delta_1| + |\delta_2| \neq 0. \quad (2)$$

Из первого уравнения системы имеем

$$y = R(z, x, x'), \quad (3)$$

где R — рациональная по x, x' и голоморфная по z функция. Исключая из (1) переменную $y = y(z)$, получим уравнение вида:

$$x' = \frac{A_4(z, x)x^4 + \dots + A_1(z, x)x + A_0(z, x)}{d_0(z, x)(d_1(z, x) + d_2(z, x)x)}, \quad (4)$$

где $d_0(z, x) = \alpha_2(\beta_0 + \beta_1 x) - \beta_2(\alpha_0 + \alpha_1 x)$, $d_1(z, x) = -\alpha_2(\delta_0 + \delta_1 x) + \delta_2(\alpha_0 + \alpha_1 x)$, $d_2(z, x) = \beta_2(\delta_0 + \delta_1 x) - \delta_2(\beta_0 + \beta_1 x)$, $A_4(z, x) = \beta_1(z)\beta_2(z)d_2(z, x)$, функции $A_3(z, x), \dots, A_0(z, x)$ также являются комбинациями исходных коэффициентов.

Найдем алгоритм получения необходимых и достаточных условий однозначности подвижных особых точек в решениях системы (1) в случае, когда она приводится к уравнению (4). Установим также классы функций, через которые выражаются решения соответствующих систем P -типа (т.е. систем, подвижные особенности которых – полюсы).

Известно [5], что если (4) свободно от многозначных подвижных особых точек, то правая часть уравнения есть полином по x степени не выше второй. Выполнение этого дает:

$$1) \beta_1 = \delta_2 = 0 \text{ **, когда } d_1 \neq 0 \text{ (при этом } \beta_2 \neq 0) \text{ и } d_0 \neq 0,$$

$$2) \beta_0 \delta_2 - \beta_2 \delta_0 = 0, \beta_1 \delta_2 - \beta_2 \delta_1 = 0, \text{ когда } d_1 \neq 0 \text{ и } d_0 \neq 0.$$

Из условий 2) следует, что если $\beta_2 = 0$, то $\delta_2 = 0$ (и наоборот), это вытекает из ограничений (2). В случае 2) неравенство нулю коэффициента β_2 влечет необходимость выполнения следующих условий:

$$\beta_1^3 \gamma_0 - \beta_0 \beta_2^2 \gamma_2 + \beta_0 \beta_2 \gamma_3 - \alpha_2 \beta_0 \beta_1 \delta_1 + \alpha_0 \beta_1 \beta_2 \delta_2 = 0,$$

$$\beta_2^3 \gamma_1 - \beta_1 \beta_2^2 \gamma_2 - \beta_0 \beta_2^2 \gamma_4 + 2\beta_0 \beta_1 \beta_2 \gamma_5 - \alpha_1 \beta_1 \delta_1 + \alpha_1 \beta_1 \beta_2 \delta_2 = 0,$$

$$\beta_2^2 \gamma_3 - \beta_1 \beta_2 \gamma_4 + \beta_1^2 \gamma_5 = 0.$$

При указанных условиях уравнение (4) примет вид

$$x' = \frac{B_2(z, x)x^2 + B_1(z, x)x + B_0(z, x)}{d_0(z, x)}, \quad (5)$$

* Будем говорить, что система невырождена, если каждое ее уравнение содержит две искомыми функции.

** Здесь равенство (неравенство) нулю коэффициентов системы (1) следует рассматривать как тождественное.

где функции $B_i(z, x)$ ($i=0, 1, 2$) выражаются через коэффициенты системы (1) определенным образом. Для уравнения типа (5) Пенлеве и Гамбье были указаны 50 видов уравнений, решения которых не имеют перемещающихся критических точек [6]. Сравнение уравнения (5) с этими каноническими уравнениями дает необходимые и достаточные условия того, что компонента $x(z)$, а в силу (3), и компонента $y(z)$ в качестве подвижных особенностей будут иметь только однозначные полюсы.

В случае 1), при наличии определенных требований к коэффициентам системы (1) и их производным, уравнение (5) сравнимо с уравнениями I, V, XI, XII (при $\alpha = \beta = 0$), XIII (при $\alpha = \gamma = 0$), XIV, XVII, XXXII [6]. Укажем необходимые и достаточные условия, при которых (5) сравнимо с третьим уравнением Пенлеве (P_3). Имеем

$$\beta_2^2 \gamma_0 - \beta_0 \beta_2 \gamma_2 + \beta_2^2 \gamma_5 - \alpha_2 \beta_0 \delta_1 + \alpha_0 \beta_2 \delta_1 + \beta_2 \delta_0 \beta_0 - \beta_0 \delta_0 \beta_2 = 0,$$

$$\gamma_3 = 0, \beta_2^2 \gamma_1 - \beta_0 \beta_2 \gamma_4 + \beta_2 \delta_1 \beta_0 - \beta_0 \delta_1 \beta_2 = 0.$$

Если $\alpha_2 \beta_0 - \alpha_0 \beta_2 \neq 0$ и $\delta_0 = 0$, то $\alpha_1 = 0$, $\beta_2 \gamma_2 - 2(\beta_0 \gamma_5 - \alpha_2 \delta_1) = 0$,

$$\frac{\alpha_2 \beta_0 \beta_2 \gamma_4 - \alpha_0 \beta_2^2 \gamma_4 + \beta_2^2 \delta_1 \alpha_0 - \beta_0 \beta_2 \delta_1 \alpha_2 - \alpha_2 \beta_2 \delta_1 \beta_0 + 2\alpha_2 \beta_0 \delta_1 \beta_2 - \alpha_0 \beta_2 \delta_1 \beta_2}{\beta_2 \delta_1 (\alpha_2 \beta_0 - \alpha_0 \beta_2)} = \frac{1}{z},$$

$$\frac{\beta}{z} = \frac{\alpha_2^2 \beta_0 \beta_2 \gamma_4 - \alpha_0 \alpha_2 \beta_2^2 \gamma_4 + \alpha_2 \beta_2^2 \delta_1 \alpha_0 - \alpha_0 \beta_2^2 \delta_1 \alpha_2 - \alpha_2^2 \beta_2 \delta_1 \beta_0 + \alpha_2^2 \beta_0 \delta_1 \beta_2}{\beta_2^2 \delta_1 (\alpha_2 \beta_0 - \alpha_0 \beta_2)},$$

$$\delta = \frac{\alpha_2 \beta_0 \gamma_3 - \alpha_0 \beta_2 \gamma_3 - \alpha_2^2 \delta_1}{\beta_2^2 \delta_1}.$$

Если $\alpha_2 \beta_0 - \alpha_0 \beta_2 = 0$ и $\delta_0 = 0$, то $\beta_2 \gamma_2 - 2\beta_0 \gamma_5 + \alpha_2 \delta_1 = 0$,

$$\frac{\alpha_1 \beta_2 \gamma_4 - \beta_2 \delta_1 \alpha_1 + \alpha_1 \delta_1 \beta_2}{\alpha_1 \beta_2 \delta_1} = \frac{1}{z}, \frac{\beta}{z} = \frac{\alpha_1 \alpha_2 \gamma_4 - \alpha_1^2 \gamma_5 - \alpha_2 \delta_1 \alpha_1 + \alpha_1 \delta_1 \alpha_2}{\alpha_1 \beta_2 \delta_1}, \delta = -\frac{\alpha_2^2}{\beta_2^2}.$$

Если $\alpha_0 = \alpha_2 = 0$ и $\delta_0 \neq 0$, то $\gamma_4 = \gamma_5 = \delta_1 = 0$, $\frac{\alpha_1 \beta_2 \gamma_3 - \beta_2 \delta_0 \alpha_1 + \alpha_1 \delta_0 \beta_2}{\alpha_1 \beta_2 \delta_0} = \frac{1}{z}$,

$$\beta = \delta = 0.$$

В случае 2), когда $\beta_2 \neq 0$, существует возможность сведения уравнения (5) к следующим каноническим уравнениям: I, XI, XIII (при $\alpha = \beta = \gamma = \delta = 0$), XIV, XVII, XXXII. Когда $\beta_2 = 0$, то дифференциальное уравнение (5) сравнимо с уравнениями I-V, XI, XII (при $\alpha = \beta = 0$), XIII (при $\alpha = \gamma = 0$), XIV. В частности, уравнение P_1 получается тогда и только тогда, когда $\gamma_4 = \delta_1 = 0$, $\alpha_2 \gamma_3 - 6\beta_0 \delta_0 = 0$,

$$\alpha_2 \beta_0 \gamma_1 + \alpha_1^2 \delta_0 + \beta_0 \delta_0 \alpha_0 - \alpha_1 \delta_0 \beta_0 = 0, \alpha_2 \beta_0 \gamma_2 + \alpha_1 \alpha_2 \delta_0 + \beta_0 \delta_0 \alpha_2 - \alpha_0 \delta_0 \beta_0 = 0,$$

$$\frac{\alpha_2 \beta_0 \gamma_0 + \alpha_0 \alpha_1 \delta_0 + \beta_0 \delta_0 \alpha_0 - \alpha_0 \delta_0 \beta_0}{\beta_0^2 \delta_0} = z.$$

Из вышеизложенного вытекает следующая

Теорема. Если невырожденная система (1) – система P -типа, то ее решения выражаются: либо через элементарные функции, либо через эллиптические, либо через функции-решения линейных уравнений, либо через функции-решения первого или третьего (при $\alpha = \gamma = 0$) уравнений Пенлеве.

1. Garnier R. // Ann. Scient. Ecole norm. super. 1960. T.77. № 2. P. 123.
2. Мататов В.И. // Дифференц. уравнения. 1973. Т. 9. № 11. С. 2092.
3. Яблонский А.И. // Там же. 1967. Т. 3. № 3. С. 468.

4. Степанова Т.С. // Еругинские чтения – V: Тез. докл. междунар. мат. конф. Могилев, 1998. С. 27.
5. Голубев В.В. Лекции по аналитической теории дифференциальных уравнений. М.: МЛ, 1950.
6. Айнс Э.Л. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Харьков, 1939.

УДК 512. 542

АЛЬ-ДАБАБСЕХ АВНИ ФАЙЕЗ (Иордания)

О ПОДФОРМАЦИИ ФРАТТИНЫ ФОРМАЦИЙ КОНЕЧНЫХ n -АРНЫХ ГРУПП

It is proved that if \mathcal{F} is a formation of finite n -ary groups and $G \in \mathcal{F}$ then $G/\text{soc}(G)$ belongs to every maximal subformation of \mathcal{F} where $\text{soc}(G)$ is the soc(G) congruence on G (i. e. $\text{soc}(G)$ is the product of all minimal congruence of G).

Все рассматриваемые нами n -арные группы предполагаются конечными. Используется терминология, принятая в [1].

Напомним, что класс n -арных групп \mathcal{F} называется формацией [2], если выполняются следующие условия:

1) для любой n -арной группы $G \in \mathcal{F}$ и для любой конгруэнции π на G фактор-группа $G/\pi \in \mathcal{F}$,

2) из $H/\pi_1 \in \mathcal{F}$, $H/\pi_2 \in \mathcal{F}$ всегда следует $H/\pi_1 \cap \pi_2 \in \mathcal{F}$.

В дальнейшем τ обозначает некоторый подсистемный функтор на классе конечных n -арных групп (см. [3], с. 34). Формация n -арных групп \mathcal{F} называется τ -замкнутой, если $\tau(G) \subset \mathcal{F}$ для любой n -арной группы $G \in \mathcal{F}$. Пересечение всех тех τ -замкнутых формаций n -арных групп, которые содержат данную совокупность n -арных групп \mathcal{X} обозначается через $\tau \text{form } \mathcal{X}$. Такая формация называется τ -замкнутой формацией, порожденной \mathcal{X} .

Пусть \mathcal{M} и \mathcal{F} – τ -замкнутые формации n -арных групп, где $\mathcal{M} \subseteq \mathcal{F}$. Тогда \mathcal{M} называют максимальной τ -замкнутой подформацией в \mathcal{F} , если $\mathcal{M} \subset \mathcal{F}$ и не существует такой τ -замкнутой формации ξ , что $\mathcal{M} \subset \xi \subset \mathcal{F}$. Пересечение всех максимальных τ -замкнутых подформаций формации \mathcal{F} обозначается через $\Phi_\tau(\mathcal{F})$, и такая формация называется τ -подформацией Фраттини формации \mathcal{F} ($\Phi_\tau(\mathcal{F}) = \mathcal{F}$, если в \mathcal{F} нет максимальных τ -замкнутых подформаций).

Целью данной статьи является изучение τ -подформаций Фраттини формаций n -арных групп.

Напомним, что символом $\text{soc}(G)$ обозначается произведение всех минимальных конгруэнций n -арной группы G [2].

Теорема 1. Пусть G – неединичная n -арная группа, принадлежащая τ -замкнутой формации \mathcal{F} . Тогда

$$G/\text{soc}(G) \in \Phi_\tau(\mathcal{F}).$$

Следствие 1 (Ковач и Ньюмен [4]). Монолит конечной монолитической группы является вербальной подгруппой.

Следствие 2 (Херцфелд [5]). Пусть группа G принадлежит формации групп \mathcal{F} . Тогда $G/\text{soc}(G)$ принадлежит каждой максимальной подформации из \mathcal{F} .

Следствие 3 (Скиба [6]). Пусть G – неединичная группа, принадлежащая τ -замкнутой формации групп \mathcal{F} . Тогда $G/\text{soc}(G) \in \Phi_\tau(\mathcal{F})$.

Следствие 4. Пусть n -арная группа G является прямым произведением некоторого числа простых n -арных групп. Тогда $\Phi(\text{form } G) = (1)$ – класс одноэлементных n -арных групп.

Дадим теперь общую характеристику для τ -подформаций Фраттини.

Пусть \mathcal{F} – τ -замкнутая формация n -арных групп, $G \in \mathcal{F}$. Будем говорить, следуя [3], что G является τ -необразующей для \mathcal{F} n -арной группой, если всегда из $\mathcal{F} = \tau\text{form}(\mathcal{X} \cup \{G\})$ следует, что $\mathcal{F} = \tau\text{form}\mathcal{X}$.

Теорема 2. Пусть $\mathcal{F} \neq (1)$ – непустая τ -замкнутая формация n -арных групп. Тогда $\Phi_{\tau}(\mathcal{F})$ состоит из всех τ -необразующих для \mathcal{F} n -арных групп.

Следствие 5 (Скиба [3], Херцфельд [5]). Пусть \mathcal{F} – формация групп. Тогда ее подформация Фраттини $\Phi(\mathcal{F})$ состоит из всех необразующих для \mathcal{F} групп.

Следствие 6 (Скиба [3]). Пусть \mathcal{F} – τ -замкнутая формация. Тогда $\Phi_{\tau}(\mathcal{F})$ состоит из всех τ -необразующих для \mathcal{F} групп.

Теорема 3. Пусть $\mathcal{F} \neq (1)$ – непустая τ -замкнутая формация n -арных групп. Тогда если \mathcal{M} – τ -замкнутая подформация формации \mathcal{F} , то $\Phi_{\tau}(\mathcal{M}) \subseteq \Phi_{\tau}(\mathcal{F})$.

Следствие 7 (Скиба [3]). Пусть $\mathcal{F} \neq (1)$ – τ -замкнутая формация. Тогда если \mathcal{M} – τ -замкнутая подформация формации \mathcal{F} , то $\Phi_{\tau}(\mathcal{M}) \subseteq \Phi_{\tau}(\mathcal{F})$.

Отметим, что при доказательстве теорем 2, 3 мы использовали тот установленный нами факт, что решетка всех τ -замкнутых формаций n -арных групп модулярна.

1. Русаков С. А. Алгебраические n -арные системы. Мн., 1992.
2. Шеметков Л. А., Скиба А. Н. Формации алгебраических систем. М., 1989.
3. Скиба А. Н. Алгебра формаций. Мн., 1997.
4. Kovacs L. C., Newman M. F // Proc. Cambridge Phil. Soc. 64(1966). P.347.
5. Herzfeld U. C. // Boll. Un. Mat. Ital. B(7). 1988. P.601.
6. Скиба А. Н. // Докл. АН БССР. 1979. Т. 23. №12. С.1073.

Поступила в редакцию 30.09.99.

УДК 591.8

В.М.КОТОВ

ОДНА ЗАДАЧА ТЕОРИИ РАСПИСАНИЙ

We consider the parallel machine scheduling problem with release and delivery time. For this problem we present a greedy algorithm which complexity is $O(n \cdot \log_2 n)$ and worst-case performance is 2.

Пусть имеется m одинаковых станков, на которых необходимо обработать n деталей. Для каждой детали i ($i=1, \dots, n$) определены три параметра:

$r(i)$ – время задержки,

$p(i)$ – время обработки детали на станке,

$d(i)$ – время доставки детали на склад после обработки.

Здесь $r(i)$ означает самый ранний момент времени, когда может быть начата обработка детали i на станке. При этом станок не может обрабатывать несколько деталей одновременно. Задача состоит в определении такой последовательности обработки, при которой все детали окажутся на складе через минимальное время.

Известно, что рассматриваемая задача является NP -трудной [1] даже в случае, когда время доставки равно нулю, а количество станков больше 1.

Поэтому определенным интересом представляет разработка эффективного приближенного алгоритма решения поставленной задачи. Так, в работе [2] был предложен алгоритм градиентного типа для случая, когда все значения $r(i)$ равны нулю, и доказано, что гарантированная оценка предложенного алгоритма равна $2-1/m$. Им также была поставлена проблема разработки алгоритма с произвольными значениями $r(i)$.

Для описания алгоритма введем следующие обозначения. Через T^* будем обозначать значение оптимального решения задачи, т.е. минимальное время, через которое все детали будут обработаны и доставлены на склад. Через $T(A)$ обозначим значение решения, построенного алгоритмом A .

Далее будет предложен алгоритм A градиентного типа и установлено, что для величин T^* и $T(A)$ справедливо соотношение $T(A) < 2 \cdot T^*$.

Не умаляя общности, будем считать, что $r(i) < r(i+1)$ для $i=1, \dots, n-1$. Действительно, этого можно добиться, отсортировав детали соответствующим образом за время, пропорциональное величине $n \cdot \log_2 n$.

Пусть $S(k) = (p(1) + \dots + p(k))/m$, $k=1, \dots, n$, а $L(k) = \max\{r(i) + p(i) + d(i), S(k)\}$, где максимум берется по всем значениям $i=1, \dots, k$.

Для определенных нами величин очевидны следующие утверждения.

Утверждение 1. $L(k) < T^*$, $k=1, \dots, n$.

Утверждение 2. $L(k) \leq L(k+1)$, $k=1, \dots, n$.

Через $H(k)$ обозначим общее время простоя всех станков после распределения k деталей на станки по алгоритму A . Эти простои связаны с наличием величины $r(i)$.

Через $Sph(j, k)$ будем обозначать общее время простоя и работы станка j , $j=1, \dots, m$, после k -го шага алгоритма, а через $SA(j, k)$ – максимальное время доставки деталей, обработанных на станке j .

Опишем шаг алгоритма $(k+1)$, т.е. правило выбора станка, на который очередная $(k+1)$ деталь будет назначаться. Для этого шага справедливы следующие утверждения.

Утверждение 3. Существует станок с номером x , для которого справедливо соотношение $Sph(x, k) \leq S(k) + H(k)/m$, что следует из равенства $Sph(1, k) + \dots + Sph(m, k) = m \cdot S(k) + H(k)$.

Утверждение 4. $r(k+1) \geq H(k)/m$.

Справедливость этого соотношения следует из упорядоченности величин $r(k)$.

Из приведенных выше утверждений вытекает

Следствие 1. $p(k+1) + d(k+1) \leq L(k+1) - H(k)/m$.

Доказательство следует из соотношения $r(k+1) + p(k+1) + d(k+1) \leq L(k+1)$ и утверждения 4.

Лемма 1. Если для обработки детали $k+1$ выбран станок x , для которого справедливы соотношения $Sph(x, k) \leq S(k) + H(k)/m$ и $SA(x, k) < 2 \cdot L(k)$, то для величины $SA(x, k+1)$ будет справедливо соотношение $SA(x, k+1) < 2 \cdot L(k+1)$.

Доказательство. Возможны три ситуации.

1. Максимальное время доставки деталей, обработанных на станке x после добавления новой детали, не увеличивается. В этом случае очевидно соотношение $SA(x, k+1) = SA(x, k)$.

2. Максимальное время доставки деталей, обработанных на станке x после добавления новой детали, увеличивается, но при этом не возникает нового интервала простоя. т.е.

$$Sph(x,k) \geq r(k+1) \text{ и } SA(x,k) < Sph(x,k) + p(k+1) + d(k+1).$$

В этом случае $SA(x,k+1) = Sph(x,k) + p(k+1) + d(k+1)$.

3. Максимальное время доставки деталей, обработанных на станке x после добавления новой детали, увеличивается и при этом возникает новый интервал простоя. т.е. $Sph(x,k) < r(k+1)$ и $SA(x,k) < r(k+1) + p(k+1) + d(k+1)$.

В этом случае $SA(x,k+1) = r(k+1) + p(k+1) + d(k+1)$. Отсюда, в силу утверждений, вытекает, что $SA(x,k+1) < \max\{SA(p,k), S(k) + H(k)/m + L(k+1) - H(k)/m, r(k+1) + p(k+1) + d(k+1)\} < \max\{2 \cdot L(k), S(k) + L(k+1), L(k+1)\} \leq 2 \cdot L(k+1)$.

Лемма доказана.

Алгоритм А.

1. Сортируем детали в порядке неубывания величин $r(i)$, $i=1, \dots, n$.

2. Помещаем в приоритетную очередь величины $Sph(j,k)$, $j=1, \dots, m$. Вначале все они равны нулю.

3. Итерация $k+1$, $k=0, \dots, n-1$.

А. Достаем из приоритетной очереди элемент x с минимальным значением $Sph(i,k)$ $j=1, \dots, m$;

Б. Назначаем на соответствующий станок текущую деталь и помещаем в приоритетную очередь величину $Sph(x,k+1)$.

4. Алгоритм заканчивает работу, когда все детали назначены на станки.

Трудоёмкость приведенного алгоритма пропорциональна величине $n \cdot \log_2 n$, так как трудоёмкость операций добавления в приоритетную очередь и удаления элемента из приоритетной очереди пропорциональна логарифму от количества элементов в очереди. Не умаляя общности, можно считать, что количество деталей превышает количество станков. В противном случае задача тривиальна.

Теорема. Для алгоритма А справедлива оценка $T(A) < 2 \cdot T^*$.

Доказательство следует из леммы при $k=n$ и утверждения 1.

Следствием теоремы является тот факт, что в случае, когда все значения $r(i)$, $i=1, \dots, m$, равны между собой, (например $r(i)=0$, [2]), то on-line алгоритм имеет гарантированную оценку, равную 2.

1. Garey M.R., Johnson D.S. Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness. San Francisco, 1979.

2. Woeginger G.. Heuristics for Parallel Machine Scheduling with Delivery Time. Graz. 1996. Preprint.

УДК 512.542

В.Н. СЕМЕНЧУК

КОНЕЧНЫЕ ГРУППЫ С ЗАДАННОЙ СИСТЕМОЙ ПОДГРУПП

In this paper we obtain the description of finite groups for which any proper subgroup is either F-subnormal or F-abnormal for an arbitrary hereditary solvable supernormal formations F.

В 1975 г. было получено описание конечных групп [1], у которых каждая подгруппа субнормальна или абнормальна. Естественным обобщением понятия субнормальности является понятие F-субнормальности, которое для произвольных конечных групп впервые введено Л.А. Шеметковым [2].

Пусть F – непустая формация. Подгруппу K группы G назовем F -субнормальной, если либо $K=G$, либо существует максимальная цепь

$$G = K_0 \supset K_1 \supset \dots \supset K_n = K$$

такая, что $(K_{i-1})^F \subset K_i$ для всех $i=1,2,\dots,n$.

Подгруппу H группы G назовем F -абнормальной, если для любой максимальной цепи

$$G = H_0 \supset H_1 \supset \dots \supset H_n = H$$

подгруппа H_i F -абнормальна в H_{i-1} для любого $i=1,2,\dots,n$.

Обозначим через $E(F)$ множество конечных групп, у которых каждая неединичная собственная подгруппа либо F -субнормальна, либо F -абнормальна. В работе [3] было получено описание групп из $E(F)$ в случае, когда F – формация всех p -нильпотентных разрешимых групп. Затем, в работе [4] была построена общая схема изучения групп из $E(F)$ для произвольной локальной формации F . С помощью данной схемы удалось получить конструктивное описание групп из $E(F)$, где F – формация всех разрешимых π -замкнутых групп. Наконец, в работе [5] было получено описание групп из $E(F)$, в случае когда F – произвольная разрешимая наследственная формация Шеметкова.

Напомним, что формация F называется формацией Шеметкова, если любая минимальная не F -группа является группой Шмидта, либо группой простого порядка.

Формация F называется сверхрадикальной формацией, если она удовлетворяет следующим требованиям:

- 1) F – нормально наследственная формация;
- 2) F содержит любую группу $G = AB$, где A и B F -субнормальные F -подгруппы группы G .

Как следует из результатов работы [6], формация всех π -замкнутых разрешимых групп, формация всех p -нильпотентных разрешимых групп, любая разрешимая наследственная формация Шеметкова являются сверхрадикальными.

В настоящей работе получено описание конечных групп, у которых каждая неединичная собственная подгруппа либо F -субнормальна, либо F -абнормальна для произвольной разрешимой наследственной сверхрадикальной формации.

Рассматриваются только конечные группы. Необходимые определения и обозначения можно найти в [2]. Обозначим через $\pi(F)$ множество всех тех простых чисел, которые делят порядки групп из F , а через $\sigma(F)$ существенную характеристику локальной формации F , т.е. множество всех таких простых чисел p из $\pi(F)$, для которых $f(p) \neq F$, где f – максимальный внутренний локальный экран формации F .

Теорема. Пусть F – разрешимая наследственная сверхрадикальная формация. Тогда и только тогда любая неединичная собственная подгруппа группы G F -субнормальна либо F -абнормальна, когда G – $\pi(F)$ -разрешимая группа одного из следующих типов:

- 1) $G \in F$;
- 2) $G = G_{q'} G_q$, где $G_{q'} \in F$, G_q – F -проектор группы G , G_q – циклическая группа, $\pi(G_{q'}) \subset \sigma(F)$, $G_{q'} \times G_q^*$ – единственная нормальная максимальная подгруппа группы G , G_q^* – максимальная подгруппа из G_q ;

- 3) G – $\pi(F)$ -группа;
4) $G = G_p \cdot G_p$, где $p \in \pi(F)$, $\pi(G_p) \subseteq \pi(F)$, $|G_p| = p$, G_p – F -проектор группы G , $N_G(K)$ – p -группа, где K – любая p -группа из G .

1. Ebert G., Vauman S. // J. Algebra. 1975. Vol.36. N 2. P.287.
2. Шеметков Л. А. Формации конечных групп. М., 1978.
3. Fattachi A. // J. Algebra. 1974. Vol.28. N 1. P.15.
4. Семенчук В. Н. // Вопр. алгебры. Мн., 1986. N 2. С.50.
5. Семенчук В. Н. // Мат. заметки. 1994. Т.56. N 6. С.111.
6. Он же // Мат. заметки. 1996. Т. 59. N 2. С.261.

Поступила в редакцию 14.01.2000

Наши юбиляры



АЛЕКСАНДР ПЕТРОВИЧ ХАПАЛОК

Исполнилось 75 лет со дня рождения видного ученого в области физической оптики и лазерной физики, ведущего научного сотрудника лаборатории фотоники Научно-исследовательского института прикладных физических проблем им. А.Н. Севченко, доктора физико-математических наук, профессора Александра Петровича Хапалюка.

А.П. Хапалюк родился 13 марта 1925 г. в д. Великорита Малоритского района Брестской области в крестьянской семье. В годы Великой Отечественной войны сражался против фашистских захватчиков в составе партизанской бригады им. А.К. Флегонтова, 1-го и 2-го Белорусских фронтов. Награжден медалями "За отвагу" и "За победу над Германией".

В 1955 г. А.П. Хапалюк с отличием окончил физико-математический факультет Белорусского государственного университета. После завершения учебы в аспирантуре (1959 г.) работал младшим научным сотрудником Института физики АН БССР, ассистентом кафедры спектрального анализа БГУ, заведующим сектором проблемной лаборатории, доцентом кафедры физической оптики. В НИИ прикладных физических проблем им. А.Н. Севченко Белгосуниверситета Александр Петрович работает с момента его основания (1971 г.) заведующим лабораторией нелинейной оптики (с 1971 по 1998 гг.), а с 1998 г. ведущим научным сотрудником лаборатории фотоники.

Научная деятельность А.П. Хапалюка началась под руководством академика Б.И. Степанова. За время обучения в аспирантуре он выполнил ряд работ по общей теории интерференционных фильтров и по результатам этих исследований в 1962 г. защитил кандидатскую диссертацию. В это же время им было получено полное решение уравнений Максвелла для волн, распространяющихся вдоль круговых осей кристаллов и в оптически активных средах.

С начала 60-х гг. Александр Петрович работает в области лазерной физики. Им доказано существование обратного лазерного эффекта, который лежит в основе внутривибрационной спектроскопии, внесен существенный вклад в теорию генерации, распространения и дифракции световых пучков. Профессором А.П. Хапалюком построена волновая теория открытых оптических резонаторов, разработаны аналитические методы исследования преобразования структуры поля световых пучков в устойчивых и неустойчивых лазерных резонаторных системах, заполненных квадратично неоднородной средой и содержащих различного рода амплитудно-фазовые корректоры. Результаты этих исследований отражены А.П. Хапалюком в монографии "Пространственная структура лазерного излучения" и докторской диссертации. Им получены решения уравнений Максвелла в классе обобщенных функций, которые используются при решении внутренних и внешних задач электродинамики: выявлены и изучены калейдоскопические пространственные структуры, используемые в оптическом и оптоэлектронном приборостроении.

А.П. Хапалюком опубликовано 3 монографии, более 270 статей, получено 33 авторских свидетельства на изобретения.

Александр Петрович проводит большую педагогическую и воспитательную работу. Его курсы лекций для студентов университета отличаются высоким педагогическим мастерством, глубиной изложения материала. Он активно участвует в работе советов университета и института по защите докторских и кандидатских диссертаций. Им подготовлено 3 доктора и 13 кандидатов наук.

За многолетнюю плодотворную научную и педагогическую деятельность А.П. Хапалюк награжден Почетными грамотами Верховного Совета Республики Беларусь, Министерства образования республики, Белгосуниверситета и НИИ прикладных физических проблем им. А.Н. Севченко.

Александр Петрович – человек высокой культуры, чуткий и отзывчивый товарищ, талантливый ученый и педагог.

Друзья, коллеги и многочисленные ученики сердечно поздравляют Александра Петровича с 75-летием и желают ему крепкого здоровья, большого счастья и новых творческих успехов.

РЕФЕРАТЫ

УДК 535.34

Губарь Н.Б., Урбанович А.И. **Вырожденное попутное двухволновое смещение в кубических средах с молекулярными либрациями** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер.1. 2000. №2.

Рассматривается процесс попутного вырожденного двухволнового смещения (ДВС) ультракоротких импульсов в кубических средах при одновременном наблюдении ориентационного эффекта Керра и молекулярных либраций. Получены уравнения, описывающие процесс ДВС, и проведено их численное моделирование.

Библиогр. 16 назв., ил. 2

УДК 535.34

Миксюк Ю.И., Толстик А.Л. **Формирование нелинейно-оптического отклика молекулярных систем с участием фотопротолитических процессов** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер.1. 2000. №2.

Разработана теоретическая модель формирования нелинейно-оптического отклика растворителя сложных органических соединений в условиях фотопереноса протона. Показана возможность оптического управления спектроскопическими и оптическими характеристиками растворителя посредством фотоиндуцированного изменения рН-среды.

Библиогр. 3 назв., ил.3.

УДК 541.64:532.72

Станкевич А.И., Могильный В.В. **Термоизомеризация азометинов на оснине 9-формилантрацена в слоях полиметилметакрилата** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер.1. 2000. №2.

Исследована *Z/E*-термоизомеризация азометиновых соединений антраценового ряда в тонких пленках стеклообразного ПММА. Из корреляционной диаграммы $\lg k$ *Z/E*-изомеризации от σ -констант Гаммета сделано предположение о различии механизмов перегруппировки азометинов с электронодонорными и электроноакцепторными заместителями. Первые превращаются преимущественно по ротационному механизму, вторые – по инверсионному. В полимерной матрице ротационный механизм перегруппировки требует локализации большего свободного объема, чем инверсионный. Усиление электронодонорных свойств заместителя при азоте замедляет *Z/E*-термоизомеризацию, которая становится соизмеримой со скоростью диффузии свободного объема от границы слоя.

Библиогр.8 назв., ил.3.

УДК 538.21

Леонтьев А.В., Иванов А.И. **Исследование продуктов травления пленок ПММА ионами кислорода** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. № 2.

Представлены результаты исследования продуктов травления пленок ПММА ионами кислорода. Исследована зависимость выхода заряженных “фрагментов” в зависимости от дозы предварительного облучения.

Библиогр. 6 назв., ил.3.

УДК 539.2–577.3

Василевская П.В., Хмельницкий А.И., Черенкевич С.Н., Кулинкович О.Г., Сидерко В.М., Эпштейн О.Л., Лобан В.А. **Образование агрегатов поли-N-изопропилакриламида в липидных бислоях** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер.1. 2000. № 2.

Построена модель образования агрегатов молекул поли-N-изопропилакриламида в липидном бислое. Для стационарного состояния рассчитаны энергия взаимодействия между молекулами поли-N-изопропилакриламида и найдена функция распределения молекул модификатора в различных агрегатах в зависимости от размеров молекулы и диэлектрической проницаемости внутри агрегата.

Библиогр. 10 назв., ил.4

УДК 535.37

Воропай Е.С., Самцов М.П., Каплевский К.Н., Чалов В.Н., Луговский А.П. **Спектрально-люминесцентные характеристики симметричного трикарбонианинового красителя (ТИКС) в растворах** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. № 2.

В водно-спиртовом растворе в диапазоне концентраций $10^{-3} \div 10^{-7}$ М исследованный полиметиновый краситель находится в ассоциированном состоянии. В сыворотке крови краситель связывается с биологическими макромолекулами. Проведенный анализ спектрально-люминесцентных свойств красителя в сыворотке крови показывает отсутствие ассоциатов красителя в этой среде. В малополярных растворителях краситель находится в виде различных типов ионных пар.

Библиогр. 14 назв. табл. 1, ил.1.

УДК 535.33-535.36

Соловьев В.С., Гусаков Г.А., Крехотень О.В., Семенов Е.А., Воропай Е.С., Самцов М.П., Деменченко А.Н. **Состав и пространственное распределение атомов примесей в монокристаллах синтетического алмаза** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер.1 2000. №2.

Исследован примесный состав и совершенство кристаллической структуры синтетических алмазов, выращенных на аппаратах высокого давления типа «разрезная сфера» при использовании различных систем металлов-растворителей. Секториальное распределение примеси приводит к существенной неоднородности оптических характеристик кристалла и возникновению избыточных внутренних напряжений. Для кристаллов, выращенных в системе Ni-Fe-C, сектор роста {111} содержит в 2,5 раза больше азота и в несколько раз больше никеля, чем сектор роста {100}. Кристаллы, выращенные в системах, содержащих геттеры азота и не содержащих никель, имеют более высокую степень кристаллического совершенства. Секториальная неоднородность для таких кристаллов не проявляется, по своим оптическим характеристикам (пропускание в УФ- и видимом диапазонах спектра, полуширина рамановской линии) они близки к наиболее совершенным природным алмазам.

Библиогр. 22 назв., ил. 3.

УДК 539.216:621.382

Комаров Ф.Ф., Людчик О.Р., Петров С.А., Соловьев В.С. **Воздействие на кремний ускоренных потоков лазерно-эрозионной плазмы тяжелых металлов** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. № 2.

Методами резерфордского обратного рассеяния каналированных ионов гелия, просвечивающей электронной микроскопии и дифракции электронов исследованы процессы силицидообразования и синтеза метастабильной вюрцитной фазы кремния в кремниевых пластинах, подвергнутых воздействию ускоренных потоков тяжелых металлов (Hf, Ta, W) с энергией 10 кэВ и дозами $5 \cdot 10^{15}$ см⁻² и $2,5 \cdot 10^{16}$ см⁻². Обсуждены возможные механизмы данных структурно-фазовых преобразований.

Библиогр. 9 назв., ил. 1.

УДК 669.76:537.3

Гречанников Э.Е., Шепелевич В.Г. **Структура и электрические свойства сплава Bi-15 ат.% Sb, легированного серой и германием** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер.1. 2000. №2.

Быстрозатвердевшие фольги сплава Bi-15 ат.% Sb, легированного германием и серой, имеют мелкозернистую структуру и текстуру (10 $\bar{1}$ 2). Германий является акцептором, а сера – донором в сплаве Bi-15 ат.% Sb. Электрические свойства исследуемых сплавов зависят от легирующих элементов и температуры.

Библиогр. 8 назв., ил.2.

УДК: 621.029.

Дудчик Ю.И., Кольчевский Н.Н., Комаров Ф.Ф. **Формирование микропучков жесткого рентгеновского излучения при помощи преломляющей линзы** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. № 2.

Рассмотрена микрокапиллярная преломляющая линза для жесткого рентгеновского излучения. Предложен способ изготовления набора линз толщиной 20–200 мкм из воды или

глицерина. Рассчитаны сферические аберрации линзы. Исследованы возможности получения сфокусированных микропучков рентгеновского излучения с помощью преломляющей микрокапиллярной линзы и микрофокусной рентгеновской трубки.

Библиогр. 11 назв., ил. 3.

УДК 517.977

Габасова О.Р. **Оптимальная политика фирмы с двумя технологическими способами производства** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000 № 2.

Рассматривается задача оптимального управления с фазовыми и смешанными ограничениями. С помощью достаточных условий оптимальности получены программные и позиционные решения задачи, которые определяют оптимальную политику фирмы с двумя однородными технологическими способами производства.

Библиогр. 1 назв., ил. 1.

УДК. 681.3

Мирончик В.М., Саечников В.А. **Программные средства полуавтоматической оцифровки картографической информации в геоинформационных системах** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. № 2.

Рассмотрены основные принципы функционирования и разработки программных средств полуавтоматической оцифровки картографической информации. Приведены базовые алгоритмы полуавтоматической оцифровки картографических объектов.

Библиогр. 7 назв., ил.4.

УДК 517.977

Бойко А.В. **Стабилизация двойного перевернутого маятника на подвижной платформе ограниченными управлениями.** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер.1. 2000. №2.

Описывается алгоритм работы стабилизатора и его реализация на ПЭВМ для динамической системы шестого порядка.

Библиогр. 3 назв., табл. 1, ил. 1.

УДК 517.986.7:517.983.23

Миротин А.Р. **Генераторы голоморфных полугрупп как функции генераторов C_0 -полугрупп** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер.1. 2000. № 2.

Указано условие на функцию ψ класса Шенберга T_1 , при котором для произвольного генератора A равномерно ограниченной C_0 -полугруппы в банаховом пространстве X оператор $\psi(A)$ будет генератором голоморфной полугруппы в X . Рассмотрены примеры. Результат является аналогом теоремы Иосиды–Балакришнана–Като, относящейся к дробным степеням оператора A . Основы T -исчисления генераторов C_0 -полугрупп заложены в предшествующих работах автора.

Библиогр. 7 назв.

УДК 519.1

Мельников О.И., Шилак А.Н. **Построение транзитивной редукции ациклического орграфа** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. № 2.

Представлен алгоритм сложности $O(|VH|^2)$ нахождения транзитивной редукции ациклических ориентированных графов.

Библиогр. 3 назв.

УДК 517.948.32:517.544

Дегтяренко Н.А., Зверович Э.И. **Нахождение спектра и собственных функций одного сингулярного интегрального оператора с эллиптической функцией в качестве ядра** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер.1. 2000. №2.

Вычисляется спектр одного самосопряженного сингулярного интегрального оператора с эллиптической функцией в качестве ядра. Получена в явном виде вся система собственных функций этого оператора, которая представляет собой пример новой ортогональной системы функций.

Библиогр. 5 назв., ил. 1.

УДК 621.315.592

Поклонский Н. А. **Инерционное экранирование индукционного электрического поля в резисторе при включении его в сверхпроводящую цепь** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. № 2.

Рассматривается возникновение квадратичного по току электрического поля контура, состоящего из сверхпроводящей катушки и резистора. Показано, что разность потенциалов между резистором и окружающим контур экраном обусловлена макроскопической поляризацией резистора за счет кинетической энергии электронов сверхпроводящей катушки.

Библиогр. 13. назв., ил. 1.

УДК 539.12.04:539.211

Корнийчук М. Б., Анищик В. М., Чижик С. А. **Изменение топографии поверхности кобальта, имплантированного ионами бора** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. № 2.

С помощью метода атомно-силовой микроскопии (АСМ) проведено исследование поликристаллических образцов кобальта, имплантированных ионами бора с энергией 30 кэВ и дозой 10^{14} см⁻². Получены АСМ-изображения топографии и фазового состава поверхности кобальта. Установлено, что шероховатость поверхности образцов в результате ионной имплантации уменьшается. Высказано предположение, что в поверхностных слоях кобальта в результате имплантации бора образуются боридные фазы.

Библиогр. 3 назв., ил. 2.

УДК 519.1

Зверович И. Э. **Бипороговые графы** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. №2.

Граф G называется бипороговым, если существуют пороговые графы $T_i = T_i(V, E)$, $i=1, 2$, такие, что $E = E_1 \cup E_2$ и каждая клика графа G является кликой в T_1 или T_2 .

Получена характеристика расщепляемых бипороговых графов в терминах запрещенных порожденных подграфов, откуда вытекает полиномиальный алгоритм распознавания таких графов.

Библиогр. 6 назв., ил. 2.

УДК 517.925.6

Мататова И. В., Прокашева В. А. **О подвижных особенностях неавтономных кубических систем двух дифференциальных уравнений специального вида** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. № 2.

Изучены неавтономные кубические системы двух дифференциальных уравнений специального вида на предмет однозначности подвижных особых точек. Установлены классы функций, через которые выражаются решения соответствующих систем P -типа.

Библиогр. 7 назв.

УДК 517.925.6

Кричавец Е. Я., Мататов В. И. **О подвижных особенностях системы двух дифференциальных уравнений с рациональными правыми частями специального вида** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. № 2.

Установлены условия, при которых решения невырожденной системы дифференциальных уравнений второго порядка имеют только однозначные подвижные особые точки. Указаны классы функций, через которые выражаются решения соответствующих систем.

Библиогр. 6 назв.

УДК 512.542

Аль-Дабабсех Авни Ф. (Иордания). **О подформации Фраттини формаций конечных n -арных групп** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. №2.

Все рассматриваемые в данной работе n -арные группы конечны. Исследуются пересечения максимальных τ -замкнутых подформаций формации n -арных групп. В частности, доказано, что если G – неоднородная n -арная группа, принадлежащая τ -замкнутой формации F , то $G/\text{soc}(G) \in \Phi_\tau(F)$, где $\Phi_\tau(F)$ обозначает пересечение всех максимальных τ -замкнутых подформаций τ -замкнутой формации n -арных групп F , а $\text{soc}(G)$ – цокальная конгруэнция (т.е. произведение всех минимальных на G конгруэнций).

Библиогр. 6 назв.

УДК 519.8

Котов В. М. **Одна задача теории расписаний** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. № 2.

Рассматривается задача теории расписаний с параллельными станками, когда для деталей определены время задержки и доставки. Для этой задачи предлагается градиентный алгоритм, имеющий трудоемкость $O(n \cdot \log_2 n)$ и гарантированную оценку, равную 2.

Библиогр. 2 назв.

УДК 512.542

Семенчук В. Н. **Конечные группы с заданной системой подгрупп** // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. № 2.

Получено описание конечных групп, у которых каждая неединичная собственная подгруппа либо F-субнормальна, либо F-абнормальна для произвольной разрешимой наследственной сверхрадикальной формации F.

Библиогр. 6 назв.

CONTENTS

PHYSICS

<i>Gubar N.B., Urbanovich A.I.</i> Degenerate co-directional two-wave mixing in cubic media with account of molecular librations	5
<i>Miksyuk Yu.I., Tolstik A.L.</i> Nonlinear-optical respons formation of molecular systems with participation of photoprotolytic processes	11
<i>Stankevich A.I., Mahilny U.V.</i> Thermoisomerization of azomethine derivatives of 9-formylanthracene in films of poly(methylmethacrylate)	15
<i>Leont'ev A.V., Ivanov A.I.</i> The results of investigation of etching products of PMMA films by oxygen are presented	19
<i>Vasilevskaya N.V., Khmel'nitsky A.I., Cherenkevich S.N., Kulinkovich O.G., Siderko V.M., Epshtein O.L., Loban V.A.</i> Poly(N-isopropylacrylamide) aggregation in lipid bilayers... ..	23
<i>Voropay E.S., Samtsov M.R., Kaplevskiy K.N., Tchalov V.N., Lugovskiy A.P.</i> Spectral and luminescence characteristics of the symmetric tricyanocyanine dye TIX in solutions	28
<i>Solov'yev V.S., Gusakov G.A., Krekoten' O.V., Semenov E.A., Voropay E.S., Samtsov M.P., Demenschonok A.N.</i> Composition and spatial distribution of impurity atoms in single crystals of synthetic diamonds	31
<i>Komarov F.F., Lyudchik O.R., Petrov S.A., Solov'yev V.S.</i> The influence of accelerated flows of heavy metals extracted from laser-erosion plasma on silicon wafers	38
<i>Grechannikov E.E., Shepelevich V.G.</i> Structure and electric properties of Bi-15 at.% Sb alloy, doped with sulphur and germanium	41
<i>Dudchik Yu.I., Kolchevsky N.N., Komarov F.F.</i> Refractive lens for obtaining micro-beam of hard X-rays	43

MATHEMATICS AND INFORMATICS

<i>Gabasova O.R.</i> Optimal policy of the firm with two production activities	49
<i>Mironchik V.M., Saechnikov V.A.</i> Principles of functioning of software tools of semiautomatic's digitizing the map's information for using with geoinformation system	52
<i>Boiko A. V.</i> Stabilizing of a double inverted pendulum on an inclined rail by limited control	58
<i>Mirotin A.R.</i> Generators of holomorphic semigroups as functions of generators of C_0 -semigroups	61
<i>Melnikov O.J., Shilak A.N.</i> Constructing of the transitive reduction of an acyclic digraph	65
<i>Degtiarenko N.A., Zverovich E.I.</i> Determining a spectrum and proper functions of a singular integral operator with elliptic function as a kernel	68

BRIEF COMMUNICATIONS

<i>Poklonski N.A.</i> The inertial screening of induction electric field in resistor included in superconducting circuit	73
<i>Kornijchuk M.B., Anishchik V.M., Schizik S.A.</i> Change of topography of cobalt surface implanted with boron ions	76
<i>Zverovich I.E.</i> Bithreshold graphs	78
<i>Matatova I. V., Prokasheva V. A.</i> About movable singularities of not autonomic cubic system for two differential equations of special variety	80
<i>Krichavets E. Y., Matatov V. I.</i> On the movable singularities of the system of two differential equations with the rational right-hand side of the special form	83
<i>Al-Dababseh Awni.</i> On subformation Frattini of formations of finite n -ary groups	86
<i>Kotov V.M.</i> One of the scheduling problems	87
<i>Semenchuk V.N.</i> Finite groups with the given sistem subgroups	89

OUR JUBILEE

Alexander Petrovich Khapaluyk	92
-------------------------------------	----