



БЕЛОРУССКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

ЖУРНАЛ
БЕЛОРУССКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

ФИЗИКА

JOURNAL
OF THE BELARUSIAN STATE UNIVERSITY

PHYSICS

Издается с января 1969 г.
(до 2017 г. – под названием «Вестник БГУ.
Серия 1, Физика. Математика. Информатика»)

Выходит три раза в год

2

2019

МИНСК
БГУ

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

- Главный редактор** АНИЩИК В. М. – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры физики твердого тела физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
E-mail: anishchik@bsu.by
- Заместитель
главного редактора** ВОРОПАЙ Е. С. – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
E-mail: voropay@bsu.by
- Бондаренко Г. Г.** Московский институт электроники и математики Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», Москва, Россия.
- Воеводин В. Н.** Институт физики твердого тела, материаловедения и технологий Национальной академии наук Украины, Харьков, Украина.
- Жуковский П. В.** Люблинский технический университет, Люблин, Польша.
- Кислицин С. Б.** Институт ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан, Алма-Ата, Казахстан.
- Козлов С. А.** Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия.
- Кучинский П. В.** НИУ «Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко» Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
- Максименко С. А.** НИУ «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
- Малый С. В.** Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь.
- Маскевич С. А.** Международный государственный экологический институт им. А. Д. Сахарова Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
- Машлан М.** Оломоуцкий университет им. Палацкого, Оломоуц, Чехия.
- Патрин А. А.** Кошалинский технический университет, Кошалин, Польша.
- Погребняк А. Д.** Сумский государственный университет, Сумы, Украина.
- Ремнев Г. Е.** Томский политехнический университет, Томск, Россия.
- Толстик А. Л.** Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь.
- Туроверов К. К.** Институт цитологии Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.
- Чалов В. Н.** Имперский колледж Лондона, Лондон, Великобритания.
- Шандаров С. М.** Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск, Россия.
- Хайнцманн Р.** Институт физической химии Йенского университета, Йена, Германия.

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

- Ануфрик С. С.** Гродненский государственный университет им. Янки Купалы, Гродно, Беларусь.
- Гусев О. К.** Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь.
- Казак Н. С.** Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.
- Килин С. Я.** Национальная академия наук Беларуси, Минск, Беларусь.
- Кононов В. А.** СП «ЛОТИС ТИИ», Минск, Беларусь.
- Маляревич А. М.** Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь.
- Пенязьков О. Г.** Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.
- Пилипенко В. А.** Государственный центр «Белмикрoанализ» филиала НТЦ «Белмикросистемы» ОАО «Интеграл» – управляющей компании холдинга «Интеграл», Минск, Беларусь.
- Плетюхов В. А.** Брестский государственный университет им. А. С. Пушкина, Брест, Беларусь.
- Семченко И. В.** Гомельский государственный университет им. Франциска Скорины, Гомель, Беларусь.
- Федосюк В. М.** ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь.
- Шкадаревич А. П.** Научно-производственное унитарное предприятие «Научно-технический центр “ЛЭМТ” БелОМО», Минск, Беларусь.

EDITORIAL BOARD

- Editor-in-chief** **ANISHCHIK V. M.**, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of solid-state physics, faculty of physics, Belarusian State University, Minsk, Belarus.
E-mail: anishchik@bsu.by
- Deputy editor-in-chief** **VOROPAY E. S.**, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics, Belarusian State University, Minsk, Belarus.
E-mail: voropay@bsu.by
- Bondarenko G. G.** Moscow Institute of Electronics and Mathematics of the National Research University «Higher School of Economics», Moscow, Russia.
- Voevodin V. N.** Institute of Solid State Physics, Materials Science and Technologies, National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkiv, Ukraine.
- Zhukowski P. V.** Lublin University of Technology, Lublin, Poland.
- Kislitsin S. B.** Institute of Nuclear Physics of the Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, Almaty, Kazakhstan.
- Kozlov S. A.** Saint Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics, Saint Petersburg, Russia.
- Kuchinski P. V.** A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems of the Belarusian State University, Minsk, Belarus.
- Maksimenko S. A.** Institute for Nuclear Problems of the Belarusian State University, Minsk, Belarus.
- Maly S. V.** Belarusian State University, Minsk, Belarus.
- Maskevich S. A.** International Sakharov Environmental Institute of the Belarusian State University, Minsk, Belarus.
- Maslan M.** Palacký University, Olomouc, Czech Republic.
- Patryn A. A.** Politechnika Koszalińska, Koszalin, Poland.
- Pogrebnyak A. D.** Sumy State University, Sumy, Ukraine.
- Remnev G. E.** Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia.
- Tolstik A. L.** Belarusian State University, Minsk, Belarus.
- Turoverov K. K.** Institute of Cytology, Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, Russia.
- Chalov V. N.** Imperial College London, London, United Kingdom.
- Shandarov S. M.** Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Tomsk, Russia.
- Heintzmann R.** Institute of Physical Chemistry of the Jena University, Jena, Germany.

EDITORIAL COUNCIL

- Anufrik S. S.** Yanka Kupala State University of Grodno, Grodno, Belarus.
- Gusev O. K.** Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus.
- Kazak N. S.** B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
- Kilin S. Y.** National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
- Kononov V. A.** «LOTIS TII», Minsk, Belarus.
- Malyarevich A. M.** Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus.
- Penyazkov O. G.** A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
- Pilipenko V. A.** JSC «Integral», Minsk, Belarus.
- Pletyukhov V. A.** Brest State University named after A. S. Pushkin, Brest, Belarus.
- Semchenko I. V.** Francisk Scorina Gomel State University, Gomel, Belarus.
- Fedosyuk V. M.** SSPA «Scientific and Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus», Minsk, Belarus.
- Shkadarevich A. P.** Unitary Enterprise «STC “LEMT” of the BelOMO», Minsk, Belarus.

ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

ATOMIC NUCLEUS AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS

УДК 539.12.01

НЕПЕРТУРБАТИВНАЯ КВАНТОВАЯ ХРОМОДИНАМИКА И КОРОТКИЕ СТРУНЫ В АННИГИЛЯЦИИ ЭЛЕКТРОН-ПОЗИТРОННОЙ ПАРЫ В АДРОНЫ

М. Е. КОЖЕВНИКОВА¹⁾, А. Г. ОГАНЕСЯН²⁾, О. В. ТЕРЯЕВ¹⁾

¹⁾Объединенный институт ядерных исследований,
ул. Жолио Кюри, 6, 141980, г. Дубна, Московская область, Россия

²⁾Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»,
ул. Большая Черемушкинская, 25, 117218, г. Москва, Россия

Разработан новый математический метод изучения непертурбативных поправок квантовой хромодинамики для процессов при малых энергиях. Используются обычная и аналитическая теория возмущений. Метод применим для извлечения конденсатов низших размерностей из функции Адлера, построенной на данных по e^+e^- -аннигиляции в пионные каналы: $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-$, $e^+e^- \rightarrow 2\pi^+2\pi^-$, $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-2\pi^0$, $e^+e^- \rightarrow 3\pi^+3\pi^-$ и $e^+e^- \rightarrow 2\pi^+2\pi^-2\pi^0$.

Образец цитирования:

Кожевникова М.Е., Оганесян А.Г., Теряев О.В. Непертурбативная квантовая хромодинамика и короткие струны в аннигиляции электрон-позитронной пары в адроны. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2019; 2:4–15.

<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-4-15>

For citation:

Kozhevnikova M.E., Oganessian A.G., Teryaev O.V. Non-perturbative quantum chromodynamics and short strings in electron-positron pair annihilation to hadrons. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2019;2:4–15. Russian.

<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-4-15>

Авторы:

Марина Евгеньевна Кожевникова – младший научный сотрудник научно-экспериментального отдела физики столкновений тяжелых ионов на комплексе NICA лаборатории физики высоких энергий им. В. И. Векслера и А. М. Балдина.

Армен Гургенович Оганесян – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник лаборатории теории сильных взаимодействий.

Олег Валерьянович Теряев – доктор физико-математических наук; начальник сектора лаборатории теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова.

Authors:

Marina E. Kozhevnikova, junior researcher at the division of physics of the collisions of heavy ions on the NICA complex, Veksler and Baldin laboratory of high energy physics.

kozhevnikova@jinr.ru

Armen G. Oganessian, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the laboratory of strong interaction theory.

armen@itep.ru

Oleg V. Teryaev, doctor of science (physics and mathematics); head at the Bogoliubov laboratory of theoretical physics group.

teryayev@theor.jinr.ru

Получены высокоточные фиты данных. Особое внимание уделяется вопросу: существует ли вклад оператора размерности 2? Указанная функция Адлера исследована в зависимости как от Q , так и от параметра M^2 преобразования Бореля. Показано, что в рамках предложенного метода коэффициент C_2 при операторе размерности 2 отрицателен, его совместимость с нулем зависит от выбора аналитической или обычной теории возмущений, от интервала, на котором рассматривается борелизованная функция Адлера, и от величины Λ . Существование ненулевого оператора размерности 2 может быть объяснено эффектом коротких струн.

Ключевые слова: квантовая хромодинамика; теория возмущений; дисперсионные соотношения; преобразование Бореля; рождение адронов в e^+e^- -аннигиляции; непертурбативные поправки.

Благодарность. Выражаем благодарность коллегам доктору физико-математических наук О. П. Соловцовой, Д. В. Дедовичу и доктору физико-математических наук А. В. Сидорову за ценные замечания и обсуждения. Исследование частично поддержано Объединенным институтом ядерных исследований и Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (грант № F18D-002).

NON-PERTURBATIVE QUANTUM CHROMODYNAMICS AND SHORT STRINGS IN ELECTRON-POSITRON PAIR ANNIHILATION TO HADRONS

M. E. KOZHEVNIKOVA^a, A. G. OGANESIAN^b, O. V. TERYAEV^a

^aJoint Institute for Nuclear Research,
6 Zholtso Kyuri Street, Dubna 141980, Moscow region, Russia
^bInstitute of Theoretical and Experimental Physics,
25 Bol'shaya Chermushkinskaya Street, Moscow 117218, Russia
Corresponding author: M. E. Kozhevnikova (kozhevnikova@jinr.ru)

We develop a new mathematical method to study the non-perturbative quantum chromodynamics effects in low-energy processes using ordinary and analytic perturbation theory (PT and APT). We apply this tool to extract the lowest dimensional condensates from the high-precision fits of the data on e^+e^- -annihilation to pion channels: $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-$, $e^+e^- \rightarrow 2\pi^+2\pi^-$, $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-2\pi^0$, $e^+e^- \rightarrow 3\pi^+3\pi^-$ and $e^+e^- \rightarrow 2\pi^+2\pi^-2\pi^0$. The special attention is devoted to the existence of the contribution of dimension 2 operator. Our consideration is based on the dependence of Adler function corresponding to e^+e^- -annihilation into pions on both Q and Borel transform parameter M^2 . It is shown that within the framework of the proposed method the C_2 coefficient of the dimension 2 operator is negative and is closer to zero for analytic perturbation theory, which may therefore be partially responsible for the effect of short strings.

Keywords: quantum chromodynamics; perturbation theory; dispersion relations; Borel transform; hadron production in e^+e^- -annihilation; non-perturbative corrections.

Acknowledgements. It is a pleasure to thank doctor of science O. P. Solovtsova, D. V. Dedovich and doctor of science A. V. Sidorov for discussions and interest in this work. This research was supported in part by the Joint Institute for Nuclear Research and Belarusian Republic Foundation for Fundamental Research (grant No. F18D-002).

Введение

Вопрос о существовании оператора размерности 2, вклад которого в правила сумм [1; 2] квантовой хромодинамики (КХД) пропорционален $\frac{1}{Q^2}$, а также свойства высших поправок операторного разложения изучаются уже длительное время [3–5]. В основополагающей работе В. И. Захарова и соавторов в 1999 г. была предложена концепция коротких струн, ведущих к поправкам размерности 2 в операторном разложении [3].

Так, в корнельском потенциале [5], выражаемом формулой

$$V(r) \approx -\frac{4\alpha_s(r)}{3r} + kr,$$

второй член kr описывает потенциал струны и связан с явлением конфайнмента. В случае его применения на малых расстояниях (короткая струна) он приводит к поправкам вида $\frac{k}{Q^2}$. Заметим, что в локальном операторном разложении такая поправка отсутствует, а имеющаяся первая поправка имеет вид $\sim \frac{\langle G_{\mu\nu} G^{\mu\nu} \rangle}{Q^4}$.

В статье [4] установлена корреляция между короткой струной и порядком теории возмущений (ТВ). Это аналогично взаимосвязи между порядком ТВ и высшим твистом в глубоко неупругом рассеянии [7; 8]. Вклад оператора размерности 2 в процессах e^+e^- -аннигиляции исследовался ранее в [5; 9], где было показано, что он совместим с нулем и имеет большие ошибки.

Настоящий анализ основан на использовании функции Адлера (D -функции), являющейся простым двухточечным коррелятором, удобным для сравнения с экспериментальными данными [10]. Мы изучаем как ее зависимость от Q , так и преобразование Бореля от нее во взаимосвязи с соответствующим параметром M^2 . При использовании последнего вклад лидирующего порядка ТВ обращается в нуль, а вклад поправок может быть изучен точнее.

Помимо обычной ТВ в КХД существует аналитический подход, называемый аналитической теорией возмущений (АТВ) [11; 12], которая включает в себя базовые принципы локальной квантовой теории поля, в простейшем случае выражающиеся в Q^2 -аналитичности Челлена – Лемана (см. обзор [13]).

В рамках АТВ аналитическая «бегущая константа» связи (эффективный заряд) не имеет нефизических сингулярностей, и переход из евклидовой области в область Минковского оказывается самосогласованным [14]. В асимптотической области при больших Q^2 подходы ТВ и АТВ совпадают.

Список применений АТВ, представленный в обзоре [13], может быть дополнен применением в КХД-анализе глубоко неупругого рассеяния [8; 15–17].

Основная цель работы – проверить, проявляется ли в данных вклад оператора размерности 2. Для этого построена модель экспериментальных данных по e^+e^- -аннигиляции в пионные каналы: $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-$, $e^+e^- \rightarrow 2\pi^+2\pi^-$, $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-2\pi^0$, $e^+e^- \rightarrow 3\pi^+3\pi^-$ и $e^+e^- \rightarrow 2\pi^+2\pi^-2\pi^0$. Далее с использованием указанной модели строится функция Адлера в дисперсионной форме, применяется преобразование Бореля, составляются правила сумм и извлекаются коэффициенты операторного разложения.

Фитирование данных

Данные представлены наборами экспериментальных точек, и для их анализа предпочтительно использовать аналитические фиты, являющиеся интегрируемыми функциями. Поскольку имеются данные по различным каналам аннигиляции, полученные на различных детекторах, каждый фит производится отдельно.

Проводимый анализ включает в себя данные по следующим каналам по e^+e^- -аннигиляции:

$$e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^- [18], \quad (1)$$

$$e^+e^- \rightarrow 2\pi^+2\pi^- [19], \quad (2)$$

$$e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-2\pi^0 [20–25], \quad (3)$$

$$e^+e^- \rightarrow 3\pi^+3\pi^- [26], \quad (4)$$

$$e^+e^- \rightarrow 2\pi^+2\pi^-2\pi^0 [26]. \quad (5)$$

Для описания набора экспериментальных точек $\{(s_i, f_{\text{exp}}(s_i))\}_{i=1, \dots, N}$ подбирается функция $f_{\text{th}}(s; \{a_1, \dots, a_d\})$, коэффициенты которой определяются минимизацией функционала χ^2 :

$$\chi^2(a_1, \dots, a_d) = \frac{1}{N_{\text{d.f.}}} \sum_{n=1}^N \frac{(f_{\text{exp}}(s_n) - f_{\text{th}}(s_n; \{a_1, \dots, a_d\}))^2}{\delta f_{\text{exp}}(s_n)^2},$$

где $N_{\text{d.f.}} = N - d$ есть число степеней свободы в процедуре фитирования, N – число экспериментальных точек, d – число параметров фитирования; $\delta f_{\text{exp}}(s_n)$ – статистическая ошибка точки n . Качество фитирующей процедуры определяется минимальным значением функционала χ^2 .

Данные для процесса (1) представлены в виде квадрата модуля формфактора $|F_\pi(s)|^2$ в зависимости от энергии \sqrt{s} . Для фитирования используется трехрезонансная модель Гунариса – Сакураи [18; 27], формфактор каждого векторного мезонного резонанса V ($V = \rho, \omega, \rho'$) вычисляется по формуле Брейта – Вигнера:

$$F^{BW}(s, m_V, \Gamma_V) = \frac{m_V^2(1 + d \cdot \Gamma_V/m_V)}{m_V^2 - s + f(s, m_V, \Gamma_V) - im_V \Gamma_V(s)},$$

где

$$\Gamma_V(s) = \Gamma_V \left(\frac{k(s)}{k(m_V^2)} \right)^3, \quad k(s) = \frac{\sqrt{s - 4m_\pi^2}}{2},$$

$$f(s, m_V, \Gamma_V) = \Gamma_V \frac{m_V^2}{k(m_V^2)^3} \left[k^2(s)(h(s) - h(m_V^2)) - (s - m_V^2)k^2(m_V^2)h'(m_V^2) \right],$$

$$h(s) = \frac{2}{\pi} \frac{k(s)}{\sqrt{s}} \ln \left(\frac{\sqrt{s} + 2m_\pi}{2m_\pi} \right), \quad h'(m_V^2) = h'(s)|_{s=m_V^2}.$$

Условие нормировки $F^{BW}(0, m_V, \Gamma_V) = 1$ выполняется автоматически.

Полный пионный формфактор имеет вид

$$F_\pi(s, \{\rho, \omega, \rho'\}) = \frac{F_\pi(s, \{\rho, \omega\}) + \alpha_{\rho'} F^{BW}(s, m_{\rho'}, \Gamma_{\rho'})}{1 + \alpha_{\rho'}},$$

где

$$F_\pi(s, \{\rho, \omega\}) = F^{BW}(s, m_\rho, \Gamma_\rho) \frac{1 + \alpha_\omega F^{BW}(s, m_\omega, \Gamma_\omega)}{1 + \alpha_\omega}.$$

Лучший фит характеризуется значением $\chi^2 = 1,05$.

Сечение в нанобарнах (нбн) пересчитывается из формфактора по стандартной формуле

$$\sigma(s) = |F(s)|^2 \frac{\pi \alpha_{em}}{3s} \left(1 - \frac{4m_\pi^2}{s} \right)^{3/2} 0,3894 \cdot 10^6,$$

где $\alpha_{em} = \frac{1}{137}$ – константа электромагнитного взаимодействия.

Результаты фитирования показаны в табл. 1.

Таблица 1

Результаты фитирования для процесса $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-$, $\chi_{min}^2 = 1,05$

Table 1

The fitting results for the process $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-$, $\chi_{min}^2 = 1.05$

V	$m_V, \Gamma_{\text{ЭВ}}$	$\Gamma_V, \Gamma_{\text{ЭВ}}$	α_V	d
ρ	0,775*	0,148 ± 0,002	1	0,408 ± 0,041
ω	0,782*	0,008*	0,0020 ± 0,0003	
ρ'	1,353 ± 0,024	0,328 ± 0,149	-0,085 ± 0,005	

*Значения зафиксированы и взяты из PDG [26].

Для сечений процессов (2)–(4) введем модель формфактора в виде суммы гауссовых кривых, описывающих широкие резонансы:

$$F_{\text{Gauss}}(s, \{M_i, \sigma_i, \alpha_i\}) = \sum_{i=1}^3 \alpha_i e^{-(\sqrt{s} - M_i)^2 / (2\sigma_i^2)}.$$

Результаты представлены в табл. 2.

Таблица 2

Результаты фитирования для различных процессов e^+e^- -аннигиляции

Table 2

The fitting results for particular e^+e^- -annihilation channels

Процесс	i	M_i , ГэВ	σ_i , ГэВ	α_i
$e^+e^- \rightarrow 2\pi^+2\pi^-$, $\chi^2_{\min} = 1,85$	1	$1,512 \pm 0,003$	$0,242 \pm 0,002$	$1,560 \pm 0,016$
	2	$2,125 \pm 0,016$	$0,231 \pm 0,012$	$0,458 \pm 0,022$
	3	$2,656 \pm 0,025$	$0,808 \pm 0,019$	$0,590 \pm 0,014$
$e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-2\pi^0$, $\chi^2_{\min} = 8,45$	1	$1,786 \pm 0,005$	$0,327 \pm 0,003$	$1,484 \pm 0,029$
	2	$1,070 \pm 0,006$	$0,099 \pm 0,005$	$0,370 \pm 0,017$
	3	$1,343 \pm 0,004$	$0,188 \pm 0,004$	$0,916 \pm 0,012$
$e^+e^- \rightarrow 3\pi^+3\pi^-$, $\chi^2_{\min} = 0,62$	1	$1,789 \pm 0,015$	$0,083 \pm 0,012$	$0,154 \pm 0,020$
	2	$2,050 \pm 0,014$	$0,291 \pm 0,011$	$0,433 \pm 0,017$
$e^+e^- \rightarrow 2\pi^+2\pi^-2\pi^0$, $\chi^2_{\min} = 1,03$	1	$2,348 \pm 0,012$	$0,331 \pm 0,008$	$1,598 \pm 0,085$
	2	$1,740 \pm 0,011$	$0,120 \pm 0,009$	$0,558 \pm 0,035$

При расчете χ^2 использовались только статистические ошибки. Основной вклад в полную ошибку сечения вносит систематическая ошибка, которая будет учтена ниже, а вклад статистических ошибок пропорционален $\frac{1}{N_{d.f}}$ и пренебрежимо мал при большом количестве точек.

Ошибка полного сечения вычисляется по формуле

$$\Delta\sigma(s) = \sqrt{\sum_j \Delta\sigma_j^2(s)},$$

где j – номер канала.

Вычисление R -отношения и функции Адлера

По определению R -отношение – это отношение сечения e^+e^- -аннигиляции в адроны к сечению e^+e^- -аннигиляции в пару мюонов:

$$R(s) = \frac{\sigma_{e^+e^- \rightarrow \text{hadrons}}(s)}{\sigma_{e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-}(s)},$$

где

$$\sigma_{e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-}(s) = \frac{4\pi\alpha_{\text{em}}^2}{3s}.$$

Полное R -отношение – это сумма R -отношений отдельных процессов:

$$R(s) = \sum_i R_i(s), R_i(s) = \frac{\sigma_{e^+e^- \rightarrow \text{hadrons of type } i}(s)}{\sigma_{e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-}(s)}.$$

Здесь суммирование проводится по процессам (1)–(5).

Теоретическая формула полного R -отношения в однопетлевом приближении в ТВ и АТВ имеет вид

$$R_{\text{th}}^{\text{PT/APT}}(s) = N_c \sum_q e_q^2 \left(1 + \frac{\alpha_s^{\text{PT/APT}}(s)}{\pi} \right),$$

где $N_c = 3$; e_q – заряд кварка аромата q . Мы извлекаем ток $j_\mu = \frac{1}{2}(\bar{u}\gamma_\mu u - \bar{d}\gamma_\mu d)$ с изоспином $I = 1$ из полного электромагнитного тока, заменяя фактор

$$\sum_q e_q^2 \rightarrow \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{1}{2}.$$

Результат суммирования приведенных выше модельных вкладов представлен на рис. 1 черной сплошной линией.

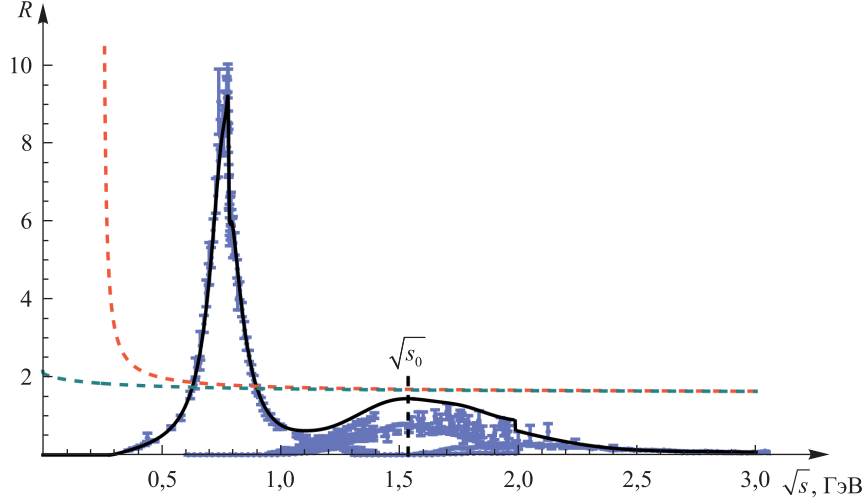


Рис. 1. Полное R -отношение в зависимости от \sqrt{s} при $\sqrt{s} \leq 3$ ГэВ (черная кривая), экспериментальные точки (синие), теоретическая форма R_{th} в ТВ (красная пунктирная линия) и АТВ (голубая пунктирная линия). Порог континуума $s_0 \approx 1,54^2$ ГэВ²

Fig. 1. The full R -ratio in dependence on \sqrt{s} at $\sqrt{s} \leq 3$ GeV (black), the experimental data (blue dots), the theoretical representation R_{th} in the PT (red, dashed) and in the APT (blue, dashed). The continuum threshold is $s_0 \approx 1.54^2$ GeV²

Ошибка R -отношения на интервале от порога $4m_\pi^2$ до s_0 вычисляется через ошибку сечения:

$$\Delta R(s) = \frac{\Delta \sigma_{e^+e^- \rightarrow \text{hadrons}}(s)}{\sigma_{e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-}(s)}.$$

Существуют два способа записи D -функции. Первый является дисперсионным и имеет вид

$$D_{\text{exp}}(Q^2) = Q^2 \int_{4m_\pi^2}^{\infty} \frac{R_{\text{exp-th}}(s) ds}{(s + Q^2)^2}. \quad (6)$$

Второй способ включает операторное разложение в подходах ТВ и АТВ:

$$D_{\text{PT+OPE}}(Q^2) = \frac{3}{2} \left(1 + \frac{\alpha_s(Q^2)}{\pi} + \sum_{n \geq 1} \Gamma(n) \frac{C_{2n}}{Q^{2n}} \right), \quad (7)$$

$$D_{\text{APT+OPE}}(Q^2) = \frac{3}{2} \left(1 + \frac{\mathcal{A}_s(Q^2)}{\pi} + \sum_{n \geq 1} \Gamma(n) \frac{\tilde{C}_{2n}}{Q^{2n}} \right). \quad (8)$$

В качестве стандартного эффективного заряда используется однопетлевое приближение:

$$\alpha_s(Q^2) = \frac{4\pi}{\beta_0} \frac{1}{\ln(Q^2/\Lambda^2)}. \quad (9)$$

Здесь $\beta_0 = 11 - \frac{2N_f}{3}$. Заметим, что в формуле (9) имеется нефизическая сингулярность при $Q^2 = \Lambda^2$.

Эффективный заряд в рамках АТВ имеет вид

$$\mathcal{A}_s(Q^2) = \frac{4\pi}{\beta_0} \left[\frac{1}{\ln(Q^2/\Lambda_{\text{APT}}^2)} - \frac{\Lambda_{\text{APT}}^2}{Q^2 - \Lambda_{\text{APT}}^2} \right]. \quad (10)$$

В выражении (10) дополнительный член исключает сингулярность.

Преобразование Бореля D -функции и правила сумм

Преобразование Бореля от функции $f(x)$ по определению имеет следующий вид:

$$\hat{B}_{x \rightarrow y} [f(x)] = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(-x)^n}{\Gamma(n)} \left[\frac{d^n}{dx^n} f(x) \right]_{x=ny}.$$

Применим его к функции Адлера. Преобразованные по Борелю выражения (6)–(8) запишутся в виде

$$\hat{B}_{Q^2 \rightarrow M^2} [D_{\text{exp}}(Q^2)] = \Phi_{\text{exp}}(M^2) = \int_{4m_\pi^2}^{\infty} R_{\text{exp-th}}(s) \left(1 - \frac{s}{M^2}\right) e^{-s/M^2} \frac{ds}{M^2},$$

$$\hat{B}_{Q^2 \rightarrow M^2} [D_{\text{PT+OPE}}(Q^2)] = \Phi_{\text{PT+OPE}}(M^2) = \frac{3}{2} \left(\frac{\hat{B}_{Q^2 \rightarrow M^2} [\alpha_s(Q^2)]}{\pi} + \frac{C_2}{M^2} + \frac{C_4}{M^4} + \frac{C_6}{M^6} \right),$$

$$\hat{B}_{Q^2 \rightarrow M^2} [D_{\text{APT+OPE}}(Q^2)] = \Phi_{\text{APT+OPE}}(M^2) = \frac{3}{2} \left(\frac{\hat{B}_{Q^2 \rightarrow M^2} [\mathcal{A}_s(Q^2)]}{\pi} + \frac{\tilde{C}_2}{M^2} + \frac{\tilde{C}_4}{M^4} + \frac{\tilde{C}_6}{M^6} \right).$$

Приравнивание обеих форм функции Адлера приводит к правилам сумм для ТВ и АТВ:

$$\Phi_{\text{exp}}(M^2) = \begin{cases} \Phi_{\text{PT+OPE}}(M^2), \\ \Phi_{\text{APT+OPE}}(M^2). \end{cases} \quad (11)$$

Для дальнейших вычислений найдем ошибку $\Delta\Phi_{\text{exp}}(M^2)$:

$$\Delta\Phi_{\text{exp}}(M^2) = \int_{4m_\pi^2}^{\infty} \Delta R(s) \left(1 - \frac{s}{M^2}\right) e^{-s/M^2} \frac{ds}{M^2}.$$

Анализ правил сумм и извлечение конденсатов

Перейдем к обсуждению правил сумм (11). Сравним две формы преобразованной по Борелю функции Адлера с помощью минимизации χ^2 -функционала (варьируются коэффициенты C_2 и C_4):

$$\chi^2(C_2, C_4) = \frac{1}{N_{\text{d.f}}} \sum_{n=1}^N \frac{\left(\Phi_{\text{exp}}(M_n^2) - \Phi_{\text{PT(APT)+OPE}}(M_n^2; \{C_2, C_4\}) \right)^2}{\Delta\Phi_{\text{exp}}(M_n^2)^2}, \quad (12)$$

где $N_{\text{d.f}} = N - d$ есть число степеней свободы, N – количество точек на выбранном интервале, d – число варьируемых параметров (в данном случае $d = 2$).

Отметим, что значение кваркового конденсата зафиксировано [29], и коэффициент C_6 равен:

$$C_6 = -\frac{448\pi^3}{27} \alpha_s \langle \bar{q}q \rangle^2 \approx -0,116 \text{ ГэВ}^6.$$

Главной качественной особенностью результатов (табл. 3, 4 и рис. 2, 3) является антикорреляция вклада короткой струны и глюонного конденсата, отмеченная ранее в нашей работе [30]. На рисунках для сравнения горизонтальными линиями отмечены известные значения глюонного конденсата [1; 29; 31].

С помощью полученных данных проверим совместимость метода преобразования Бореля со стандартным анализом D -функции. Для этого построим зависимость функции Адлера от Q с использованием параметров, полученных путем преобразования Бореля (12) в интервале по $0,5 \text{ ГэВ}^2 \leq M^2 \leq 8 \text{ ГэВ}^2$ (рис. 4). Кривая, построенная с помощью операторного разложения, находится в разумном согласии с дисперсионной кривой при $Q > 1 \text{ ГэВ}$.

Таблица 3

Результаты фитирования на различных интервалах по M^2 в ТВ при $\Lambda = 0,25$ ГэВ

Table 3

The fitting results for different intervals of M^2 in PT with $\Lambda = 0.25$ GeV

Интервал по M^2 , ГэВ	C_2 (с ошибками), ГэВ ²	$\langle \alpha_s GG \rangle / \pi$, ГэВ ⁴	χ^2_{\min}	σ (для $C_2 = 0$)	Антикорреляция между C_2 и глюонным конденсатом
[10/20, 160/20]	$-0,093 \mp 0,054$	$0,025 \pm 0,008$	0,758	3	$-0,153C_2 + 0,011$
[11/20, 120/20]	$-0,076 \mp 0,052$	$0,023 \pm 0,008$	0,553	3	$-0,154C_2 + 0,011$
[12/20, 100/20]	$-0,065 \mp 0,052$	$0,021 \pm 0,008$	0,406	2	$-0,154C_2 + 0,011$
[13/20, 90/20]	$-0,058 \mp 0,053$	$0,020 \pm 0,008$	0,323	2	$-0,154C_2 + 0,011$
[14/20, 80/20]	$-0,052 \mp 0,053$	$0,019 \pm 0,008$	0,265	1	$-0,155C_2 + 0,011$
[15/20, 70/20]	$-0,047 \mp 0,052$	$0,018 \pm 0,008$	0,212	1	$-0,155C_2 + 0,011$
[16/20, 60/20]	$-0,042 \mp 0,051$	$0,017 \pm 0,008$	0,156	1	$-0,155C_2 + 0,011$
[17/20, 50/20]	$-0,037 \mp 0,048$	$0,016 \pm 0,007$	0,097	1	$-0,156C_2 + 0,011$
[18/20, 40/20]	$-0,032 \mp 0,044$	$0,016 \pm 0,007$	0,041	1	$-0,156C_2 + 0,011$
[19/20, 30/20]	$-0,027 \mp 0,036$	$0,015 \pm 0,006$	0,005	1	$-0,156C_2 + 0,011$

Таблица 4

Результаты фитирования на различных интервалах по M^2 в АТВ при $\Lambda = 0,25$ ГэВ

Table 4

The fitting results for different intervals of M^2 in APT with $\Lambda = 0.25$ GeV

Интервал по M^2 , ГэВ	\tilde{C}_2 (с ошибками), ГэВ ²	$\langle \alpha_s GG \rangle / \pi$, ГэВ ⁴	χ^2_{\min}	σ (для $\tilde{C}_2 = 0$)	Антикорреляция между \tilde{C}_2 и глюонным конденсатом
[10/20, 160/20]	$-0,067 \mp 0,053$	$0,026 \pm 0,008$	0,723	2	$-0,159\tilde{C}_2 + 0,016$
[11/20, 120/20]	$-0,048 \mp 0,053$	$0,023 \pm 0,008$	0,508	1	$-0,159\tilde{C}_2 + 0,016$
[12/20, 100/20]	$-0,036 \mp 0,054$	$0,021 \pm 0,009$	0,368	1	$-0,159\tilde{C}_2 + 0,016$
[13/20, 90/20]	$-0,028 \mp 0,057$	$0,020 \pm 0,009$	0,296	1	$-0,159\tilde{C}_2 + 0,016$
[14/20, 80/20]	$-0,022 \mp 0,058$	$0,019 \pm 0,009$	0,244	1	$-0,159\tilde{C}_2 + 0,016$
[15/20, 70/20]	$-0,017 \mp 0,059$	$0,018 \pm 0,009$	0,195	1	$-0,159\tilde{C}_2 + 0,016$
[16/20, 60/20]	$-0,012 \mp 0,058$	$0,017 \pm 0,009$	0,142	1	$-0,159\tilde{C}_2 + 0,016$
[17/20, 50/20]	$-0,006 \mp 0,055$	$0,017 \pm 0,009$	0,086	1	$-0,160\tilde{C}_2 + 0,016$
[18/20, 40/20]	$-0,000 \mp 0,051$	$0,016 \pm 0,008$	0,035	1	$-0,160\tilde{C}_2 + 0,016$
[19/20, 30/20]	$0,006 \mp 0,045$	$0,015 \pm 0,007$	0,004	1	$-0,160\tilde{C}_2 + 0,016$

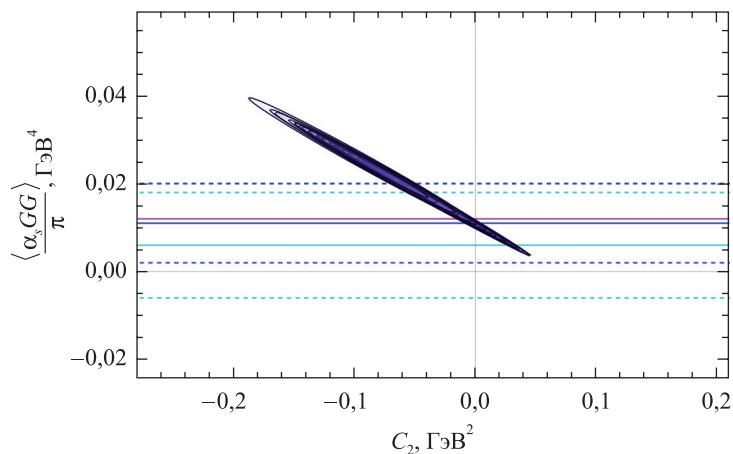


Рис. 2. Анतिकорреляция короткой струны и глюонного конденсата в ТВ при $\Lambda = 0,25 \text{ ГЭВ}$
 Fig. 2. The (anti)correlation between short string and gluon condensate in PT at $\Lambda = 0.25 \text{ GeV}$

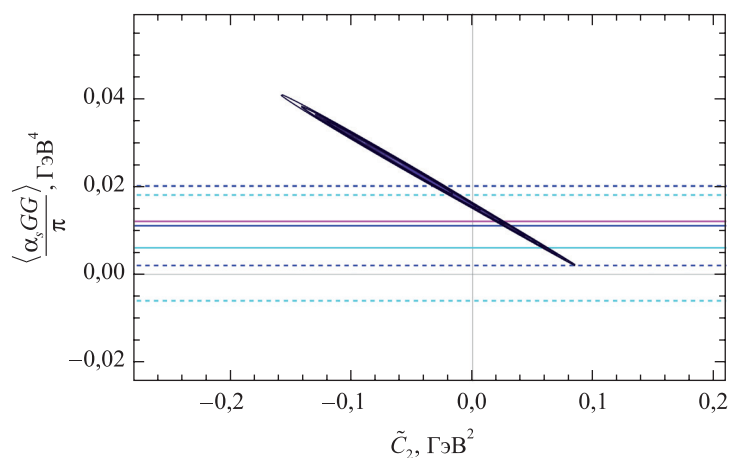


Рис. 3. Анतिकорреляция короткой струны и глюонного конденсата в АТВ при $\Lambda = 0,25 \text{ ГЭВ}$
 Fig. 3. The (anti)correlation between short string and gluon condensate in APT at $\Lambda = 0.25 \text{ GeV}$

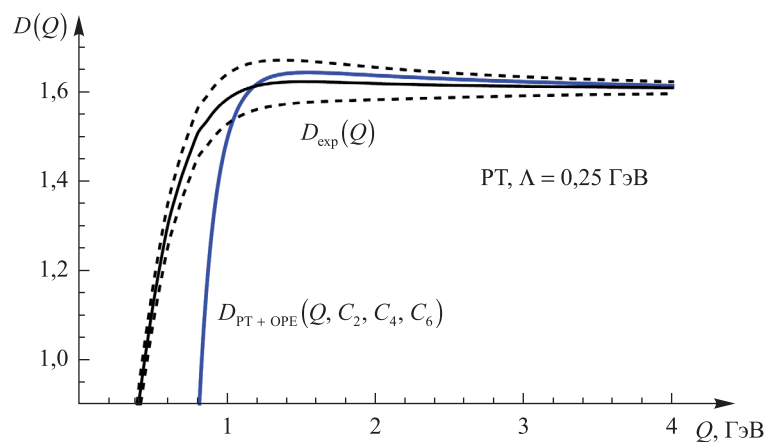


Рис. 4. Стандартная зависимость функции Адлера от Q с полученными значениями C_2 и C_4 (синяя кривая) в сравнении с дисперсионной формулой (черная кривая) с учетом доминирующей систематической ошибки (статистическая пренебрежимо мала)

Fig. 4. The standard dependence of Adler function on Q for PT with received values of C_2 and C_4 (blue) and dispersion curve (black) with taking into account dominant systematic error (statistic error is negligible)

Заключение

Построена модель для R -отношения e^+e^- -аннигиляции, достаточно хорошо описывающая экспериментальные данные. С помощью этой модели получена функция Адлера и ее преобразование Бореля. Извлечены параметры операторного разложения, а именно вклад короткой струны (C_2) и глюонного конденсата (пропорционального C_4). Подтверждено сделанное ранее наблюдение их сильной антикорреляции. Вклад короткой струны лучше совместим с нулем при использовании АТВ.

Построена стандартная зависимость функции Адлера от Q с использованием найденных значений C_2 и C_4 . Кривая, полученная с помощью операторного разложения, находится в разумном согласии с дисперсионной кривой при $Q > 1$ ГэВ.

Библиографические ссылки

1. Shifman MA, Vainshtein AI, Zakharov VI. QCD and resonance physics. Theoretical foundations. *Nuclear Physics B*. 1979; 147(5):385–447. DOI: 10.1016/0550-3213(79)90022-1.
2. Shifman MA, Vainshtein AI, Zakharov VI. QCD and resonance physics. Applications. *Nuclear Physics B*. 1979;147(5): 448–518. DOI: 10.1016/0550-3213(79)90023-3.
3. Chetyrkin KG, Narison S, Zakharov VI. Short-distance tachyonic gluon mass and $1/Q^2$ corrections *Nuclear Physics B*. 1999; 550(1–2):353–374. DOI: 10.1016/S0550-3213(99)00167-4.
4. Narison S, Zakharov VI. Duality between QCD perturbative series and power corrections. *Physics Letters B*. 2009;679(4): 355–361. DOI: 10.1016/j.physletb.2009.07.060.
5. Bodenstein S, Dominguez CA, Eidelman SI, Spiesberger H, Schilcher K. Confronting electron-positron annihilation into hadrons with QCD: an operator product expansion analysis. *Journal of High Energy Physics*. 2012;2012:39. DOI: 10.1007/JHEP01(2012)039.
6. Eichten E, Gottfried K, Kinoshita T, Kogut J, Lane KD, Yan T-M. Spectrum of charmed quark-antiquark bound states. *Physical Review Letters*. 1975;34(6):369. Erratum: [*Physical Review Letters*. 1276(1976);36]. DOI: 10.1103/PhysRevLett.34.369.
7. Kataev AL, Parente G, Sidorov AV. Improved fits to the xF_3 CCFR data at the next-to-next-to-leading order and beyond. *Physics of Particles and Nuclei*. 2007;38(6):827. DOI: 10.1134/S1063779607060068.
8. Khandramai VL, Pasechnik RS, Shirkov DV, Solovtsova OP, Teryaev OV. Four-loop QCD analysis of the Bjorken sum rule. *Physics Letters B*. 2012;706(4–5):340–344. DOI: 10.1016/j.physletb.2011.11.023.
9. Spiesberger H. An operator product expansion analysis of e^+e^- annihilation data. *Modern Physics Letters A*. 2013;28(25): 1360009. DOI: 10.1142/S0217732313600092.
10. Solovtsova OP. Manifestation of quark-hadron duality in e^+e^- annihilation into hadrons. *Nonlinear phenomena in complex systems*. 2014;17(4):445–447.
11. Shirkov DV, Solovtsov IL. Analytic Model for the QCD Running Coupling with Universal $\bar{\alpha}_s(0)$ Value. *Physical Review Letters*. 1997;79:1209. DOI: 10.1103/PhysRevLett.79.1209.
12. Milton KA, Solovtsov IL. Analytic perturbation theory in QCD and Schwinger’s connection between the β function and the spectral density. *Physical Review D*. 1997;55:5295. DOI: 10.1103/PhysRevD.55.5295.
13. Shirkov DV, Solovtsov IL. Ten years of the analytic perturbation theory in QCD. *Theoretical and Mathematical Physics*. 2007; 150(1):152–176. DOI: 10.4213/tmf5971.
14. Milton KA, Solovtsova OP. Analytic perturbation theory: a new approach to the analytic continuation of the strong coupling constant α_s into the timelike region. *Physical Review D*. 1998;57:5402. DOI: 10.1103/PhysRevD.57.5402.
15. Pasechnik RS, Shirkov DV, Teryaev OV, Solovtsova OP, Khandramai VL. Nucleon spin structure and perturbative QCD frontier on the move. *Physical Review D*. 2010;81(1):016010. DOI: 10.1103/PhysRevD.81.016010.
16. Sidorov AV, Solovtsova OP. The QCD Analysis of xF_3 structure function based on the analytic approach. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*. 2013;16(4):397–402.
17. Sidorov AV, Solovtsova OP. QCD analysis of the F_3 structure function based on inverse Mellin transform in analytic perturbation theory. *Physics of Particles and Nuclei Letters*. 2017;14(1):1–8. DOI: 10.1134/S154747711701023X.
18. Barkov LM, Chilingarov AG, Eidelman SI, Khazin BI, Lelchuk MYu, Okhapkin VS, et al. Electromagnetic pion form factor in the timelike region. *Nuclear Physics B*. 1985;256:365–384. DOI: 10.1016/0550-3213(85)90399-2.
19. Aubert B, Barate R, Boutigny D, Couderc F, Karyotakis Y, Lees JP, et al. (BABAR Collaboration). $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^+\pi^-$, $K^+K^-\pi^+\pi^-$, and $K^+K^-K^+K^-$ cross sections at center-of-mass energies 0.5–4.5 GeV measured with initial-state radiation. *Physical Review D*. 2005;71:052001. DOI: 10.1103/PhysRevD.71.052001.
20. Whalley MR. A compilation of data on hadronic total cross sections in e^+e^- interactions. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*. 2003;29(12A):A1–A133. DOI: 10.1088/0954-3899/29/12A/R01.
21. Kurdadze LM, Lel’Chuk MYu, Pakhtusova EV, Sidorov VA, Skriniskii AN, Chilingarov AG, et al. Study of the reaction $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0\pi^0$ at $(2e)$ up to 1.4 GeV. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*. 1986;43:643–645.
22. Dolinsky SI, Druzhinin VP, Dubrovin MS, Golubev VB, Ivanchenko VN, Pakhtusova EV, et al. Summary of experiments with the neutral detector at the e^+e^- storage ring VEPP-2M. *Physics Reports*. 1991;202(3):99–170. DOI: 10.1016/0370-1573(91)90127-8.
23. Ачасов МН, Бару СЕ, Белобородов КИ, Бердюгин АВ, Боженок АВ, Богданчиков АГ и др. *Исследование процессов $e^+e^- \rightarrow 4\pi$ в области энергии 0,98–1,38 ГэВ с детектором СНД*. Новосибирск: Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН; 2001.
24. Bisello B, Busetto G, Castro A, Nigro M, Pescara L, Sartori P, et al. (DM2 Collaboration). DM2 results on e^+e^- annihilation into multihadrons in the 1350–2400 MeV energy range. In: Phua KK, Yamaguchi Y, editors. *Rochester Conference on High-Energy Physics. 25th International Conference on High-Energy Physics; 1990 August 2–8; Singapore, Singapore*. Singapore: World Scientific; 1991. LAL-90-35.

25. Cosme G, Dudelzak B, Grelaud B, Jean-Marie B, Jullian S, Lalanne D, et al. Hadronic cross sections study in e^+e^- collisions from 1.350 GeV to 2.125 GeV. *Nuclear Physics B*. 1979;152(2):215–231. DOI: 10.1016/0550-3213(79)90100-7.
26. Aubert B, Barate R, Boutigny D, Couderc F, Karyotakis Y, Lees JP, et al. The $e^+e^- \rightarrow 3(\pi^+\pi^-)$, $2(\pi^+\pi^-\pi^0)$ and $K^+K^-2(\pi^+\pi^-)$ cross sections at center-of-mass energies from production threshold to 4.5 GeV measured with initial-state radiation. *Physical Review D*. 2006;73(5):052003. DOI: 10.1103/PhysRevD.73.052003.
27. Gounaris GJ, Sakurai JJ. Finite-width corrections to the vector-meson-dominance prediction for $\rho \rightarrow e^+e^-$. *Physical Review Letters*. 1968;21:244. DOI: 10.1103/PhysRevLett.21.244.
28. Olive KA, Agashe K, Amsler C, Antonelli M, Arguin J-F, Asner DM, et al. (Particle Data Group). Review of particle physics. *Chinese Physics C*. 2014;38(9):090001. DOI: 10.1088/1674-1137/38/9/090001.
29. Geshkenbein BV, Ioffe BL, Zyablyuk KN. Check of QCD based on the τ -decay data analysis in the complex q^2 plane. *Physical Review D*. 2001;64(9):093009. DOI: 10.1103/PhysRevD.64.093009.
30. Kozhevnikova ME, Oganesian AG, Teryaev OV. Search for short strings in e^+e^- annihilation. *EPJ Web Conferences*. 2017;138:02006. DOI: 10.1051/epjconf/201713802006.
31. Ioffe BL, Zyablyuk KN. Gluon condensate in charmonium sum rules with three-loop corrections. *European Physical Journal C*. 2003;27(2):229–241. DOI: 10.1140/epjc/s2002-01099-8.

References

1. Shifman MA, Vainshtein AI, Zakharov VI. QCD and resonance physics. Theoretical foundations. *Nuclear Physics B*. 1979;147(5):385–447. DOI: 10.1016/0550-3213(79)90022-1.
2. Shifman MA, Vainshtein AI, Zakharov VI. QCD and resonance physics. Applications. *Nuclear Physics B*. 1979;147(5):448–518. DOI: 10.1016/0550-3213(79)90023-3.
3. Chetyrkin KG, Narison S, Zakharov VI. Short-distance tachyonic gluon mass and $1/Q^2$ corrections *Nuclear Physics B*. 1999;550(1–2):353–374. DOI: 10.1016/S0550-3213(99)00167-4.
4. Narison S, Zakharov VI. Duality between QCD perturbative series and power corrections. *Physics Letters B*. 2009;679(4):355–361. DOI: 10.1016/j.physletb.2009.07.060.
5. Bodenstern S, Dominguez CA, Eidelman SI, Spiesberger H, Schilcher K. Confronting electron-positron annihilation into hadrons with QCD: an operator product expansion analysis. *Journal of High Energy Physics*. 2012;2012:39. DOI: 10.1007/JHEP01(2012)039.
6. Eichten E, Gottfried K, Kinoshita T, Kogut J, Lane KD, Yan T-M. Spectrum of charmed quark-antiquark bound states. *Physical Review Letters*. 1975;34(6):369. Erratum: [*Physical Review Letters*. 1276(1976);36]. DOI: 10.1103/PhysRevLett.34.369.
7. Kataev AL, Parente G, Sidorov AV. Improved fits to the xF_3 CCFR data at the next-to-next-to-leading order and beyond. *Physics of Particles and Nuclei*. 2007;38(6):827. DOI: 10.1134/S1063779607060068.
8. Khandramai VL, Pasechnik RS, Shirkov DV, Solovtsova OP, Teryaev OV. Four-loop QCD analysis of the Bjorken sum rule. *Physics Letters B*. 2012;706(4–5):340–344. DOI: 10.1016/j.physletb.2011.11.023.
9. Spiesberger H. An operator product expansion analysis of e^+e^- annihilation data. *Modern Physics Letters A*. 2013;28(25):1360009. DOI: 10.1142/S0217732313600092.
10. Solovtsova OP. Manifestation of quark-hadron duality in e^+e^- annihilation into hadrons. *Nonlinear phenomena in complex systems*. 2014;17(4):445–447.
11. Shirkov DV, Solovtsov IL. Analytic Model for the QCD Running Coupling with Universal $\bar{\alpha}_s(0)$ Value. *Physical Review Letters*. 1997;79:1209. DOI: 10.1103/PhysRevLett.79.1209.
12. Milton KA, Solovtsov IL. Analytic perturbation theory in QCD and Schwinger's connection between the β function and the spectral density. *Physical Review D*. 1997;55:5295. DOI: 10.1103/PhysRevD.55.5295.
13. Shirkov DV, Solovtsov IL. Ten years of the analytic perturbation theory in QCD. *Theoretical and Mathematical Physics*. 2007;150(1):152–176. DOI: 10.4213/tmf5971.
14. Milton KA, Solovtsova OP. Analytic perturbation theory: a new approach to the analytic continuation of the strong coupling constant α_s into the timelike region. *Physical Review D*. 1998;57:5402. DOI: 10.1103/PhysRevD.57.5402.
15. Pasechnik RS, Shirkov DV, Teryaev OV, Solovtsova OP, Khandramai VL. Nucleon spin structure and perturbative QCD frontier on the move. *Physical Review D*. 2010;81(1):016010. DOI: 10.1103/PhysRevD.81.016010.
16. Sidorov AV, Solovtsova OP. The QCD Analysis of xF_3 structure function based on the analytic approach. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*. 2013;16(4):397–402.
17. Sidorov AV, Solovtsova OP. QCD analysis of the F_3 structure function based on inverse Mellin transform in analytic perturbation theory. *Physics of Particles and Nuclei Letters*. 2017;14(1):1–8. DOI: 10.1134/S154747711701023X.
18. Barkov LM, Chilingarov AG, Eidelman SI, Khazin BI, Lelchuk MYu, Okhapkin VS, et al. Electromagnetic pion form factor in the timelike region. *Nuclear Physics B*. 1985;256:365–384. DOI: 10.1016/0550-3213(85)90399-2.
19. Aubert B, Barate R, Boutigny D, Couderc F, Karyotakis Y, Lees JP, et al. (BABAR Collaboration). $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^+\pi^-$, $K^+K^-\pi^+\pi^-$, and $K^+K^-K^+K^-$ cross sections at center-of-mass energies 0.5–4.5 GeV measured with initial-state radiation. *Physical Review D*. 2005;71:052001. DOI: 10.1103/PhysRevD.71.052001.
20. Whalley MR. A compilation of data on hadronic total cross sections in e^+e^- interactions. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*. 2003;29(12A):A1–A133. DOI: 10.1088/0954-3899/29/12A/R01.
21. Kurdadze LM, Le'Chuk MYu, Pakhtusova EV, Sidorov VA, Skriniskii AN, Chilingarov AG, et al. Study of the reaction $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0\pi^0$ at (2ℓ) up to 1.4 GeV. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*. 1986;43:643–645.
22. Dolinsky SI, Druzhinin VP, Dubrovin MS, Golubev VB, Ivanchenko VN, Pakhtusova EV, et al. Summary of experiments with the neutral detector at the e^+e^- storage ring VEPP-2M. *Physics Reports*. 1991;202(3):99–170. DOI: 10.1016/0370-1573(91)90127-8.
23. Achasov MN, Baru SE, Beloborodov KI, Berdyugin AV, Bozhenok AV, Bogdanchikov AG, et al. $e^+e^- \rightarrow 4\pi$ processes investigation in the energy range 0.98–1.38 GeV with SND detector. Novosibirsk: Budker Institute of Nuclear Physics of Siberian Branch Russian Academy of Sciences; 2001. Russian.

24. Bisello B, Busetto G, Castro A, Nigro M, Pescara L, Sartori P, et al. (DM2 Collaboration). DM2 results on e^+e^- annihilation into multihadrons in the 1350–2400 MeV energy range. In: Phua KK, Yamaguchi Y, editors. *Rochester Conference on High-Energy Physics. 25th International Conference on High-Energy Physics; 1990 August 2–8; Singapore, Singapore*. Singapore: World Scientific; 1991. LAL-90-35.
25. Cosme G, Dudelzak B, Grelaud B, Jean-Marie B, Jullian S, Lalanne D, et al. Hadronic cross sections study in e^+e^- collisions from 1.350 GeV to 2.125 GeV. *Nuclear Physics B*. 1979;152(2):215–231. DOI: 10.1016/0550-3213(79)90100-7.
26. Aubert B, Barate R, Boutigny D, Couderc F, Karyotakis Y, Lees JP, et al. The $e^+e^- \rightarrow 3(\pi^+\pi^-)$, $2(\pi^+\pi^-\pi^0)$ and $K^+K^-2(\pi^+\pi^-)$ cross sections at center-of-mass energies from production threshold to 4.5 GeV measured with initial-state radiation. *Physical Review D*. 2006;73(5):052003. DOI: 10.1103/PhysRevD.73.052003.
27. Gounaris GJ, Sakurai JJ. Finite-width corrections to the vector-meson-dominance prediction for $\rho \rightarrow e^+e^-$. *Physical Review Letters*. 1968;21:244. DOI: 10.1103/PhysRevLett.21.244.
28. Olive KA, Agashe K, Amsler C, Antonelli M, Arguin J-F, Asner DM, et al. (Particle Data Group). Review of particle physics. *Chinese Physics C*. 2014;38(9):090001. DOI: 10.1088/1674-1137/38/9/090001.
29. Geshkenbein BV, Ioffe BL, Zyablyuk KN. Check of QCD based on the τ -decay data analysis in the complex q^2 plane. *Physical Review D*. 2001;64(9):093009. DOI: 10.1103/PhysRevD.64.093009.
30. Kozhevnikova ME, Oganesian AG, Teryaev OV. Search for short strings in e^+e^- -annihilation. *EPJ Web Conferences*. 2017;138:02006. DOI: 10.1051/epjconf/201713802006.
31. Ioffe BL, Zyablyuk KN. Gluon condensate in charmonium sum rules with three-loop corrections. *European Physical Journal C*. 2003;27(2):229–241. DOI: 10.1140/epjc/s2002-01099-8.

Статья поступила в редколлегию 09.04.2019.
Received by editorial board 09.04.2019.

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССОВ ДРЕЛЛА – ЯНА В ЭКСПЕРИМЕНТЕ «КОМПАКТНЫЙ МЮОННЫЙ СОЛЕНОИД» НА БОЛЬШОМ АДРОННОМ КОЛЛАЙДЕРЕ

И. Н. ГОРБУНОВ¹⁾, А. В. ЛАНЁВ¹⁾, В. В. ШАЛАЕВ^{1),2)}, С. В. ШМАТОВ¹⁾

(от имени коллаборации CMS)

¹⁾Объединенный институт ядерных исследований,
ул. Жолио Кюри, 6, 141980, г. Дубна, Московская область, Россия

²⁾Государственный университет «Дубна»,
ул. Университетская, 19, 141982, г. Дубна, Московская область, Россия

Представлены результаты измерений дифференциальных и дважды дифференциальных сечений ($\frac{d\sigma}{dM}$ и $\frac{d^2\sigma}{dMdy}$) процессов Дрелла – Яна в протон-протонных столкновениях при энергии 7 и 8 ТэВ в системе центра масс. Дважды дифференциальные сечения $\frac{d^2\sigma}{dMdy}$ изучены в диапазоне значений переменной Бьёркена $0,0003 < x_{\pm} < 1,0$ и масштаба взаимодействий $600 < Q^2 < 750\,000$ (ГэВ²/с²), а дифференциальное сечение $\frac{d\sigma}{dM}$ исследовано в более широком диапазоне: $300 < Q^2 < 3\,000\,000$ (ГэВ²/с²). Измерения выполнены в объединенном канале с парой электронов и мюонов на данных эксперимента «Компактный мюонный соленоид» (CMS), набранных во время первого этапа работы Большого адронного коллайдера (ЛHC) в 2011 и 2012 гг. и соответствующих интегральной светимости 5,1 фбн⁻¹ при 7 ТэВ и 20,6 фбн⁻¹ при 8 ТэВ. Также обсуждаются измерения величин асимметрии вылета лептонов «вперед-назад» A_{FB} и угловых коэффициентов A_i . Полученные результаты в пределах погрешности совпадают с предсказаниями стандартной модели в первом и втором порядках теории возмущений.

Ключевые слова: Большой адронный коллайдер; эксперимент CMS; процесс Дрелла – Яна; угловые коэффициенты; дифференциальное сечение; асимметрия «вперед-назад».

Образец цитирования:

Горбунов И.Н., Ланёв А.В., Шалаев В.В., Шматов С.В. Изучение процессов Дрелла – Яна в эксперименте «Компактный мюонный соленоид» на Большом адронном коллайдере. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2019;2:16–25.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-16-25>

For citation:

Gorbunov IN, Lanyov AV, Shalaev VV, Shmatov SV. Study of Drell – Yan processes with the compact muon solenoid experiment at Large Hadron Collider. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2019;2:16–25. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-16-25>

Авторы:

Илья Николаевич Горбунов – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник научно-экспериментального отдела физики на CMS лаборатории физики высоких энергий им. В. И. Векслера и А. М. Балдина.

Александр Викторович Ланёв – кандидат физико-математических наук; ведущий научный сотрудник лаборатории физики высоких энергий им. В. И. Векслера и А. М. Балдина.

Владислав Владимирович Шалаев – инженер научно-экспериментального отдела физики на CMS лаборатории физики высоких энергий им. В. И. Векслера и А. М. Балдина¹⁾, аспирант кафедры биофизики факультета естественных и инженерных наук²⁾. Научный руководитель – С. В. Шматов.

Сергей Владимирович Шматов – кандидат физико-математических наук; начальник сектора № 1 новой физики на CMS.

Authors:

Ilya N. Gorbunov, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the scientific experimental department of physics at CMS, Veksler and Baldin laboratory of high energy physics.
ilya.gorbunov@cern.ch

Alexander V. Lanyov, PhD (physics and mathematics); leading researcher at the Veksler and Baldin laboratory of high energy physics.

alexander.lanyov@cern.ch

Vladislav V. Shalaev, engineer at the scientific experimental department of physics at CMS, Veksler and Baldin laboratory of high energy physics^a, postgraduate student at the department of biophysics, faculty of natural and engineering sciences^b.
vladislav.shalaev@cern.ch

Sergey V. Shmatov, PhD (physics and mathematics); head at the department No. 1 of a new physics at CMS.

shmatov@cern.ch

STUDY OF DRELL – YAN PROCESSES WITH THE COMPACT MUON SOLENOID EXPERIMENT AT LARGE HADRON COLLIDER

I. N. GORBUNOV^a, A. V. LANYOV^a, V. V. SHALAEV^{a,b}, S. V. SHMATOV^a

(on behalf of the CMS Collaboration)

^aJoint Institute for Nuclear Research, 6 Zholio Kyuri Street, Dubna 141980, Moscow region, Russia

^bDubna State University, 6 Universitetskaya Street, Dubna 141982, Moscow region, Russia

Corresponding author: V. V. Shalaev (vladislav.shalaev@cern.ch)

The results of measurements of the differential and double-differential cross sections ($\frac{d\sigma}{dM}$ and $\frac{d^2\sigma}{dMdy}$) of Drell – Yan processes in proton-proton collisions at 7 and 8 TeV in c.m.s. are presented. The double-differential cross section $\frac{d^2\sigma}{dMdy}$ has been studied in the range of the Bjorken scaling variable values $0.0003 < x_{\pm} < 1.0$ and the evolution scale $600 < Q^2 < 750\,000$ (GeV^2/c^2), and the differential cross section $\frac{d\sigma}{dM}$ has been explored in a wider range $300 < Q^2 < 3\,000\,000$ (GeV^2/c^2). The measurements were performed in a combined channel with a pair of electrons and muons and are based on the experimental data of the Compact Muon Solenoid (CMS), collected during the first Large Hadron Collider (LHC) Run in 2011 and 2012. The statistic is corresponding to integrated luminosity of 5.1 fb^{-1} at 7 TeV and 20.6 fb^{-1} at 8 TeV. The measurements of the lepton forward-backward asymmetry A_{FB} and the angular coefficients A_i are also discussed. These results agree within the uncertainty with the predictions of the standard model in the leading- and next-to-leading orders.

Keywords: Large Hadron Collider; CMS experiment; Drell – Yan process; differential cross section; angular coefficients; forward-backward asymmetry.

Введение

На сегодняшний день абсолютное большинство наблюдаемых явлений в физике элементарных частиц может быть успешно описано в рамках стандартной модели (СМ). На протяжении нескольких десятилетий экспериментальные данные подтверждают справедливость данной теории и ее предсказательную силу. Вместе с тем, несмотря на отсутствие опровержений прогнозов СМ, их удивительную точность и открытие последнего краеугольного камня – бозона Хиггса, эта модель обладает рядом внутренних недостатков и нерешенных проблем (проблема иерархий энергетических масштабов и присутствия темной материи во Вселенной, неясный механизм СР-нарушения, отсутствие в СМ гравитационных взаимодействий, большое количество свободных параметров и др.), что не позволяет считать ее окончательным вариантом теории. Необходимость решения данных проблем жестко диктует выход за рамки СМ, т. е. приводит к задаче построения более общей теории. К настоящему времени уже разработано множество теоретических сценариев, позволяющих расширить СМ и с определенным успехом разрешить описанные выше проблемы. Так, некоторыми из них предсказывается рождение ненаблюдаемых пока калибровочных бозонов и проявление прочих эффектов новой физики при возрастании энергии взаимодействия.

В целях проверки справедливости СМ при больших энергетических масштабах, а также поиска новой физики, выходящей за рамки данной теории, осуществляется глобальная программа экспериментальных исследований (см., например, обзоры [1–5]) на различных ускорительных комплексах, в частности в одном из двух многоцелевых экспериментов на Большом адронном коллайдере «Компактный мюонный соленоид» (CMS) [6]. Традиционным направлением является изучение закономерностей рождения пар лептонов при аннигиляции кварк-антикварковой пары посредством обмена переносчиками электрослабого взаимодействия $q\bar{q} \rightarrow \gamma^*/Z \rightarrow l^+l^-$ – процесса Дрелла – Яна [7] (рис. 1).

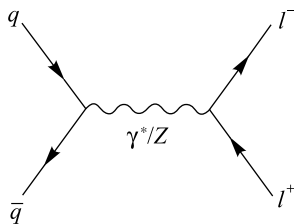


Рис. 1. Рождение пары лептонов в процессе Дрелла – Яна

Fig. 1. Drell – Yan dilepton production

Процессы подобного рода интересны для изучения на ускорителе ЛHC по ряду причин. Во-первых, это проверка теоретических расчетов и увеличение точности измерения сечений процесса Дрелла – Яна. На данный момент теоретические вычисления этих сечений проводятся в первом (NLO) и втором (NNLO) порядках теории возмущений и достигают точности $\sim 1\%$ в области масс Z-бозона ($\sim 90\text{ ГэВ}$), так что

сравнение предсказываемых значений с измеренными в эксперименте позволяет оценить наши знания о природе процесса Дрелла – Яна и осуществить поиск отклонений от предсказаний СМ, а также стимулирует дальнейшие вычисления в рамках пертурбативной теории КХД. Во-вторых, данный процесс имеет простую экспериментальную топологию (сигнатуру) – два изолированных лептона с большими поперечными импульсами в конечном состоянии. Такая топология событий обеспечивает как высокую эффективность регистрации лептонной пары, так и надежное подавление фоновых событий. Большая накопленная статистика позволяет с высокой точностью выполнить измерение дифференциальных сечений рождения мюонных пар в процессах Дрелла – Яна и изучить их угловые распределения в зависимости от быстроты и инвариантной массы мюонной пары. Также можно использовать процесс Дрелла – Яна для оценки технических характеристик детектора (энергетического разрешения, эффективностей реконструкции и идентификации лептонов).

Таким образом, измерения характеристик процесса Дрелла – Яна (сечений, их энергетических зависимостей, угловых распределений и пространственной асимметрии частиц в конечном состоянии) очень важны для реализации различных исследований в рамках физической программы ЛНС. Они являются не только чувствительным инструментом для поиска сигналов новой физики за рамками СМ, но и одним из источников фонов при изучении парного рождения топ-кварков, калибровочных бозонов, поиске и измерении свойств бозона Хиггса в канале распада на 4 лептона.

В данной работе приведен краткий обзор главных результатов по исследованию закономерностей рождения пар лептонов в процессе Дрелла – Яна, основанных на данных, набранных в 2011–2012 гг. во время первого этапа работы ЛНС (Run 1) на сталкивающихся протонных пучках при энергии 7 и 8 ТэВ в системе центра масс. Полный объем проанализированных данных соответствует интегральной светимости $5,1 \text{ фбн}^{-1}$ при 7 ТэВ и $20,6 \text{ фбн}^{-1}$ при 8 ТэВ.

Дифференциальное сечение процессов Дрелла – Яна

На рис. 2 и 3 представлены соответственно дифференциальное $\frac{1}{\sigma_Z} \frac{d\sigma}{dM}$ и дважды дифференциальное сечение $\frac{1}{\sigma_Z} \frac{d\sigma}{dM} \frac{d\sigma}{dy}$ пар лептонов $\mu^+\mu^-$ и e^+e^- при $\sqrt{s} = 8 \text{ ТэВ}$ в процессах Дрелла – Яна (M – инвариантная масса лептонной пары, y – ее быстрота) [8]. Величины измеренных сечений находятся в хорошем согласии с результатами NNLO-вычислений в рамках СМ во всем диапазоне инвариантных масс ($20 < M < 1500 \text{ ГэВ}/c^2$) и быстрот ($0 < |y| < 2,4$). В частности, в области Z-пика суммарная относительная неопределенность измерения дифференциального сечения составляет менее 6 %, что является самым точным измерением этой характеристики на коллайдерах на данный момент.

Измерения сопоставлены с предсказаниями FEWZ, использующими различные наборы функций распределений партонов PDF (NNPDF2.1, CT10) (рис. 3). Точные измерения дважды дифференциальных сечений могут быть применены для улучшения существующих оценок PDF.

Увеличение энергии взаимодействия с 7 до 8 ТэВ обеспечивает возможность измерения энергетической зависимости сечений процесса Дрелла – Яна. Следует отметить, что эти сечения зависят от разных теоретических параметров, таких как бегущая константа связи КХД, PDF, масштабы перенормировки и факторизации КХД. Теоретические погрешности, связанные с неопределенностями этих параметров, существенны, но коррелированы с энергией, поэтому измерения отношений этих сечений, нормированных на сечение рождения в области пика Z-бозона, могут улучшить точность сравнения результатов измерения с предсказаниями СМ.

Таким образом, энергетическая зависимость сечений $\frac{d\sigma}{dM}$ и $\frac{d^2\sigma}{dMdy}$ является важной характеристикой для тестирования PDF, которые к тому же чрезвычайно чувствительны к эффектам высших порядков КХД. Указанные зависимости изучались с помощью измерения отношения сечений, полученных при $\sqrt{s} = 7 \text{ ТэВ}$ и $\sqrt{s} = 8 \text{ ТэВ}$ (рис. 4). Для уменьшения систематических погрешностей сечения во всей области M нормированы на сечения в области M_Z .

Форма распределений не противоречит ожиданиям СМ с учетом зависимости PDF от энергетического масштаба взаимодействий Q и переменной Бьёркена x : в области малых x наблюдается линейный рост отношения дифференциальных сечений к функции логарифма массы (при этом в области Z-пика отношение равно 1 по определению), а начиная с $x \sim 0,3$ ($M \sim 200 \text{ ГэВ}/c^2$) следует быстрый рост, обусловленный повышением доступного масштаба взаимодействия для энергии столкновений протонов 8 ТэВ. Мы можем констатировать согласие в пределах ошибок измерения отношения R с теоретическим предсказанием (вероятность согласия составляет 87 %).

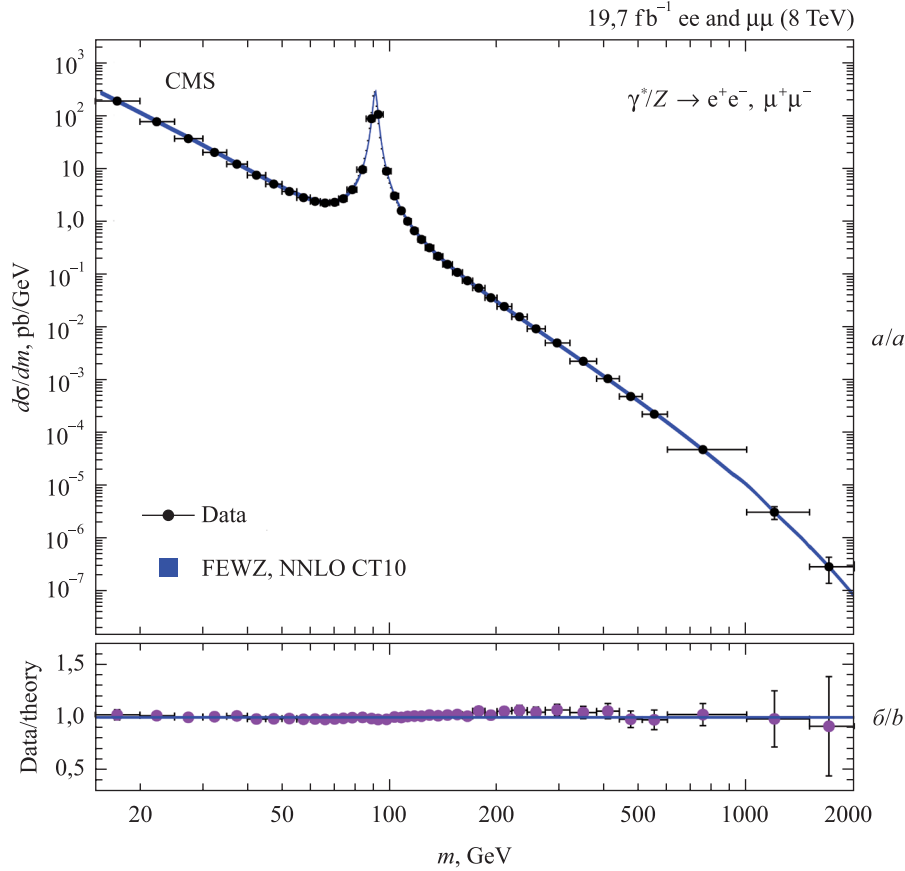


Рис. 2. Дифференциальное сечение $\frac{1}{\sigma_Z} \frac{d\sigma}{dm}$ рождения пар лептонов ($\mu^+\mu^-$ и e^+e^-) в процессах Дрелла – Яна [8] (a); сравнение экспериментальных данных и предсказаний СМ в NNLO (b)

Fig. 2. The Drell – Yan differential cross section as measured in the combined dilepton channel and as predicted by NNLO calculations [8] (a); comparison of experimental data and predictions of SM in NNLO (b)

Исследование данного отношения в различных интервалах M показало, что при небольших значениях масс оно практически не зависит от быстроты пары, но с увеличением значения массы, начиная с области Z -пика, демонстрирует довольно сильный рост до 20 %. Если в области масс, меньших массы Z -бозона, теоретические предсказания PDF NNLO NNPDF2.1 находятся в более тесном согласии с измеренными значениями, чем PDF NNLO CT10, то в районе Z -пика в обоих случаях наблюдается небольшая разница между данными и теорией (в центральной области абсолютной быстроты). В областях с большой быстротой и большой массой измерения находятся на нижнем крае диапазона неопределенности предсказаний теории ввиду ограниченности статистики при $\sqrt{s} = 7$ ТэВ.

Угловые коэффициенты A_i

Также важным направлением исследований процессов Дрелла – Яна, позволяющим извлечь информацию о PDF, эффектах высших порядков КХД и влиянии поляризации протонов на сечение процесса, является измерение угловых коэффициентов A_i в уравнении для дважды дифференциального сечения. В нулевом порядке теории возмущений уравнение выглядит следующим образом:

$$\frac{d^2\sigma}{d\theta^* d\varphi^*} = \sum_{i=0}^5 \sigma^i = 1 + \cos^2 \theta^* + \frac{1}{2} A_0 (1 - 3 \cos^2 \theta^*) + A_1 \sin(2\theta^*) \cos \varphi^* + \frac{1}{2} A_2 \sin^2 \theta^* \cos(2\varphi^*) + A_3 \sin \theta^* \cos \varphi^* + A_4 \cos \varphi^*,$$

где θ^* и φ^* – азимутальный и полярный углы в системе покоя Z -бозона (в данном случае – система Коллинза – Сопера); A_0, A_1, \dots, A_4 – коэффициенты, являющиеся функциями кинематических переменных Z -бозона (q_T, y, M).

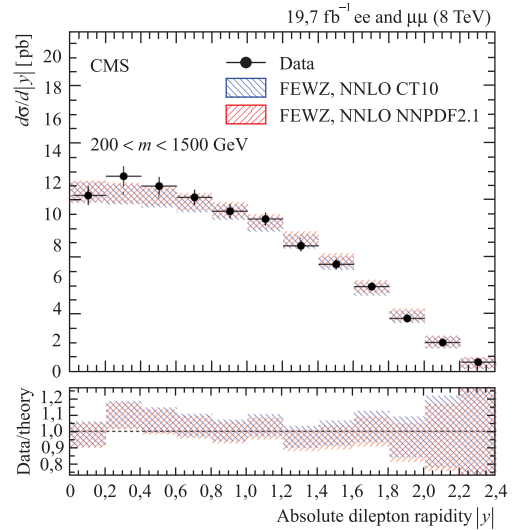
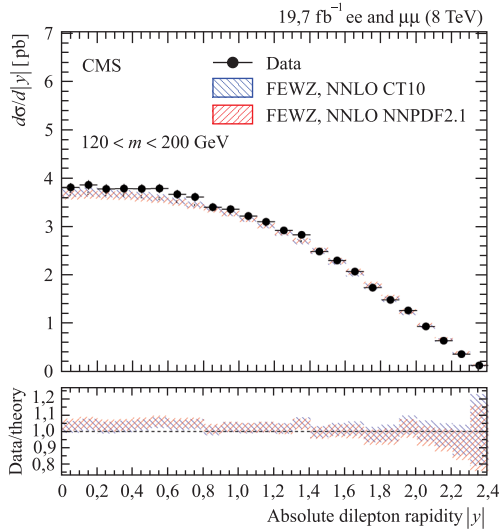
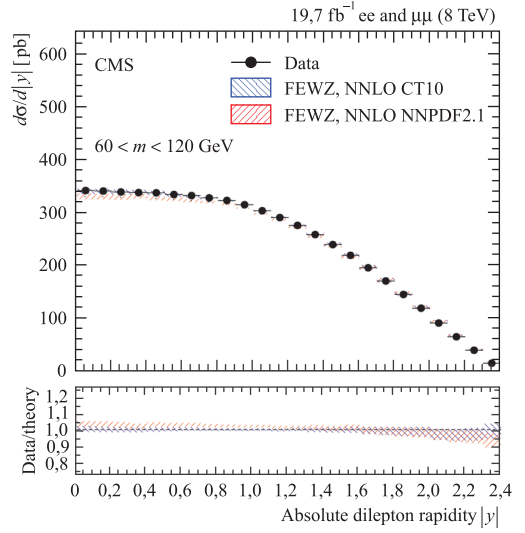
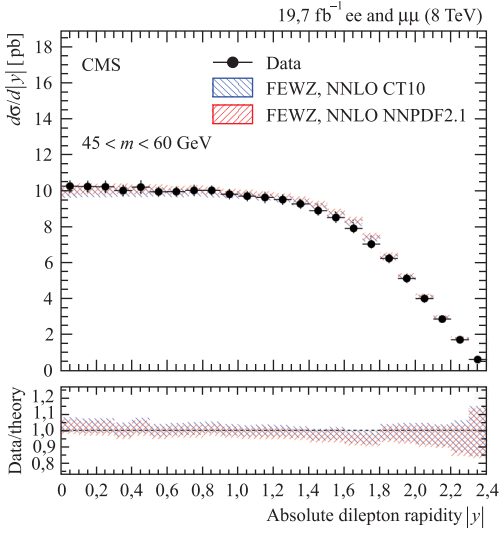
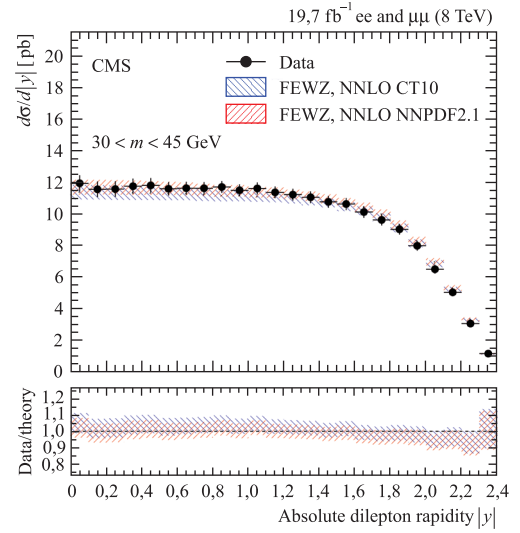
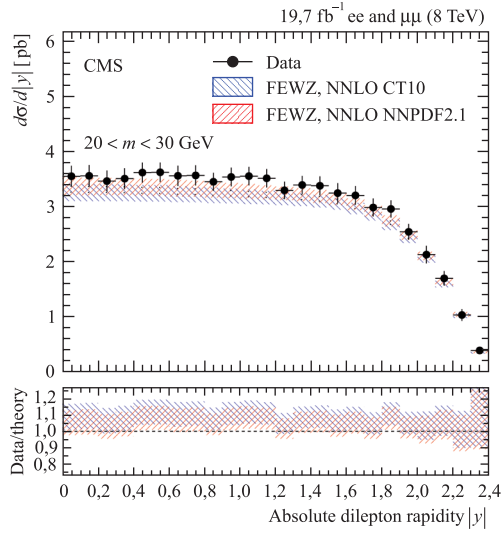


Рис. 3. Двойное дифференциальное сечение $\frac{1}{\sigma_Z} \frac{d\sigma}{dM} \frac{d\sigma}{dy}$ пар лептонов ($\mu^+\mu^-$ и e^+e^-) в процессах Дрелла – Яна в зависимости от быстроты Z-бозона в 6 интервалах инвариантной массы [8]. Сравнение экспериментальных данных и предсказаний СМ в NNLO

Fig. 3. The Drell – Yan dilepton rapidity distribution $\frac{1}{\sigma_Z} \frac{d\sigma}{dM} \frac{d\sigma}{dy}$ within the detector acceptance, plotted for different mass ranges, as measured in the combined dilepton channel and as predicted by NNLO calculations [8]. Bottom figure shows a comparison of experimental data and predictions of SM in NNLO

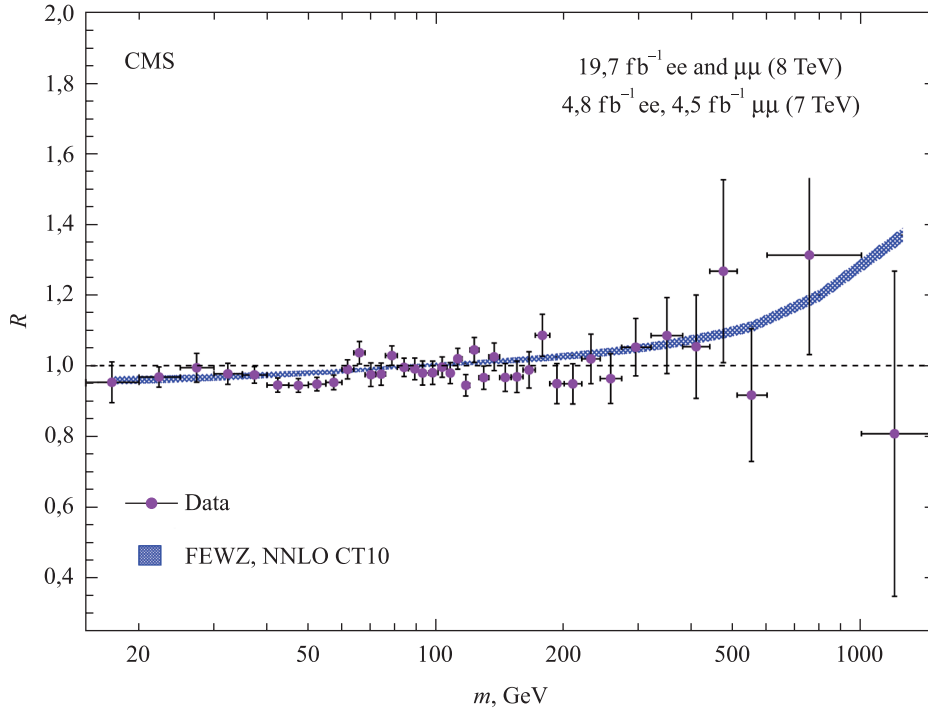


Рис. 4. Отношение дифференциальных сечений $\frac{d\sigma}{dM}$, измеренных при \sqrt{s} , равном 8 и 7 ТэВ, в зависимости от инвариантной массы лептонной пары [8]. Приводятся NNLO-вычисления СМ

Fig. 4. Measured DY double ratios at center-of-mass energies of 7 and 8 TeV in the combined dilepton channel as compared to NNLO calculations [8]

На рис. 5 представлены результаты измерения угловых коэффициентов A_i ($i = 1, 4$) и разности $A_0 - A_2$ в зависимости от поперечного импульса Z -бозона в двух интервалах быстроты в мюонном канале [9]. Как и предсказывает СМ, значения угловых коэффициентов возрастают пропорционально величине поперечного импульса Z -бозона (кроме A_4 , который отвечает за асимметрию «вперед-назад» A_{FB} и присутствует в лидирующем порядке (ЛО) теории возмущений КХД), так как влияние эффектов высших порядков увеличивается с ростом q_T . Также отметим, что значения коэффициентов A_0 и A_2 хоть и являются близкими, однако имеет место ненулевая разность между ними (нарушение теоремы Лама – Тунга) [10], значение которой также пропорционально q_T . Первые однозначные указания на нарушение соотношения Лама – Тунга при росте поперечного импульса Z -бозона q_T были получены еще в 1988 г. в эксперименте NA10 (ЦЕРН) и подтверждены годом спустя экспериментами в Фермилабе. Однако эксперимент CDF на Тэватроне зафиксировал сохранение этого соотношения в пределах ошибок в области q_T до 55 ГэВ/с. Поэтому данные ЛHC представляли собой ценность для того, чтобы поставить точку в этом вопросе. Результаты эксперимента CMS на статистике первого сеанса работы ЛHC однозначно продемонстрировали нарушение соотношения Лама – Тунга в области q_T до 200 ГэВ/с. При этом величина нарушения оказалась большей, чем предсказывается вычислениями во втором порядке теории возмущений. Таким образом, остается непонятным, с чем связано остаточное нарушение соотношения Лама – Тунга: с недоучтенными вкладами за пределами второго порядка КХД или с другими явлениями (эффекты от высших порядков и твистов КХД, а также нетривиальной структуры вакуума КХД, отражающейся в корреляции спинов партонов и их ненулевого импульса в начальном состоянии). На этот вопрос должны дать ответ комплексные исследования, включающие как более точные измерения на большей статистике, так и развитие соответствующего теоретического описания физических процессов.

Асимметрия «вперед-назад» A_{FB}

Особое внимание при изучении угловых распределений в процессах Дрелла – Яна уделяют явлению асимметрии вылета мюона определенного знака в направлении «вперед-назад» относительно направления движения системы покоя рожденной лептонной пары. Эта асимметрия является следствием нарушения P -четности в процессах Дрелла – Яна, что вызвано присутствием в слабых взаимодействиях векторных и аксиально-векторных токов. Важность измерения A_{FB} обусловлена чувствительностью

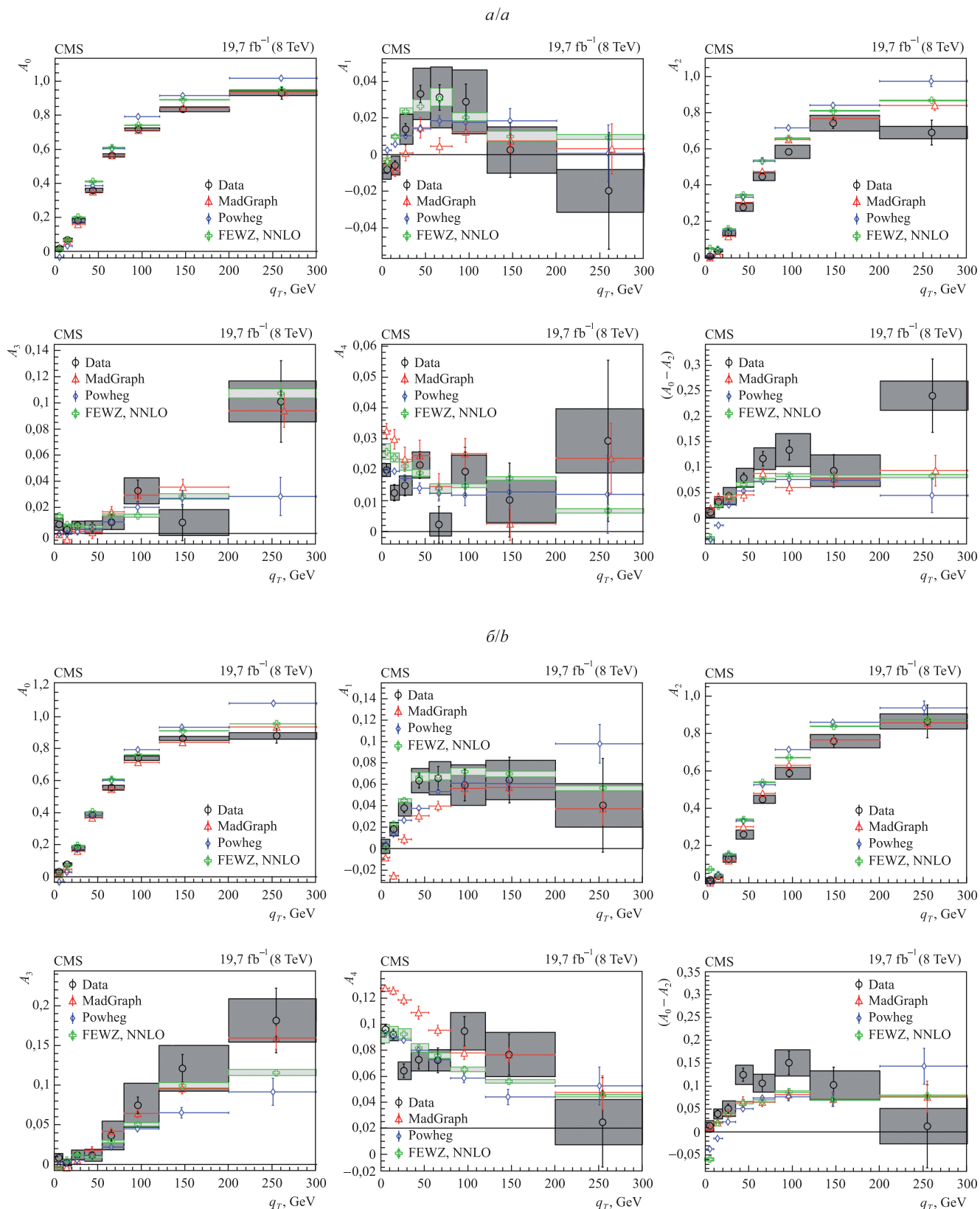


Рис. 5. Сравнение экспериментальных и предсказанных в NLO и NNLO значений угловых коэффициентов A_i и $A_0 - A_2$ в интервалах быстрот $0 < |y| < 1$ (a) и $1 < |y| < 2,1$ (б) при $\sqrt{s} = 8$ ТэВ в мюонном канале [9]

Fig. 5. Comparison of the five angular coefficients A_i and $A_0 - A_2$ measured in the Collins – Soper frame for $0 < |y| < 1$ (a) and $1 < |y| < 2.1$ (b) at $\sqrt{s} = 8$ TeV in muon channel [9]

этой характеристики к разнообразным гипотетическим вкладам новой физики: дополнительных измерений, внутренней структуры кварков и лептонов, суперсимметричных частиц, новых нейтральных калибровочных бозонов и др., что является следствием зависимости величины асимметрии от значений векторной и аксиально-векторной констант связи Z -бозона и фермионов g_V и g_A . Кроме того, для проверки ряда моделей с расширенным калибровочным сектором A_{FB} обладает характерной зависимостью от быстроты лептонной пары, или, что то же самое, быстроты новой гипотетической частицы, распадающейся на лептонную пару. Таким образом, асимметрия A_{FB} является очень важным экспериментальным инструментом, позволяющим не только с хорошей точностью проверять предсказания СМ, но и выбрать из множества различных теоретических моделей, выходящих за ее рамки, наиболее точно описывающую природу наблюдаемых взаимодействий элементарных частиц.

Асимметрия вылета мюонов «вперед-назад» в процессах Дрелла – Яна была измерена во время первого этапа работы ЛНС в 2011–2012 гг. (Run 1) при $\sqrt{s} = 7$ ТэВ и $\sqrt{s} = 8$ ТэВ в экспериментах ATLAS и CMS. В частности, при $\sqrt{s} = 8$ ТэВ асимметрия A_{FB} была измерена экспериментом CMS (рис. 6) в интервале значений инвариантной массы лептонной пары $40 < M_{l^+l^-} < 2000$ ГэВ/с² и в различных интервалах быстроты пары $|y| < 2,4$ [11]. В пределах среднеквадратичного отклонения 2σ результаты не противоречат предсказаниям СМ в NLO, что подтверждает предыдущие измерения при $\sqrt{s} = 7$ ТэВ [12].

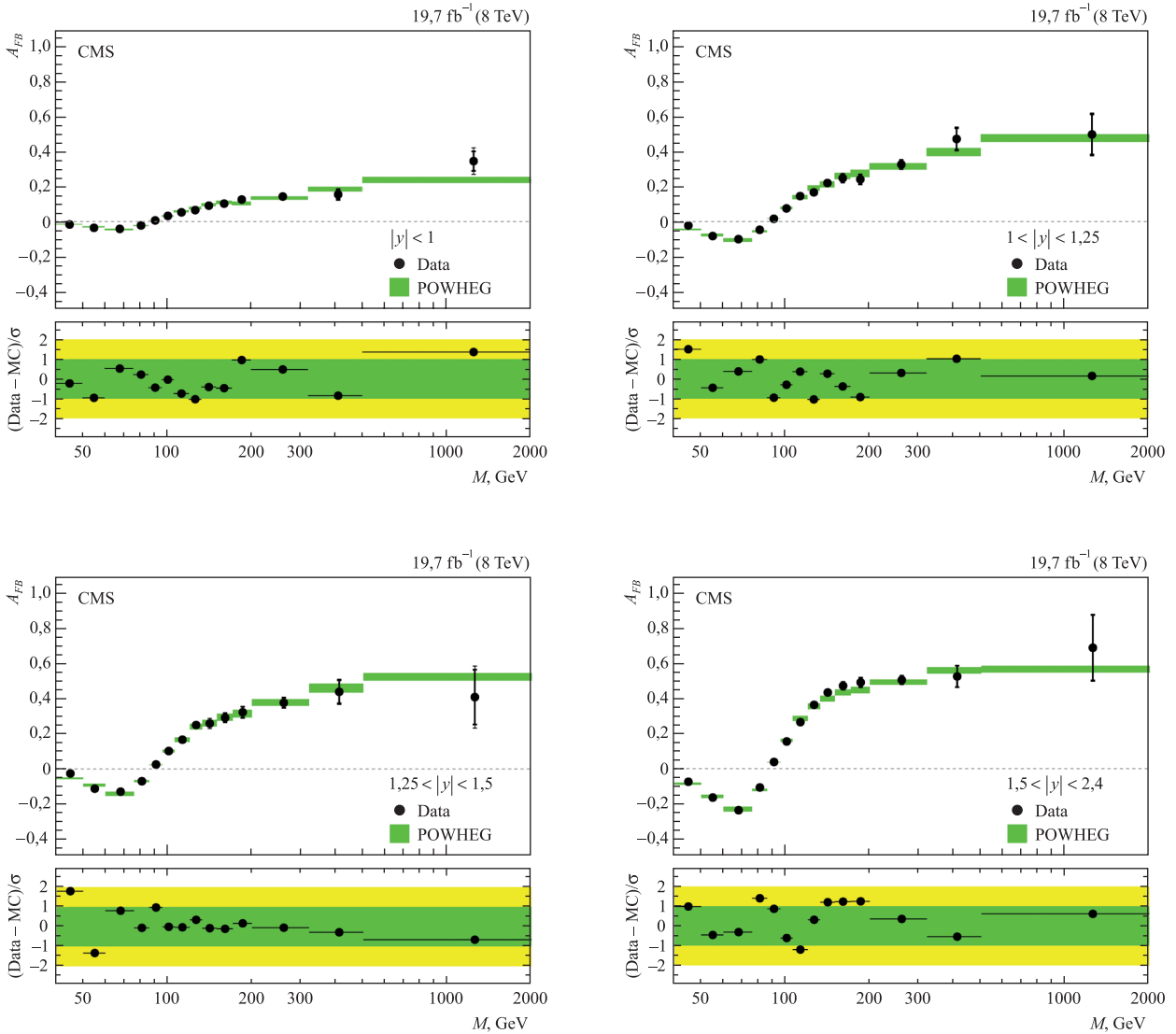


Рис. 6. Распределение A_{FB} для данных, набранных CMS при $\sqrt{s} = 8$ ТэВ по инвариантной массе пары лептонов в интервале $40 < M_{l^+l^-} < 2000$ ГэВ в четырех интервалах быстроты [11]

Fig. 6. A_{FB} dilepton invariant mass distribution for mass interval $40 < M_{l^+l^-} < 2000$ GeV at $\sqrt{s} = 8$ TeV for four rapidity bins [11]

Заклучение

На основе всего вышесказанного можно сделать вывод, что изучение процесса Дрелла – Яна представляет большую важность для различных исследований в рамках физической программы ЛHC. Этот процесс не только является чувствительным инструментом для поиска сигналов новой физики за рамками SM, но также служит значимым тестом самой SM и фоном для массы других физически интересных процессов (с парой топ-кварков, калибровочных бозонов и пр.).

В данной работе были освещены результаты изучения процессов Дрелла – Яна в эксперименте CMS, полученные на данных, накопленных за время первого этапа работы ЛHC с 2010 по 2012 г. при энергии сталкивающихся пучков 7 и 8 ТэВ в системе центра масс. Все экспериментальные данные совпадают с теоретическими предсказаниями в пределах погрешности, а проявления новой физики обнаружены не были.

Библиографические ссылки

1. Голутвин ИА, Шматов СВ. Результаты и перспективы исследований эксперимента CMS на ЛHC. *Физика элементарных частиц и атомного ядра*. 2017;48(5):604–616.
2. Шматов СВ. Некоторые результаты эксперимента CMS на ЛHC по поиску физики за рамками стандартной модели. *Физика элементарных частиц и атомного ядра*. 2018;49(4):1291–1301.
3. Шматов СВ. Поиск физики за рамками стандартной модели во взаимодействии протонов при $\sqrt{s} = 7$ ТэВ в эксперименте CMS на ЛHC. *Ядерная физика*. 2013;76(9):1166–1174. DOI: 10.7868/S0044002713090195.
4. Ланёв АВ. Результаты коллаборации CMS по поиску тяжелых дилептонных и дифотонных резонансов. *Физика элементарных частиц и атомного ядра*. 2017;48(5):677–683.
5. Ланёв АВ. Результаты коллаборации CMS: бозон Хиггса и поиски новой физики. *Успехи физических наук*. 2014;184:996. DOI: 10.3367/UFNr.0184.201409i.0996.
6. Chatrchyan S, Hmayakyan G, Khachatryan V, Sirunyan AM, Adam W, Bauer T, et al. (CMS collaboration). The CMS experiment at the CERN LHC. *Journal of Instrumentation*. 2008;3:S08004. DOI: 10.1088/1748-0221/3/08/S08004.
7. Drell SD, Yan T-M. Massive lepton pair production in hadron-hadron collisions at high-energies. *Physical Review Letters*. 1970;25(5):316–320. DOI: 10.1103/PhysRevLett.25.316.
8. Khachatryan V, Sirunyan AM, Tumasyan A, Adam W, Bergauer T, Dragicovic M, et al. (CMS collaboration). Measurements of differential and double-differential Drell – Yan cross sections in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 8$ TeV. *European Physical Journal C*. 2015;75:147. DOI: 10.1140/epjc/s10052-015-3364-2.
9. Khachatryan V, Sirunyan AM, Tumasyan A, Adam W, Bergauer T, Dragicovic M, et al. (CMS collaboration). Angular coefficients of Z bosons produced in pp collisions at $\sqrt{s} = 8$ TeV and decaying to $\mu^+\mu^-$ as a function of transverse momentum and rapidity. *Physical Letters B*. 2015;750:154–175. DOI: 10.1016/j.physletb.2015.08.061.
10. Lam CS, Tung W-K. Systematic approach to inclusive lepton pair production in hadronic collisions. *Physical Review D*. 1978;18:2447. DOI: 10.1103/PhysRevD.18.2447.
11. Khachatryan V, Sirunyan AM, Tumasyan A, Adam W, Asilar E, Bergauer T, et al. (CMS collaboration). Forward-backward asymmetry of Drell – Yan lepton pairs in pp collisions at $\sqrt{s} = 8$ TeV. *European Physical Journal C*. 2016;76:325. DOI: 10.1140/epjc/s10052-016-4156-z.
12. Chatrchyan S, Khachatryan V, Sirunyan AM, Tumasyan A, Adam W, Bergauer T, et al. (CMS collaboration). Forward-backward asymmetry of Drell – Yan lepton pairs in pp collisions at $\sqrt{s} = 7$ TeV. *Physical Letters B*. 2013;718(3):752–772. DOI: 10.1016/j.physletb.2012.10.082.

References

1. Golutvin IA, Shmatov SV. [Results and prospects of research on the CMS LHC experiment]. *Fizika elementarnykh chastits i atomnogo yadra*. 2017;48(5):604–616. Russian.
2. Shmatov SV. [Some results of BSM physic searching with the CMS experiment at the CERN LHC]. *Fizika elementarnykh chastits i atomnogo yadra*. 2018;49(4):1291–1301. Russian.
3. Shmatov SV. Searches for physics beyond the standard model in proton-proton interactions at $\sqrt{s} = 7$ TeV in the CMS experiment at the LHC. *Yadernaya fizika*. 2013;76(9):1166–1174. DOI: 10.7868/S0044002713090195. Russian.
4. Lanev AV. [CMS collaboration results of searching heavy dilepton and diphoton resonances]. *Fizika elementarnykh chastits i atomnogo yadra*. 2017;48(5):677–683. Russian.
5. Lanev AV. [CMS collaboration results: Higgs boson and searching of a new physic]. *Uspekhi fizicheskikh nauk*. 2014;184:996. DOI: 10.3367/UFNr.0184.201409i.0996.
6. Chatrchyan S, Hmayakyan G, Khachatryan V, Sirunyan AM, Adam W, Bauer T, et al. (CMS collaboration). The CMS experiment at the CERN LHC. *Journal of Instrumentation*. 2008;3:S08004. DOI: 10.1088/1748-0221/3/08/S08004.
7. Drell SD, Yan T-M. Massive lepton pair production in hadron-hadron collisions at high-energies. *Physical Review Letters*. 1970;25(5):316–320. DOI: 10.1103/PhysRevLett.25.316.
8. Khachatryan V, Sirunyan AM, Tumasyan A, Adam W, Bergauer T, Dragicovic M, et al. (CMS collaboration). Measurements of differential and double-differential Drell – Yan cross sections in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 8$ TeV. *European Physical Journal C*. 2015;75:147. DOI: 10.1140/epjc/s10052-015-3364-2.

9. Khachatryan V, Sirunyan AM, Tumasyan A, Adam W, Bergauer T, Dragicevic M, et al. (CMS collaboration). Angular coefficients of Z bosons produced in pp collisions at $\sqrt{s} = 8$ TeV and decaying to $\mu^+\mu^-$ as a function of transverse momentum and rapidity. *Physical Letters B*. 2015;750:154–175. DOI: 10.1016/j.physletb.2015.08.061.
10. Lam CS, Tung W-K. Systematic approach to inclusive lepton pair production in hadronic collisions. *Physical Review D*. 1978; 18:2447. DOI: 10.1103/PhysRevD.18.2447.
11. Khachatryan V, Sirunyan AM, Tumasyan A, Adam W, Asilar E, Bergauer T, et al. (CMS collaboration). Forward-backward asymmetry of Drell – Yan lepton pairs in pp collisions at $\sqrt{s} = 8$ TeV. *European Physical Journal C*. 2016;76:325. DOI: 10.1140/epjc/s10052-016-4156-z.
12. Chatrchyan S, Khachatryan V, Sirunyan AM, Tumasyan A, Adam W, Bergauer T, et al. (CMS collaboration). Forward-backward asymmetry of Drell – Yan lepton pairs in pp collisions at $\sqrt{s} = 7$ TeV. *Physical Letters B*. 2013;718(3):752–772. DOI: 10.1016/j.physletb.2012.10.082.

Статья поступила в редколлегию 07.03.2019.
Received by editorial board 07.03.2019.

УДК 539.1.07+539.1.074.3

СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ДЕТЕКТОРОВ НА ОСНОВЕ КРИСТАЛЛОВ ГАЛЛИЙ-ГАДОЛИНИЕВОГО ГРАНАТА Ce:GAGG

Д. Ю. КОЗЛОВ¹⁾, М. В. КОРЖИК¹⁾, А. С. ЛОБКО^{1), 2)},
А. А. ФЕДОРОВ¹⁾, В. А. МЕЧИНСКИЙ¹⁾, В. В. БОГОМОЛОВ^{3), 4)},
А. Ф. ИЮДИН³⁾, С. И. СВЕРТИЛОВ^{3), 4)}, И. В. ЯШИН³⁾

¹⁾Научно-исследовательский институт ядерных проблем

Белорусского государственного университета, ул. Бобруйская, 11, 220030, г. Минск, Беларусь

²⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

³⁾Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына

Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова,

ул. Ленинские горы, 1, строение 2, 119991, г. Москва, Россия

⁴⁾Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,

ул. Ленинские горы, 1, строение 2, 119234, г. Москва, Россия

Рассмотрены результаты измерений энергетического разрешения перспективного сцинтилляционного кристалла Ce:GAGG, выращенного в Научно-исследовательском институте ядерных проблем Белорусского государственного университета. Исследования проводились в диапазоне энергий регистрируемых гамма-квантов

Образец цитирования:

Козлов ДЮ, Коржик МВ, Лобко АС, Федоров АА, Мечинский ВА, Богомолов ВВ, Июдин АФ, Свертилов СИ, Яшин ИВ. Спектрометрические характеристики перспективных детекторов на основе кристаллов галлий-гадолиниевого граната Ce:GAGG. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2019;2:26–35.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-26-35>

For citation:

Kozlov DYu, Korjik MV, Lobko AS, Fedorov AA, Mechin-sky VA, Bogomolov VV, Iyudin AF, Svertilov SI, Yashin IV. Spectroscopic parameters of advanced detectors based on gallium germanium garnet Ce:GAGG. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2019;2:26–35. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-26-35>

Авторы:

Дмитрий Юрьевич Козлов – научный сотрудник лаборатории экспериментальной физики высоких энергий.

Михаил Васильевич Коржик – доктор физико-математических наук; заведующий лабораторией экспериментальной физики высоких энергий.

Александр Сергеевич Лобко – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий лабораторией ядерной спектроскопии и экспертизы радиационной безопасности¹⁾, профессор кафедры ядерной физики физического факультета²⁾.

Андрей Анатольевич Федоров – старший научный сотрудник лаборатории экспериментальной физики высоких энергий.

Виталий Александрович Мечинский – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник лаборатории экспериментальной физики высоких энергий.

Виталий Владимирович Богомолов – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник лаборатории космической рентгеновской и гамма-астрономии³⁾, преподаватель кафедры физики космоса физического факультета⁴⁾.

Анатолий Федорович Июдин – доктор физико-математических наук; заведующий лабораторией космической рентгеновской и гамма-астрономии.

Сергей Игоревич Свертилов – доктор физико-математических наук, профессор; ведущий научный сотрудник лаборатории космической рентгеновской и гамма-астрономии³⁾, профессор кафедры физики космоса физического факультета⁴⁾.

Иван Васильевич Яшин – кандидат физико-математических наук; ведущий научный сотрудник лаборатории космической рентгеновской и гамма-астрономии.

Authors:

Dmitry Yu. Kozlov, researcher at the laboratory of experimental high energy physics.

kodmur@ya.ru

Mikhail V. Korjik, doctor of science (physics and mathematics); head of the laboratory of experimental high energy physics.

mikhail.korjik@cern.ch

Alexandr S. Lobko, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the laboratory of nuclear spectroscopy and radiation safety expertise^a, professor at the department of nuclear physics, faculty of physics^b.

lobko@inp.bsu.by

Andrey A. Fedorov, senior researcher at the laboratory of experimental high energy physics.

andrei.fedorov@cern.ch

Vitaly A. Mechin-sky, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the laboratory of experimental high energy physics.

vitaly.mechinsky@cern.ch

Vitaly V. Bogomolov, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the X-ray and gamma space astronomy laboratory^c, lecturer at the department of space physics, faculty of physics^d.

bogovii@rambler.ru

Anatoly F. Iyudin, doctor of science (physics and mathematics); head of the X-ray and gamma space astronomy laboratory.

aiyudin@srd.sinp.msu.ru

Sergey I. Svertilov, doctor of science (physics and mathematics), full professor; leading researcher at the X-ray and gamma space astronomy laboratory^e, professor at the department of space physics, faculty of physics^d.

sis@coronas.ru

Ivan V. Yashin, PhD (physics and mathematics); leading researcher at the X-ray and gamma space astronomy laboratory.

ivn@eas.sinp.msu.rul

от 20 кэВ до 3 МэВ. Изучался образец прямоугольной формы размером $12 \times 12 \times 9$ мм. В качестве фотоприемников использовались фотоумножители Hamamatsu R3998-100-02, лавинный фотодиод S8664-1010 и кремниевые матрицы (SiPM) производства фирмы *SensL*. Энергетическое разрешение на линии ^{137}Cs (662 кэВ) составило порядка 7,5 %, что не уступает разрешению широко используемых сцинтилляторов NaI(Tl), CsI(Tl) аналогичного размера. С учетом того что кристаллы Ce:GAGG не гигроскопичны и по сравнению с NaI(Tl), CsI(Tl) характеризуются существенно более коротким временем высвечивания (~ 80 нс) и более высокой эффективностью, они представляются весьма перспективными для использования в гамма-спектрометрах и в качестве позиционно-разрешаемых элементов пространственно-чувствительных детекторов энергичных частиц и гамма-квантов.

Ключевые слова: сцинтиллятор; кристалл; детектор; изотоп; гамма-квант; импульс; энергетическое разрешение.

Благодарность. Работа выполнена с использованием финансирования по грантам Белорусского государственного фонда фундаментальных исследований № Ф18Р-029/1 и Российского фонда фундаментальных исследований № 18-52-00024.

SPECTROSCOPIC PARAMETERS OF ADVANCED DETECTORS BASED ON GALLIUM GERMANIUM GARNET Ce:GAGG

*D. Yu. KOZLOV^a, M. V. KORJIK^a, A. S. LOBKO^{a,b},
A. A. FEDOROV^a, V. A. MECHINSKY^a, V. V. BOGOMOLOV^{c,d},
A. F. IYUDIN^c, S. I. SVERTILOV^{c,d}, I. V. YASHIN^c*

^a*Research Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University,
11 Babrujskaja Street, Minsk 220030, Belarus*

^b*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*

^c*Skobel'syn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University,
1 Leninskie Gory Street, building 2, Moscow 119991, Russia*

^d*Lomonosov Moscow State University, 1 Leninskie Gory Street, building 2, Moscow 119234, Russia*

Corresponding author: D. Yu. Kozlov (kodmur@ya.ru)

The results of measurements of the energy resolution of advanced scintillation crystal Ce:GAGG grown in the Research Institute for Nuclear Problems of the Belarusian State University are considered. The measurements were carried out in the energy range of detected gamma quanta from 20 keV to 3 MeV. A rectangular sample with size of $12 \times 12 \times 9$ mm was studied. Photomultiplier Hamamatsu R3998-100-02, avalanche photodiode S8664-1010 and silicon matrices (SiPM) manufactured by *SensL* were used as photodetectors. The measured energy resolution on the ^{137}Cs line (662 keV) was about 7.5 %, which is not inferior to the resolution of the widely used NaI(Tl), CsI(Tl) scintillators of a similar size. Since Ce:GAGG crystals are not hygroscopic and compared to NaI(Tl), CsI(Tl) are characterized by a significantly shorter decay time (~ 80 ns), they seem very promising for use in gamma spectrometers and as position-resolvable elements of spatially sensitive detectors of energetic particles and gamma quanta.

Keywords: scintillator; crystal; detector; isotope; gamma quanta; pulse; energy resolution.

Acknowledgements. The work was supported by the grant No. Ф18Р-029/1 of Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research and No. 18-52-00024 of Russian Foundation for Basic Research.

Введение

Дальнейший прогресс в исследовании астрофизических и атмосферных вспышек гамма-излучения возможен путем использования спектрометрической аппаратуры, обеспечивающей пространственную локализацию источника. Одним из наиболее перспективных направлений космической гамма-спектрологии является разработка и создание детектирующих систем, обладающих позиционной и пространственной чувствительностью. Позиционно-чувствительные детекторы (ПЧД) позволяют локализовать место взаимодействия частицы или кванта и, соответственно, получать информацию о пространственных характеристиках регистрируемых потоков.

В настоящее время основные направления развития методики ПЧД для гамма-спектрологии связаны с повышением эффективности регистрации излучений и точности их локализации, снижением порога обнаружения источника излучения, а также уменьшением энергопотребления, ослаблением искажающего влияния «мертвого времени» измерения аппаратуры, увеличением временной разрешающей способности.

Принимая во внимание все вышеизложенное, следует сделать вывод о необходимости создания нового поколения гамма-спектрометров высоких разрешения и чувствительности для исследования транзитных явлений на космических аппаратах, высотных аэростатах и в наземных экспериментах. Такие приборы обеспечат уникальную возможность измерять временные профили и спектры быстропротекающих высокоэнергичных процессов, в том числе взрывного характера, с высоким временным и энергетическим разрешением, а также осуществлять локализацию источников таких процессов.

К детекторам гамма-квантов, обеспечивающим позиционное (пространственное) разрешение, так называемым пикселям, предъявляются особые требования: наряду с указанным разрешением они должны обладать высоким энергетическим и временным разрешением. В этом плане наилучшие характеристики, как известно, имеют полупроводниковые детекторы. Однако вследствие высокой стоимости и технических трудностей в эксплуатации (например, необходимость охлаждения) их применение в сложных детектирующих устройствах, в частности предназначенных для космических исследований, существенно ограничено. Поэтому все больший интерес представляет использование в качестве пикселей ПЧД новых перспективных неорганических сцинтилляторов на основе бромидов лантана и церия, а также галлий-гадолиниевых гранатов, которые по своему энергетическому разрешению приближаются к полупроводниковым детекторам на основе CeBr_3 .

Кристаллы Ce:GAGG , $\text{LaBr}_3:\text{Ce}$ и CeBr_3 обладают большими световым выходом $((4-6) \cdot 10^4$ фотон/МэВ) и плотностью (5–7 г/см³), а также быстроедействием и малым временем высвечивания (20–80 нс) [1–3]. Последнее позволяет реализовать повышенные точность временных измерений и пропускную способность измерительного тракта. Относительно высокая плотность указанных кристаллов обеспечивает эффективность регистрации гамма-квантов в широком диапазоне энергий [4; 5]. Благодаря большому световыходу сцинтилляционные кристаллы на основе бромидов лантана и церия, а также галлий-гадолиниевые гранаты дают высокое энергетическое разрешение.

В настоящей работе рассматриваются результаты измерения энергетического разрешения кристалла Ce:GAGG прямоугольной формы размером $12 \times 12 \times 9$ мм, выращенного в Научно-исследовательском институте ядерных проблем Белорусского государственного университета.

Схема экспериментальной установки и методика измерений

Экспериментальная установка, использовавшаяся нами для измерений энергетического разрешения кристалла Ce:GAGG (рис. 1), включает в себя собственно детекторный узел, состоящий из исследуемого сцинтилляционного кристалла и фотоприемника (ФЭУ Hamamatsu R3998-100-02, лавинный фотодиод (APD) Hamamatsu S8664-1010 и кремниевые матрицы (SiPM) производства фирмы *SensL*, Ирландия), помещенных в светоизолирующую коробку (на схеме не показана), источники питания и измерительную электронику, содержащую многоканальный анализатор (МКА) AmpTek MCA-8000A, а также зарядово-чувствительные усилители и формирователи, разработанные отдельно для каждого из применяемых фотоприемников. Кроме перечисленных устройств, в состав установки входили персональный компьютер, с помощью которого считывались и обрабатывались спектры, собираемые МКА, а также осциллограф Tektronix TDS3012B и генератор импульсов Tektronix AFG3102 для настройки электроники. Исследуемый кристалл широкой гранью устанавливался примерно в центр входного окна фотоприемника, который размещался в светоизолирующей коробке вертикально. При этом обеспечивался оптический контакт между выходным окном упаковки кристалла и входным окном фотоприемника с помощью специальной кремнийорганической смазки.

Для измерений с помощью ФЭУ применялась плата питания на основе высоковольтного DC/DC-конвертера Traco THV 12-1000N и предварительный усилитель на микросхемах AD8039, который обеспечивал интегрирование импульса с анода ФЭУ с постоянной времени ~ 500 нс. В случае лавинного фотодиода в качестве входного элемента был использован зарядово-чувствительный усилитель Cremat CR-110, после которого в цепь включался усилитель-формирователь Cremat CR-200 с постоянной времени 500 нс. На лавинный фотодиод подавалось смещение 380 В от стационарного источника стабилизированного напряжения. Для измерений с кремниевыми фотоумножителями (SiPM) применялась сборка AgayB-30035-144P из 144 пикселей размером 3×3 мм, объединенных в виде матриц 12×12 . Сигналы с этой матрицы снимались с помощью многоканального предусилителя AiT AB424T-ARRAYB144P, с которого поступали на сумматор, выполненный на операционном усилителе AD8039.

Во всех перечисленных выше случаях на выходе входного каскада усиления формировался импульс положительной полярности длительностью ~ 500 нс. Этот импульс поступал на вход многоканального

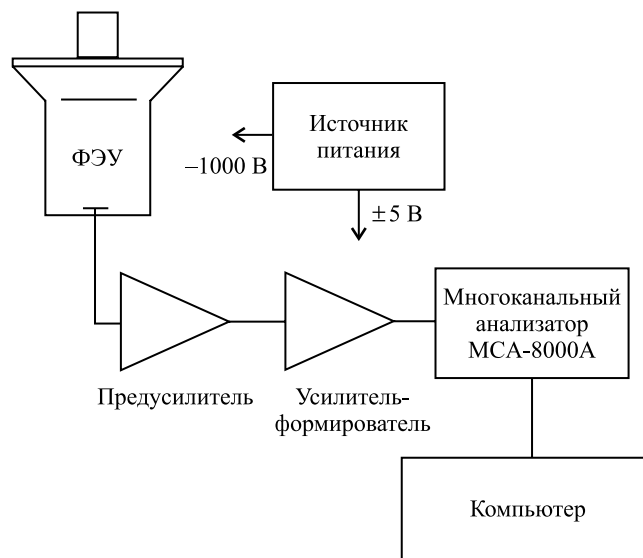


Рис. 1. Схема экспериментальной установки для измерения энергетического разрешения сцинтилляционных детекторов

Fig. 1. Scheme of an experimental setup for measuring the energy resolution of scintillation detector

анализатора МСА-8000А, соединенного с компьютером по интерфейсу RS-232. Набор спектров осуществлялся с помощью программного обеспечения *ADMCA*, входящего в комплект поставки МКА. Данная программа дает возможность как сбора данных и визуализации спектров, так и определения характеристик пиков на амплитудных спектрах, в том числе измерения их ширины на половине высоты (FWHM) путем вписывания кривой Гаусса методом наименьших квадратов.

Результаты измерений энергетического разрешения

С кристаллом Ce:GAGG проводились три серии измерений, в которых в качестве фотоприемника использовался фотоумножитель типа Hamamatsu R3998-100-02, лавинный фотодиод S8664-1010, а также кремниевые матрицы (SiPM) производства фирмы *SensL*. Для каждой серии выполнялась независимая калибровка посредством спектральных измерений с помощью радиоактивных изотопов из стандартного набора градуировочных источников активностью $\sim 10^5$ Бк (см. таблицу).

Характеристики радиоактивных изотопов из стандартного набора градуировочных источников

Characteristics of radioactive isotopes from a standard set of calibration sources

Энергия, кэВ	Изотоп	Энергия, кэВ	Изотоп
26,34	Am-241	511	Na-22
30,9	Ba-133	569,7	Bi-207
32	Cs-137	661,65	Cs-137
40	Eu-152	778,9	Eu-152
59,54	Am-241	867,38	Eu-152
75	Bi-207	964,1	Eu-152
81	Ba-133	1063,66	Bi-207
101	Am-241	1173,2	Co-60
121,78	Eu-152	1274,5	Na-22
244,7	Eu-152	1332,5	Co-60
344,28	Eu-152	1408	Eu-152
356	Ba-133	1770	Bi-207

Указанные в таблице значения энергии отвечают максимуму в соответствующей спектральной линии. Расстояние между изотопом и детектором подбиралось так, чтобы скорость счета была больше фонового значения не менее чем в 10 раз, но при этом скорость счета не должна была превышать максимально допустимое значение 10^4 с^{-1} .

При измерении энергетического разрешения для каждой линии вычислялось отношение величины FWHM линии в каналах АЦП к номеру канала, соответствующему центру линии, с поправкой на положение нуля. Выделение линий на фоне континуума выполнялось путем обработки спектров АЦП с помощью специальной компьютерной программы, которая осуществляла линейную интерполяцию континуума в области линии, затем вычитала континуум и методом максимального правдоподобия аппроксимировала линию кривой Гаусса с использованием программного обеспечения *ADMCA*. Каждому максимуму на спектре гамма-излучения с энергией E_{max} сопоставлялся номер канала АЦП ($N_{\text{АЦП}}$), соответствующий максимуму этого распределения. В результате были построены зависимости $E_{\text{max}}(N_{\text{АЦП}})$, использовавшиеся в дальнейшем в качестве градуировочных кривых, посредством которых осуществлялся переход от номера канала к величине энергии регистрируемого гамма-кванта.

Пример градуировочного спектра для кристалла Ce:GAGG с фотоумножителем R3998-100-02, полученного с использованием изотопа ^{152}Eu , приведен на рис. 2, а. Аналогичный спектр при измерениях с изотопом ^{22}Na и лавинным фотодиодом в качестве фотоприемника изображен на рис. 2, б. На этих рисунках хорошо видны все спектральные особенности, характерные для указанных изотопов, а именно линии гамма-излучения со значениями энергий линий из таблицы.

На рис. 3 для измерений с ФЭУ (рис. 3, а) и лавинным фотодиодом (рис. 3, б) представлены градуировочные зависимости, показывающие соответствие между номером канала АЦП и энерговыделением в кристалле. Градуировочные кривые для ФЭУ и лавинного фотодиода демонстрируют хорошую линейность во всем диапазоне, поэтому энергетическое разрешение определялось как отношение выраженной числом каналов АЦП величины FWHM соответствующей линии к номеру канала, соответствующему центру линии, с поправкой на положение нуля. FWHM и положение центра определялись путем вписывания кривой Гаусса методом наименьших квадратов с использованием программного обеспечения *ADMCA*, входящего в комплект поставки МКА.

Непосредственно для определения энергетического разрешения были использованы те линии, для которых значения FWHM можно было найти надежно. Полученные экспериментально величины разрешения приведены на рис. 4. Лучшее энергетическое разрешение определено измерениями с фотоумножителем: при энергии 662 кэВ (изотоп ^{137}Cs) оно равно 7,5 %. На том же рисунке приведена аппроксимация степенной зависимостью, параметры которой найдены методом наименьших квадратов. В случае когда определяющим фактором, ограничивающим энергетическое разрешение, являются статистические флуктуации числа фотоэлектронов, следует ожидать степенную зависимость с наклоном $-0,5$, т. е. величина разрешения обратно пропорциональна квадратному корню из энергии. По графикам видно, что при выполнении измерений с помощью ФЭУ, а также лавинного фотодиода экспериментальные точки достаточно хорошо аппроксимируются степенной зависимостью. При этом наклон прямой для ФЭУ близок к 0,5 и составляет 0,537, а для лавинного фотодиода равен $\sim 0,3$, что несколько меньше значения, определяемого флуктуациями числа образованных носителей. Следует отметить, что разброс точек на графиках, изображенных на рис. 4, превышает статистическую погрешность, вычисляемую программой *ADMCA*, поскольку такая погрешность во многих случаях значительно меньше систематических отклонений, возникающих из-за отклонения формы линии от кривой Гаусса или вследствие того, что относительно слабая линия располагается на подложке с наклоном.

Также проведены измерения, в которых в качестве фотоприемника использована матрица кремневых фотоумножителей (SiPM) фирмы *SensL*. В этом случае связь номера канала и энергии гамма-квантов имела нелинейный характер. Для ее описания в настоящей работе была использована кубическая аппроксимация, параметры которой подбирались методом наименьших квадратов.

По-видимому, указанная нелинейность связана с эффектом насыщения SiPM из-за ограниченного числа микроячеек, а также с эффектом «перекрестного влияния» (*cross-talk*) [6].

При определении энергетического разрешения сначала вычислялась ширина линии ΔE в энергетических единицах, для чего находились номера каналов МКА, соответствующие положению кривой Гаусса, вписанной в экспериментальный пик, на половине высоты от максимума со стороны больших и меньших энергий. Величина разрешения принималась равной $\Delta E/E$, где E – энергия гамма-излучения. Зависимость энергетического разрешения от энергии при использовании матрицы SiPM приведена на рис. 5.

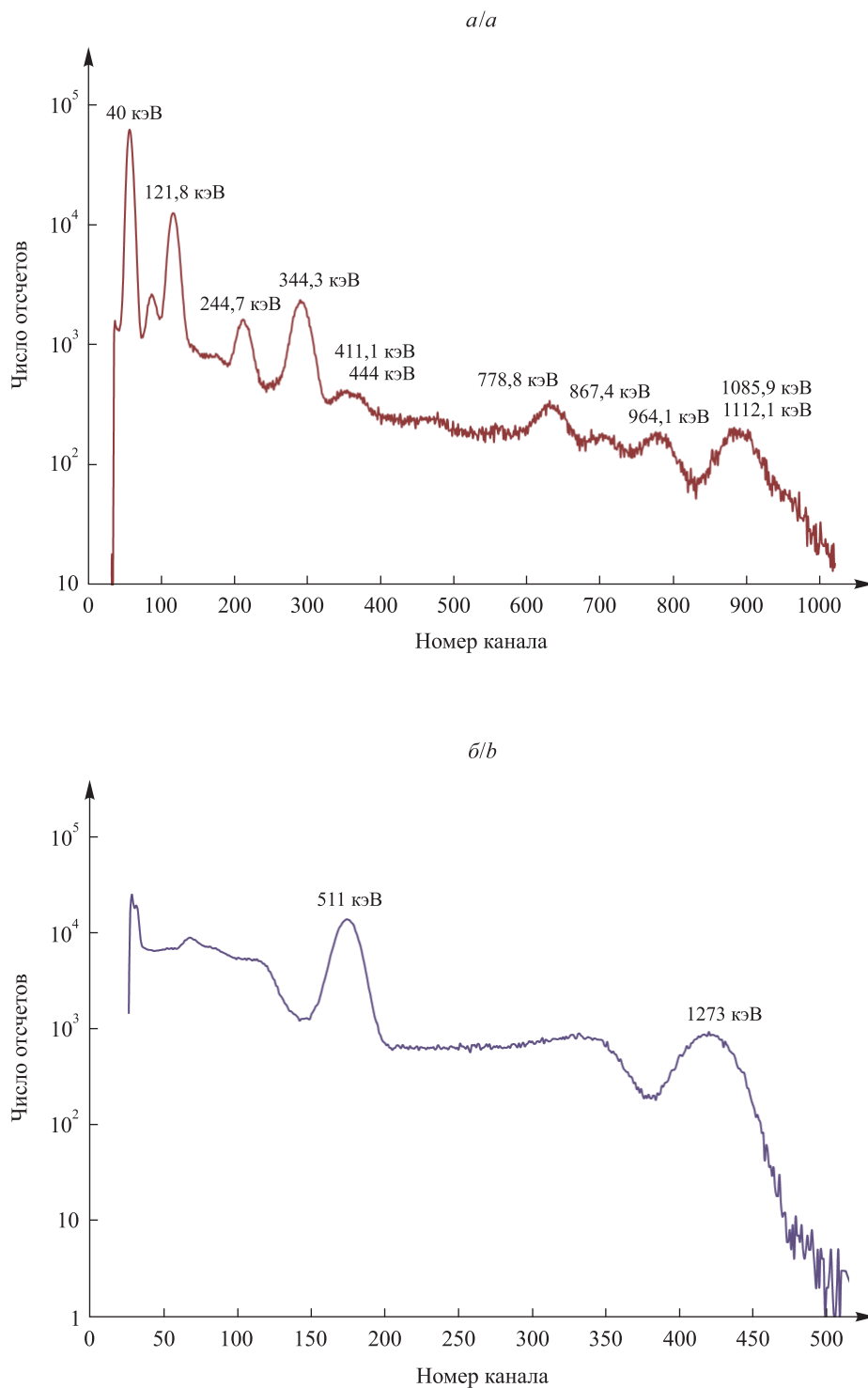


Рис. 2. Спектры гамма-излучения, измеренные с помощью сцинтилляционного кристалла Ce : GAGG:
a – спектр радиоактивного изотопа ^{152}Eu
 (в качестве фотоприемника использован ФЭУ Hamamatsu R3998-100-02);
b – спектр радиоактивного изотопа ^{22}Na
 (в качестве фотоприемника использован лавинный фотодиод S8664-1010)

Fig. 2. Spectra gamma radiation, measured using Ce : GAGG scintillation crystal:
a – spectrum of the ^{152}Eu isotope, measured using
 the Hamamatsu R3998-100-02 photomultiplier as a photodetector;
b – spectrum of the ^{22}Na isotope, measured using
 the avalanche photodiode S8664-1010 as a photodetector

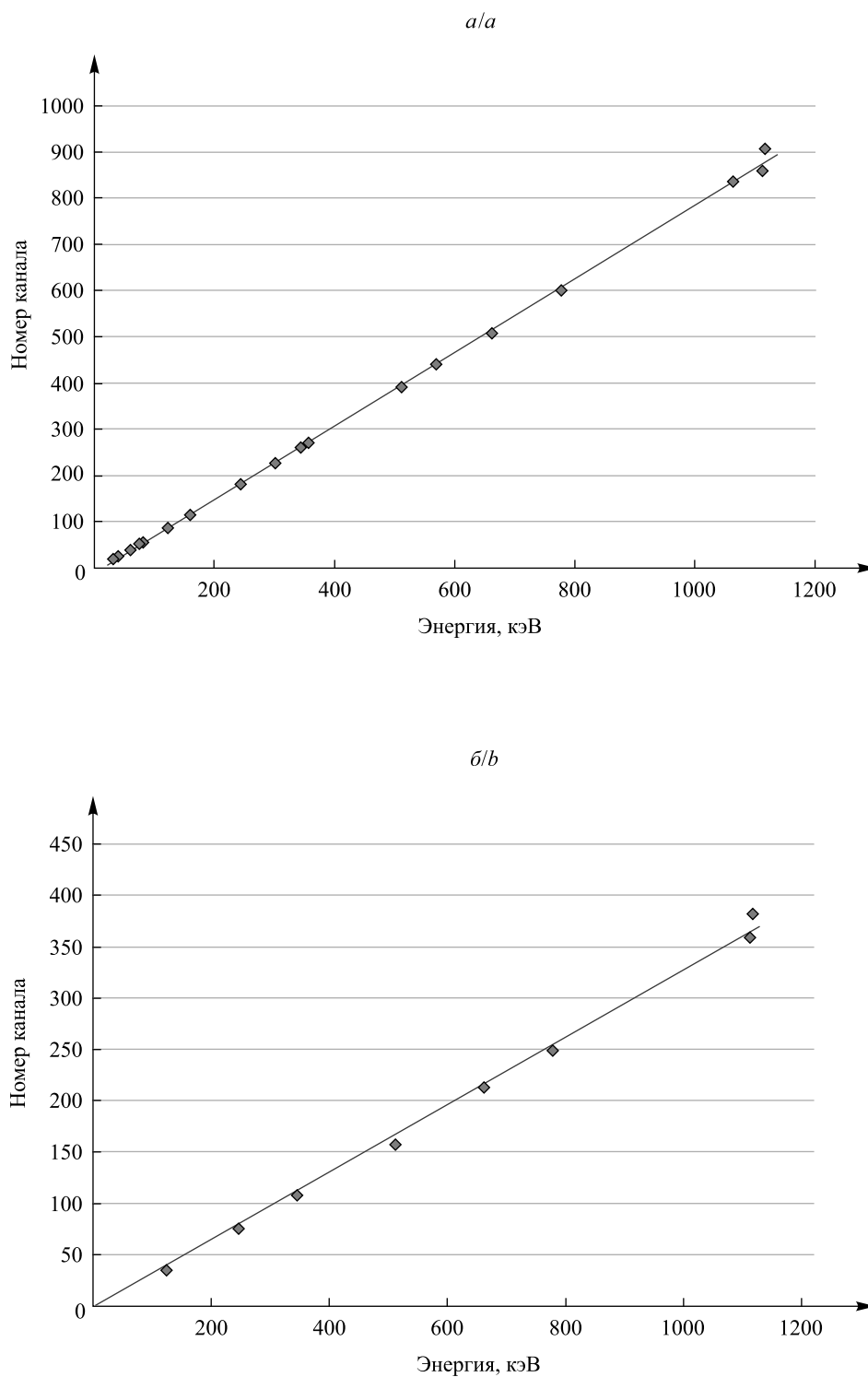


Рис. 3. Градуировочные зависимости номера канала АЦП от энергии гамма-кванта для кристалла Ce:GAGG при измерениях с ФЭУ Hamamatsu R3998-100-02 (а) и лавинным фотодиодом (APD) Hamamatsu S8664-1010 (б)

Fig. 3. Calibration dependencies: gamma-quantum energy – channel number of ADC for Ce:GAGG crystal for measurements with a Hamamatsu R3998-100-02 PMT (a) and with an avalanche photodiode (APD) Hamamatsu S8664-1010 (b)

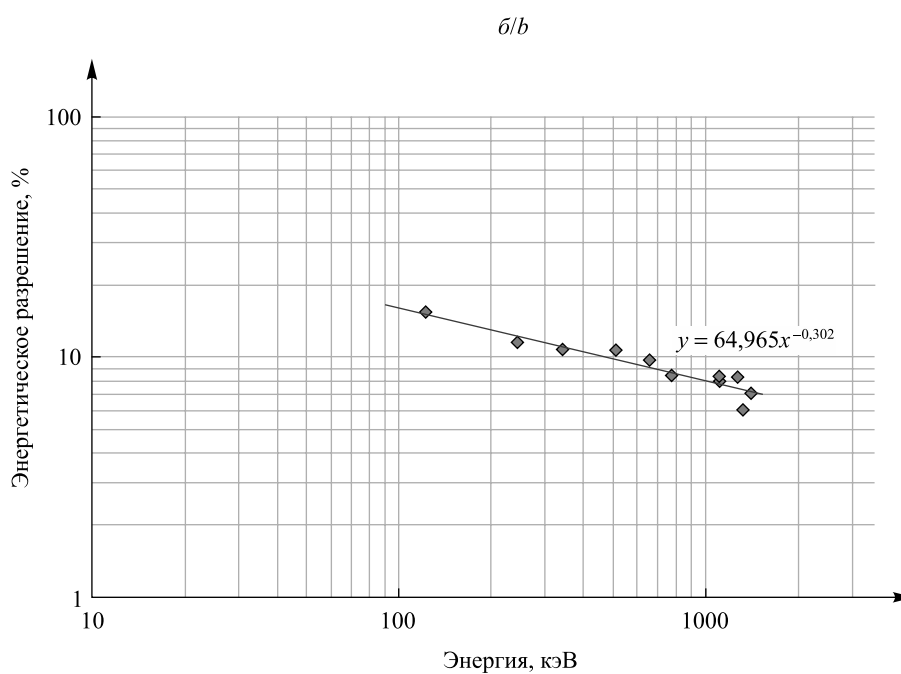
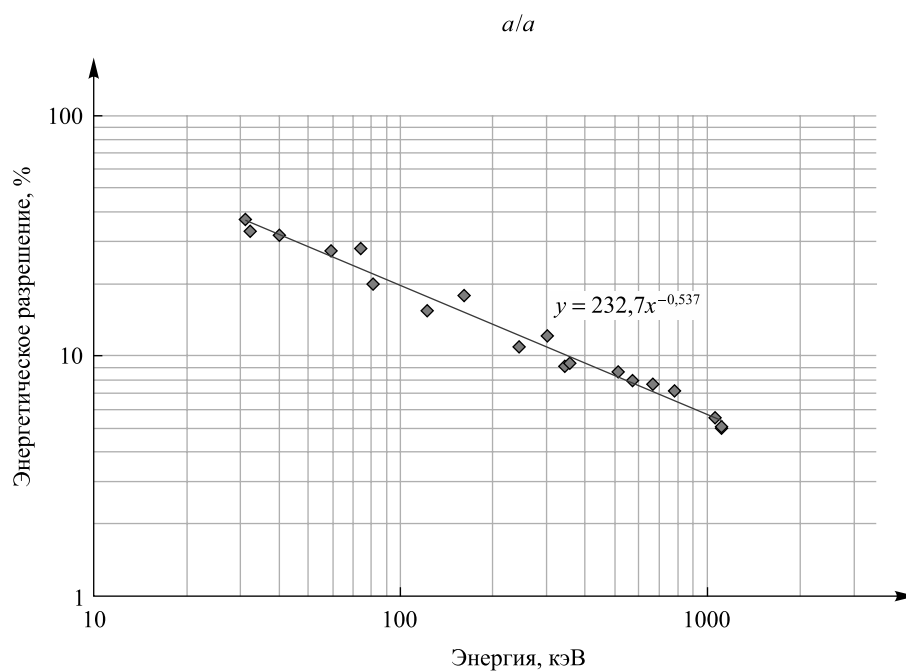


Рис. 4. Зависимость энергетического разрешения кристалла Ce : GAGG от энергии гамма-кванта для ФЭУ Hamamatsu R3998-100-02 (а) и лавинного фотодиода (APD) Hamamatsu S8664-1010 (б)

Fig. 4. Dependence of the energy resolution of a Ce : GAGG crystal on gamma quantum energy for a Hamamatsu R3998-100-02 photomultiplier (a) and an avalanche photodiode (APD) Hamamatsu S8664-1010 (b)

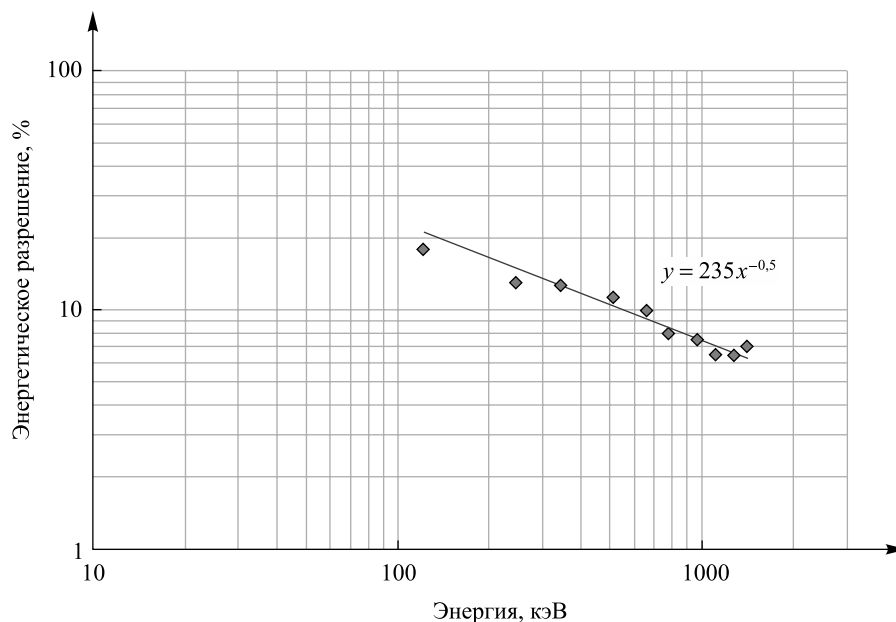


Рис. 5. Зависимость энергетического разрешения кристалла Ce:GAGG от энергии гамма-кванта для измерений с матрицей кремниевых фотоумножителей (SiPM) производства фирмы SensL

Fig. 5. The dependence of the energy resolution of the Ce:GAGG crystal on the gamma quantum energy for measurements with the silicon photomultiplier matrix (SiPM) manufactured by SensL

Из рис. 5 видно, что энергетическое разрешение исследуемого образца сцинтилляционного кристалла Ce:GAGG с матрицей SiPM на линии 662 кэВ составляет 9,8 %. Отличия положения точек на графике от линии аппроксимации степенной функцией в области малых и больших энергий могли дополнительно появиться вследствие недостаточно точного учета нелинейного характера зависимости амплитуды от энергии. Но в целом и в этом случае энергетическая зависимость разрешения неплохо аппроксимируется степенной функцией.

Заклучение

В измерениях с рассмотренным образцом кристалла Ce:GAGG на линии ^{137}Cs (662 кэВ) при использовании фотоумножителя, лавинного фотодиода и кремниевого фотоумножителя получено энергетическое разрешение $\sim 7,5$; $\sim 9,7$ и $9,8$ % соответственно. Это несколько хуже, чем известное наилучшее найденное для кристаллов Ce:GAGG значение энергетического разрешения, составляющее ~ 5 % [7]. Следует, однако, отметить, что приведенные в настоящей работе значения энергетического разрешения включают разброс сигналов на выходе фотоприемников, обусловленный флуктуациями их коэффициента усиления, вклад которых сопоставим с разрешением собственно кристалла. Кроме того, нужно учитывать возможную неоднородность светосбора, обусловленную, в частности, прямоугольной формой кристалла. Отличие наклона аппроксимирующей линии от $-0,5$ для лавинного фотодиода может быть связано с неоднородной чувствительностью его поверхности, размер которой близок к размеру кристалла. Кроме того, размер поверхности APD немного меньше размера кристалла, что приводит к потере света. В случае использования сборки SiPM потеря фотонов высветки на промежутках между светочувствительными пикселями, а также известные нелинейные эффекты SiPM приводят к ухудшению измеряемого энергетического разрешения сборки кристалла и фотоприемника.

Тем не менее полученные значения величины энергетического разрешения сопоставимы с аналогичными характеристиками распространенных сцинтилляторов NaI(Tl), при этом кристаллы Ce:GAGG тех же размеров имеют значительно большую эффективность и примерно в 3 раза меньшее время высвечивания, поэтому их применение в качестве детектирующих элементов гамма-телескопов имеет хорошие перспективы.

Библиографические ссылки / References

1. Pirard B, d'Uston C, Maurice S, Gasnault O. Performance Limits of New Generation Scintillators for Planetary Gamma-Ray Spectroscopy [Internet]. In: *Lunar and Planetary Science XXXVI: papers presented at the 36th Lunar and Planetary Science Conference; 2005 14–18 March; Houston, USA*. Houston: Lunar and Planetary Institute; 2005 [cited 2018 August 23]. p. 1–2. Available from: <https://www.lpi.usra.edu/meetings/lpsc2005/pdf/2187.pdf>.

2. Glodo J, Kuhn A, Higgins WM, van Loef EVD, Karp JS, Moses WW, et al. CeBr₃ for Time-of-flight PET. In: *Nuclear Science Symposium: IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record; 2006 October 29 – November 1; San Diego, USA*. Piscataway: IEEE; 2006. p. 1570–1573. DOI: 10.1109/NSSMIC.2006.354198.
3. Quarati F, Bos AJJ, Brandnburg S, Dathy C, Dorenbos P, Kraft S, et al. X-ray and gamma-ray response of 2"×2" LaBr₃(Ce) scintillation detector. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 2007;574(1):115–120. DOI: 10.1016/J.NIMA.2007.01.161.
4. Iyudin AF, Bogomolov VV, Svertilov SI, Yashin IV, Smoot GF, Greiner J, et al. Characteristics of position sensitive detector pixels based on promising inorganic scintillators LaBr₃:Ce and CeBr₃. *Instruments and Experimental Techniques*. 2013;56(6):640–648. DOI: 10.1134/S0020441213050175.
5. Sergey S, Bogomolov V, Iyudin A, Maksimov I, Markelova A, Yashin I. New Advanced Scintillators for Gamma Ray Spectroscopy and Their Application. In: Korzhik M, Gektin A, editors. *Engineering of Scintillation Materials and Radiation Technologies: Proceedings of ISMART 2016. Volume 200*. [Place unknown]: Springer International Publishing; 2017. p. 281–299. DOI: 10.1007/978-3-319-68465-9.
6. Yeom JY, Yamamoto S, Derenzo SE, Spanoudaki VCh, Kamada K, Endo T, et al. First performance results of Ce:GAGG scintillation crystals with silicon photomultipliers. *IEEE Transactions on Nuclear Science*. 2013;60(2):988–992. DOI: 10.1109/TNS.2012.2233497.
7. Iwanowska J, Swiderski L, Szczesniak T, Sibczynski P, Moszynski M, Grodzicka M, et al. Performance of cerium-doped Gd₃Al₂Ga₃O₁₂ (GAGG:Ce) scintillator in gamma-ray spectrometry. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 2013;712:34–40. DOI: 10.1016/J.NIMA.2013.01.064.

Статья поступила в редакцию 01.04.2019.
Received by editorial board 01.04.2019.

ОДДЕРОН: МИФЫ И РЕАЛЬНОСТЬ

Л. Л. ЕНКОВСКИЙ¹⁾, И. САНИ²⁾, И. ТУРОВЦИ³⁾

¹⁾Институт теоретической физики имени Н. Н. Боголюбова
Национальной академии наук Украины,
ул. Метрологическая, 14б, 03680, г. Киев, Украина
²⁾Будапештский университет им. Лоранда Этвёша,
ул. Петера Пазманя, 1/А, 1117, г. Будапешт, Венгрия
³⁾Ужгородский национальный университет,
ул. Университетская, 14, 88000, г. Ужгород, Украина

В рамках модели Редже полюсов исследовано поведение фазы рассеяния вперед протонов на протонах ($\rho(13 \text{ TeV}) = 0,1 \pm 0,01$), измеренной недавно на ускорителе ЛНС. Модель включает дипольный померон, оддерон и обмен вторичными реджеонами. Она описывает «излом» при малых $|t|$ (отклонение от экспоненциального поведения дифракционного конуса), ускоренный рост с энергией наклона конуса $B(s, t = 0)$, а также отсутствие дополнительных структур в дифференциальном сечении. В отличие от большинства моделей Редже полюсов наш подход основан на использовании двукратного померона. Он обладает рядом преимуществ по сравнению с моделью простого полюса. Двукратный померон генерирует растущие сечения даже при единичном интерсепте померона и, что еще важнее, рождает дифракционный минимум и максимум в дифференциальном сечении в соответствии с экспериментальными данными. В рамках модели вычислен относительный вклад в амплитуду рассеяния различных ее компонент.

Ключевые слова: модель Редже полюсов; померон; оддерон.

THE ODDERON: MYTHS AND REALITY

L. L. JENKOVSZKY^a, I. SZANYI^b, J. TURÓCI^c

^aBogolyubov Institute for Theoretical Physics, National Academy of Sciences of Ukraine,
14b Metrologicheskaya Street, Kiev 03680, Ukraine
^bEötvös Loránd University, 1/A Pázmány Péter Street, Budapest 1117, Hungary
^cUzhhorod National University, 14 Universitetskaya Street, Uzhhorod 88000, Ukraine
Corresponding author: L. L. Jenkovszky (jenkovszky@me.com)

In the framework of a Regge-pole model, we discuss the forward phase of the proton-proton elastic scattering amplitude ($\rho(13 \text{ TeV}) = 0.1 \pm 0.01$), recently measured at the LHC. Our model includes a dipole pomeron, odderon and secondary reggeon exchanges. It accommodates for the low- $|t|$ «break» (departure from the exponential behavior of the

Образец цитирования:

Енковский ЛЛ, Сани И, Туровци И. Оддерон: мифы и реальность. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2019;2:36–40 (на англ.).
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-36-40>

For citation:

Jenkovszky LL, Szanyi I, Turóci J. The odderon: myths and reality. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2019; 2:36–40.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-36-40>

Авторы:

Ласло Ласлович Енковский – доктор физико-математических наук; ведущий научный сотрудник отдела астрофизики и элементарных частиц.
Иштван Сани – магистрант факультета естественных наук.
Иолана Туровци – старший преподаватель.

Authors:

László L. Jenkovszky, doctor of science (physics and mathematics); leading researcher at the department of astrophysics and elementary particles.
jenkovszky@me.com
István Szanyi, master's degree student, faculty of natural science.
sz.istvan03@gmail.com
Jolán Turóci, senior lecturer.
turocijolika@gmail.com

diffraction cone), the accelerating rise with energy of the forward slope $B(s, t = 0)$ and absence of secondary dips and bumps. Contrary to the majority of Regge-pole models, our approach is based on the use of a dipole (double pole) pomeron (DP). It has a number of advantages over the conventional simple pole pomeron: DP generates rising cross sections even at unit pomeron intercept and, what is even more important, it produces a single diffraction minimum and maximum in the differential cross section, in accord with the experimental data. Relative contributions from different components to the scattering amplitude are evaluated from the fitted model.

Keywords: Regge-pole model; pomeron; odderon.

During the past couple of years discussion on the so-called odderon was triggered by the TOTEM Collaboration, who produced a number of spectacular results on proton-proton elastic and total cross sections measured at the LHC in the range $2.76 \leq \sqrt{s} \leq 13$ TeV [1]. Most, but not all of them can be fitted within Regge-pole models with a simple pomeron pole as input.

A possible alternative to the simple Regge-pole model as input is a double pole (double pomeron pole, or simply dipole pomeron, DP) in the angular momentum (j) plane. It has a number of advantages over the simple pomeron Regge-pole. In particular, it produces logarithmically rising cross sections already at the «Born» level.

The pomeron amplitude may be rewritten in the following «geometrical» form (for details see [2] and references therein):

$$A_p(s, t) = i \frac{a_p s}{b_p s_{0p}} \left[r_{1p}^2(s) e^{r_{1p}^2(s)[\alpha_p - 1]} - \epsilon_p r_{2p}^2(s) e^{r_{2p}^2(s)[\alpha_p - 1]} \right], \quad (1)$$

where $r_{1p}^2(s) = b_p + L_p - \frac{i\pi}{2}$; $r_{2p}^2(s) = L_p - \frac{i\pi}{2}$, $L_p \equiv \ln\left(\frac{s}{s_{0p}}\right)$. The pomeron trajectory, in its simplest version is linear:

$$a_p \equiv a_p(t) = 1 + \delta_p + a'_p t. \quad (2)$$

We assume that the odderon contribution is of the same form as one of the pomeron, implying the relation $A_o = -iA_p$ and different values of adjustable parameters (labeled by subscript «O»):

Secondary reggeons are parameterized in a standard way with linear Regge trajectories and exponential residues.

The complete scattering amplitude used in our fits is:

$$A(s, t)_{pp}^{\bar{p}p} = A_p(s, t) + A_f(s, t) \pm [A_o(s, t) + A_O(s, t)]. \quad (3)$$

We use the norm where

$$\sigma_{\text{tot}}(s) = \frac{4\pi}{s} \text{Im} A(s, t=0) \text{ and } \frac{d\sigma_{\text{el}}}{dt}(s, t) = \frac{\pi}{s^2} |A(s, t)|^2. \quad (4)$$

The parameter $\rho(s)$, the ratio of the real and imaginary part of the forward scattering amplitude is

$$\rho(s) = \frac{\text{Re} A(s, t=0)}{\text{Im} A(s, t=0)}. \quad (5)$$

Next we show the main results. More details on the t and values of the fitted parameter can be found in [3].

Recent measurement of the phase $\rho(13 \text{ TeV}) = 0.09 \pm 0.01$ (or $\rho(13 \text{ TeV}) = 0.1 \pm 0.01$) [4] is widely discussed in the literature. The above data point lies well below the expectations (extrapolations) from lower energies, although this should not be dramatized. The exhibity of the odderon parameterization leaves room for perfect fits to this data point simultaneously with the total cross section. More critical is the inclusion of non-forward data, both for pp and $\bar{p}p$ especially around the dip region, to which the odderon is sensitive!

Figure 1 shows the results of our fits to pp and $\bar{p}p$ ρ -parameter data. The case without the odderon (shown as a dotted line) does not provide a description for the new 13 TeV data point. However, we found that neglect of the odderon has no significant effect on the description of the new TOTEM total cross section measurements.

The forward slope, defined as

$$B(s, t \rightarrow 0) = \frac{d}{dt} \ln \left(\frac{d\sigma}{dt} \right) \Big|_{t=0}, \quad (6)$$

where $A(s, t)$ is the elastic scattering amplitude, is shown in fig. 2 for pp and $\bar{p}p$ by using (6).

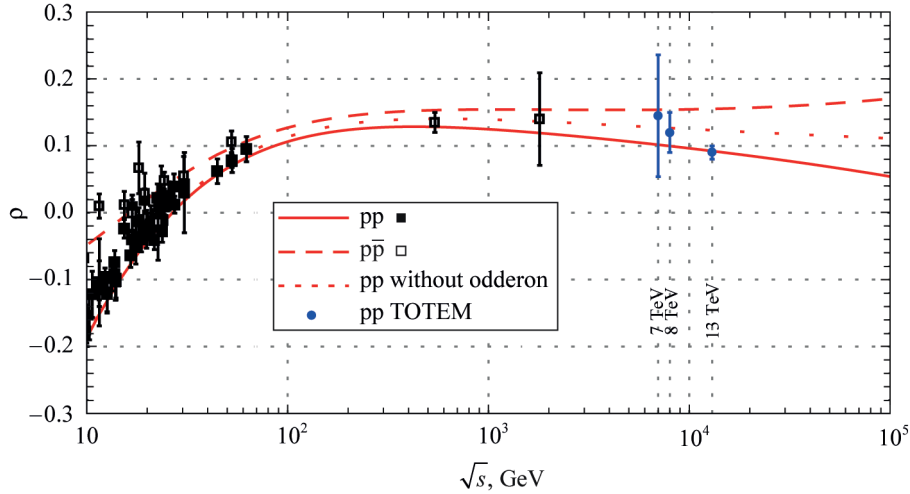


Fig. 1. Fits to pp and $\bar{p}p$ ratio ρ data using the model (1)–(3), (5)

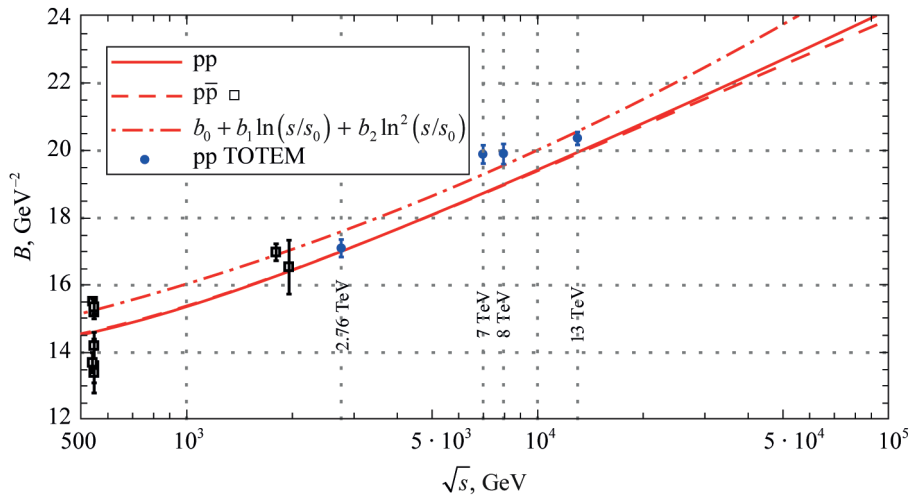


Fig. 2. pp and $\bar{p}p$ elastic slope $B(s)$ calculated from the fitted model (1)–(4)

In [3] we have shown that the odderon promotes a faster than $\ln s$ rise of the elastic slope $B(s)$ beyond the LHC energy region.

The non-exponential behavior of the low- $|t|$ pp differential cross section, called «break» was confirmed by recent measurements by the TOTEM Collaboration at the CERN LHC, first at 8 TeV (with a significance greater than 7σ) [5] and subsequently at 13 TeV [4].

Recently in [6], by using a simple pole Regge model with two leading (pomeron and odderon) and two secondary reggeon (f and ω) exchanges we have mapped the «break» fitted at the ISR into the LHC TOTEM 8 and 13 TeV data. We found that the observed «break» can be identified with the two-pion exchange (loop) in the t -channel both at the ISR and the LHC.

The most sensitive (crucial) test for any model of elastic scattering is the well-known dip-bump structure in the differential cross section [7]. None of the existing models was able to predict the position and dynamics of the dip for (especially when both pp and $\bar{p}p$ data are included). The first LHC measurements (at 7 TeV) [8] clearly demonstrated their failure. The result of the fits for pp and $\bar{p}p$ differential cross sections, using (1)–(4) is shown in fig. 3.

Within the framework of the model (1–3), we calculated the relative contribution from the different components of the amplitude

$$R_i(s) = \frac{\text{Im} A_i(s, t=0)}{\text{Im} A(s, t=0)} \quad (7)$$

to the pp and $\bar{p}p$ total cross sections, where $i = f + \omega$ for the relative weight of the reggeons, $i = P$ for the relative weight of the pomeron and $i = 0$ for the relative weight of the odderon. The result is shown in fig. 4. One

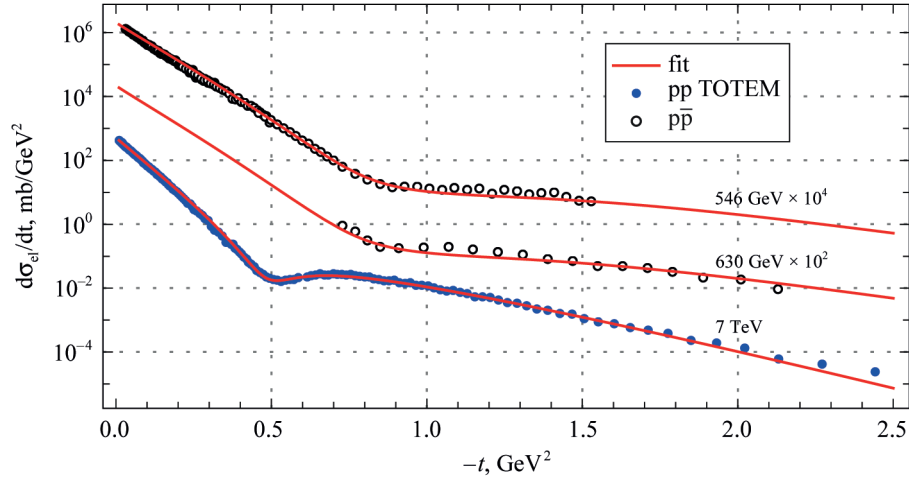


Fig. 3. Results of the fit for pp and $\bar{p}p$ differential cross section data using the model (1)–(4)

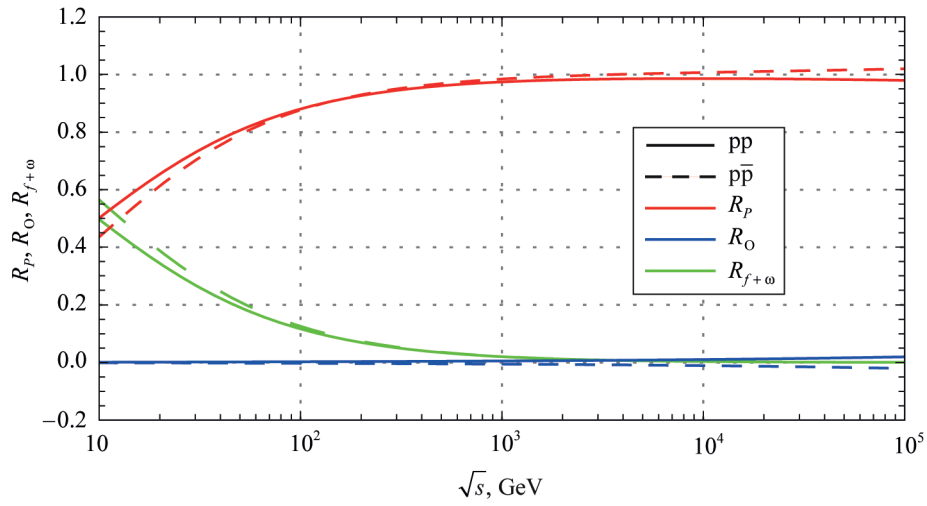


Fig. 4. Relative contribution from different components of the amplitude to pp and $\bar{p}p$ cross sections calculated from the model (1)–(3), (7)

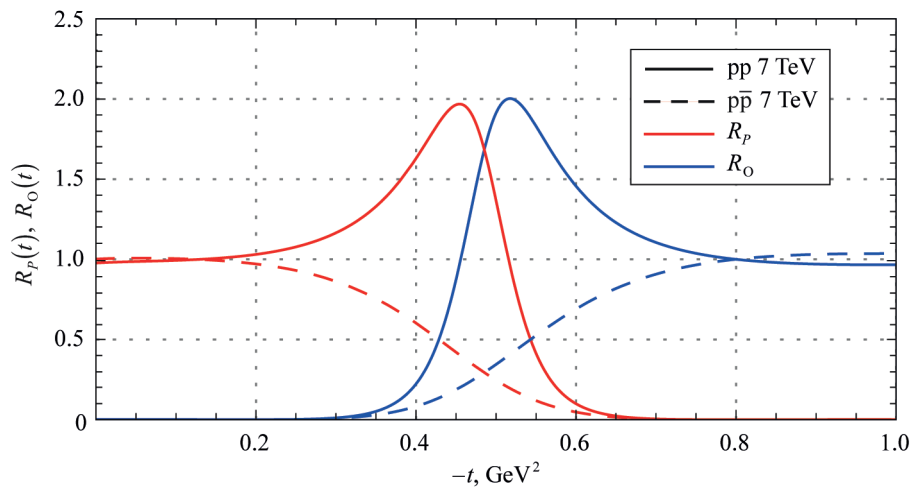


Fig. 5. Relative contribution from the pomeron and from the odderon to the pp and $\bar{p}p$ differential cross sections at 7 TeV calculated from the model (1)–(3), (8)

can see that at «low» energies (typically 10 GeV) the contribution from reggeons and the pomeron are nearly equal, but as the energy increases the pomeron takes over and at the same time the importance of the odderon is slightly growing.

We calculated the relative contributions of different components of the amplitude for non-forward scattering ($t \neq 0$):

$$R_i(s, t) = \frac{|A_i(s, t)|^2}{|A(s, t)|^2}. \quad (8)$$

The relative contribution in $-t$ from the pomeron R_p and of the odderon R_o at 7 TeV is shown in fig. 5. One can see that at low- $|t|$ values the pomeron completely dominates, then around the dip-bump region the pomeron-odderon importance is about 50 to 50 percent, and finally at higher $|t|$ values the odderon takes over. The role of the secondary reggeons is completely negligible in $-t$ at the LHC.

We conclude that the new data neither confirm, nor rule out the existence of the odderon.

Библиографические ссылки

1. Antchev G, Aspell P, Atanassov I, Avati V, Baechler J, Baldenegro Barrera C, et al. First measurement of elastic, inelastic and total cross-section at $\sqrt{s} = 13$ TeV by TOTEM and overview of cross-section data at LHC energies. ArXiv:1712.06153 [Preprint]. 2017 [cited 2019 April 16]. Available from: <https://arxiv.org/abs/1712.06153>.
2. Валл АН, Енковский ЛЛ, Струминский БВ. Взаимодействие адронов при высоких энергиях. *Физика элементарных частиц и атомного ядра*. 1988;19(1):180–223.
3. Bence N, Jenkovszky L, Szanyi I. New physics from TOTEM's recent measurements of elastic and total cross sections. ArXiv:1808.03588 [Preprint]. 2018 [cited 2019 February 12]. Available from: <https://arxiv.org/abs/1808.03588>.
4. Antchev G, Aspell P, Atanassov I, Avati V, Baechler J, Baldenegro Barrera C, et al. First determination of the ρ parameter at $\sqrt{s} = 13$ TeV – probing the existence of a colourless three-gluon bound state. ArXiv:1812.04732 [Preprint]. 2018 [cited 2018 December 15]. Available from: <https://arxiv.org/abs/1812.04732>.
5. Antchev G, Aspell P, Atanassov I, Avati V, Baechler J, Berardi V, et al. [TOTEM Collaboration]. Evidence for non-exponential elastic proton-proton differential cross-section at low- $|t|$ and $\sqrt{s} = 8$ TeV by TOTEM. *Nuclear Physics B*. 2015;899:527–546. DOI: 10.1016/j.nuclphysb.2015.08.010.
6. Jenkovszky L, Szanyi I, Tan C-I. Shape of Proton and the Pion Cloud. *The European Physical Journal A*. 2018;54(7):116. DOI: 10.1140/epja/i2018-12567-5.
7. Barbiellini G, Bozzo M, Darriulat P, Diambri Palazzi G, de Zorzi G, et al. Small-angle proton-proton elastic scattering at very high energies ($460 \text{ GeV}^2 < s < 2900 \text{ GeV}^2$). *Physics Letters B*. 1972;39(5):663–667. DOI: 10.1016/0370-2693(72)90025-1.
8. Antchev G, Aspell P, Atanassov I, Avati V, Baechler J, Berardi V, et al. [TOTEM Collaboration]. Measurement of proton-proton elastic scattering and total cross section at $\sqrt{s} = 7$ TeV. *Europhysics Letters*. 2013;101(2):21002. DOI: 10.1209/0295-5075/101/21002.

References

1. Antchev G, Aspell P, Atanassov I, Avati V, Baechler J, Baldenegro Barrera C, et al. First measurement of elastic, inelastic and total cross-section at $\sqrt{s} = 13$ TeV by TOTEM and overview of cross-section data at LHC energies. ArXiv:1712.06153 [Preprint]. 2017 [cited 2019 April 16]. Available from: <https://arxiv.org/abs/1712.06153>.
2. Wall AN, Jenkovszky LL, Struminsky BV. High energy hadron interactions. *Fizika elementarnykh chastits i atomnogo yadra*. 1988;19(1):180–223. Russian.
3. Bence N, Jenkovszky L, Szanyi I. New physics from TOTEM's recent measurements of elastic and total cross sections. ArXiv:1808.03588 [Preprint]. 2018 [cited 2019 February 12]. Available from: <https://arxiv.org/abs/1808.03588>.
4. Antchev G, Aspell P, Atanassov I, Avati V, Baechler J, Baldenegro Barrera C, et al. First determination of the ρ parameter at $\sqrt{s} = 13$ TeV – probing the existence of a colourless three-gluon bound state. ArXiv:1812.04732 [Preprint]. 2018 [cited 2018 December 15]. Available from: <https://arxiv.org/abs/1812.04732>.
5. Antchev G, Aspell P, Atanassov I, Avati V, Baechler J, Berardi V, et al. [TOTEM Collaboration]. Evidence for non-exponential elastic proton-proton differential cross-section at low- $|t|$ and $\sqrt{s} = 8$ TeV by TOTEM. *Nuclear Physics B*. 2015;899:527–546. DOI: 10.1016/j.nuclphysb.2015.08.010.
6. Jenkovszky L, Szanyi I, Tan C-I. Shape of Proton and the Pion Cloud. *The European Physical Journal A*. 2018;54(7):116. DOI: 10.1140/epja/i2018-12567-5.
7. Barbiellini G, Bozzo M, Darriulat P, Diambri Palazzi G, de Zorzi G, et al. Small-angle proton-proton elastic scattering at very high energies ($460 \text{ GeV}^2 < s < 2900 \text{ GeV}^2$). *Physics Letters B*. 1972;39(5):663–667. DOI: 10.1016/0370-2693(72)90025-1.
8. Antchev G, Aspell P, Atanassov I, Avati V, Baechler J, Berardi V, et al. [TOTEM Collaboration]. Measurement of proton-proton elastic scattering and total cross section at $\sqrt{s} = 7$ TeV. *Europhysics Letters*. 2013;101(2):21002. DOI: 10.1209/0295-5075/101/21002.

УДК 531:621-752:681

НЕЛИНЕЙНАЯ ЗАДАЧА УСТОЙЧИВОСТИ ВИБРОЗАЩИЩАЕМОЙ ПЛАСТИНЫ ПРИ СЛУЧАЙНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

О. М. ДУСМАТОВ¹⁾, М. У. ХОДЖАБЕКОВ²⁾

¹⁾Ташкентский государственный педагогический университет им. Низами,
ул. Бунёдкор, 27, 100185, г. Ташкент, Узбекистан

²⁾Самаркандский государственный архитектурно-строительный институт,
ул. Лолазор, 70, 140147, г. Самарканд, Узбекистан

Введение. Рассматривается задача устойчивости нелинейных колебаний пластины с динамическим гасителем и упругодиссипативными характеристиками гистерезисного типа при случайных воздействиях.

Объекты и методика исследования. Рассеяние энергии в материалах пластины и упругодемпфирующего элемента динамического гасителя колебаний учитывается в виде петли гистерезиса по гипотезе Писаренко – Богинича. Устойчивость виброзащищаемой системы изучена по методике, предложенной японским исследователем Ито, с помощью метода статистической линеаризации.

Результаты и их обсуждение. Получены условия устойчивости виброзащищаемой пластины, которые дают возможность определить области и границы устойчивости при разных значениях параметров пластины и динамического гасителя, а также при различных случайных воздействиях.

Заключение. При случайном воздействии в виде белого шума колебания виброзащищаемой пластины будут асимптотически устойчивыми, а условия устойчивости не зависят от спектральной плотности ускорения основания.

Ключевые слова: виброзащищаемая пластина; динамический гаситель колебаний; упругодиссипативные характеристики гистерезисного типа; условия устойчивости; случайные воздействия.

Образец цитирования:

Дусматов ОМ, Ходжабеков МУ. Нелинейная задача устойчивости виброзащищаемой пластины при случайных воздействиях. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2019;2:41–47.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-41-47>

For citation:

Dusmatov OM, Khodjabekov MU. The nonlinear problems of stability of the vibration proof plate under random influences. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2019;2: 41–47. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-41-47>

Авторы:

Олимжон Мусурмонович Дусматов – доктор физико-математических наук; заведующий кафедрой методики преподавания физики и астрономии физико-математического факультета.

Мураджон Усарович Ходжабеков – старший преподаватель кафедры механики строительства и сопротивления материалов строительного факультета.

Authors:

Olimjon M. Dusmatov, doctor of science (physics and mathematics); head of the department of teaching methods of physics and astronomy, faculty of physics-mathematics.
dusmatov62@bk.ru

Muradjon U. Khodjabekov, senior lecturer at the department of construction mechanics and resistance of materials, faculty of civil engineering.
uzedu@inbox.ru

THE NONLINEAR PROBLEMS OF STABILITY OF THE VIBRATION PROOF PLATE UNDER RANDOM INFLUENCES

O. M. DUSMATOV^a, M. U. KHODJABEKOV^b

^aTashkent State Pedagogical University named after Nizami,
27 Bunyodkor Street, Tashkent 100185, Uzbekistan

^bSamarkand State Architectural and Civil Engineering Institute,
70 Lolazor Street, Samarkand 140147, Uzbekistan

Corresponding author: O. M. Dusmatov (dusmatov62@bk.ru)

Introduction. The problem of stability of nonlinear vibrations of a plate with a dynamic dumper and elastic-dissipative characteristics of the hysteresis type under random influences it considered.

Object and methods of research. The energy scattering in materials of the plate and the elastic – dumping element of the dynamic vibration dumper is taken into account in the form of a hysteresis loop according to the Pisarenko – Boginich. The stability of the vibration protected system, proposed Japanese counterpart Ito, method is studied using the static linearization method.

Results and discussion. The stability conditions of the vibration-resistant plate and obtained, which make it possible to determine the region and boundaries of stability at different values of the parameters of the plate and the dynamic dumper at different random influences.

Conclusion. It is shown that under random action in the form of white noise vibrations of the vibration – protected plate will be asymptotically stable, and the stability conditions do not depend on the spectral density of the acceleration of the base.

Keywords: vibration-resistant plate; a dynamic dumper of vibrations; elastic-dissipative characteristics of the hysteresis; stability conditions; random influences.

Введение

Развитие современной техники, рост скорости и мощности двигательных установок, машин и агрегатов, разнообразие характеристик комфортабельности транспортных средств, требования к устойчивости и маневренности летательных аппаратов обуславливают потребность дальнейшего совершенствования и расширения областей применения эффективных способов и средств пассивной и активной виброзащиты.

Все вышесказанное требует создания комбинированных средств виброзащиты, отработки новых конструктивных форм динамических гасителей колебаний (ДГК), а также более детального исследования внутренней динамики и устойчивости нелинейных виброзащитных систем.

Для определения эффективности гашения колебаний механических систем актуальным является решение задачи устойчивости.

Объекты и методика исследования

Исследуем устойчивость нелинейных колебаний виброзащищаемой пластины при случайных воздействиях. В качестве объектов исследований рассмотрим пластины и ДГК.

Рассеяние энергии в материале пластины и упругодемпфирующем элементе ДГК учитывается по гипотезе Писаренко – Богинича [1]. Дифференциальные уравнения колебаний пластины с ДГК и упруго-диссипативными характеристиками гистерезисного типа при случайных воздействиях имеют вид [2]

$$\begin{aligned} \ddot{x}_{ik} + (\epsilon_1 + j\epsilon_2 \text{sign}\omega) p_{ik}^2 x_{ik} - (\epsilon_3 + j\epsilon_4 \text{sign}\omega) d_{3ik} u_{ik0} x_2 &= -d_{ik} W_0, \\ u_{ik0} \ddot{x}_{ik} + \ddot{x}_2 + (\epsilon_3 + j\epsilon_4 \text{sign}\omega) n^2 x_2 &= -W_0, \end{aligned} \quad (1)$$

где x_{ik} – перемещение точки ik пластины; $j^2 = -1$; ω – частота колебаний; p_{ik} – частота собственных колебаний точки ik пластины без рассеяния энергии; $d_{ik} = \frac{d_{1ik}}{d_{2ik}}$; $d_{3ik} = \frac{c}{\rho h d_{2ik}}$, ρ – плотность материала

пластины, h – толщина пластины, $d_{1ik} = \iint_s u_{ik} dx dy$, $d_{2ik} = \iint_s u_{ik}^2 dx dy$, $u_{ik} = u_{ik}(x, y)$ – собственные формы

колебаний точки ik пластины; $u_{ik0} = u_{ik}(x_0, y_0)$ – значения собственных форм колебаний точки ik пластины; x_2 – перемещение ДГК относительно точки, установленной на пластине; $n = \sqrt{\frac{c}{m}}$ – собственная частота ДГК, c – коэффициент жесткости упругодемпфирующего элемента ДГК, m – масса ДГК; $W_0 = W_0(t)$ – ускорение основания;

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &= 1 - (c_0 + T_1)\eta_1 - (T_2 + T_3)v_1; \quad \epsilon_2 = (c_0 + T_1)\eta_2 + (T_2 + T_3)v_2; \\ \epsilon_3 &= 1 - \theta_1(D_0 + F); \quad \epsilon_4 = \theta_2(D_0 + F),\end{aligned}$$

здесь

$$\begin{aligned}T_1 &= \frac{3D}{d_{2ik}\rho hp_{ik}^2} \sum_{i_1=1}^r c_{i_1} x_{ika}^{i_1} \frac{h^{i_1}}{2^{i_1}(i_1+3)} \iint_s u_{ik} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} (\alpha_{11} |\alpha_{11}|^{i_1}) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} (\alpha_{22} |\alpha_{22}|^{i_1}) \right) dx dy; \\ T_2 &= \frac{6D(1-\mu)}{d_{2ik}\rho hp_{ik}^2} \sum_{i_2} k_{i_2} x_{ika}^{i_2} \frac{h^{i_2}}{2^{i_2}(i_2+3)} \iint_s u_{ik} \left(\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} (\alpha_{33} |\alpha_{33}|^{i_2}) \right) dx dy; \\ T_3 &= \frac{2D(1-\mu)}{d_{2ik}\rho hp_{ik}^2} k_0 \iint_s u_{ik} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} (\alpha_{33}) dx dy;\end{aligned}$$

$\eta_1, \eta_2, v_1, v_2, \theta_1, \theta_2$ – коэффициенты линеаризации; $F = \sum_{n^*=1}^{s_1} D_{n^*} x_{2a}^{n^*}$ – декремент колебаний, D_{n^*} ($n^* = 0, \dots, s_1$), c_{i_1} ($i_1 = 0, \dots, r$) и k_{i_2} ($i_2 = 0, \dots, s_2$) – некоторые числа, определяемые по выбранным на экспериментальной кривой $\alpha_0 = f(x_2)$ точкам с координатами f_{i_1} , полученным при простом виде циклической деформации материала [3], x_{2a} – амплитуда переменной $x_2(t)$; $\alpha_{11} = \frac{\partial^2 u_{ik}}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 u_{ik}}{\partial y^2}$; $\alpha_{22} = \frac{\partial^2 u_{ik}}{\partial y^2} + \mu \frac{\partial^2 u_{ik}}{\partial x^2}$; $\alpha_{33} = \frac{\partial^2 u_{ik}}{\partial x \partial y}$; x_{ika} – амплитуда переменной $x_{ik}(t)$; μ – коэффициент Пуассона; $D = \frac{Eh^3}{12(1-\mu^2)}$ – цилиндрическая жесткость пластины, E – модуль Юнга.

Устойчивость рассматриваемой виброзащищаемой пластины при случайных процессах можно исследовать используя методику Ито [4–6]. Для этого решения дифференциальных уравнений (1) будем искать в следующем виде:

$$\begin{aligned}x_{ik} &= \sigma_{ik}(t)e^{j\omega t} + \xi_{ik}(t)e^{-j\omega t}, \\ x_2 &= \sigma_2(t)e^{j\omega t} + \xi_2(t)e^{-j\omega t},\end{aligned}\tag{2}$$

где $\sigma_{ik}(t)$, $\xi_{ik}(t)$ и $\sigma_2(t)$, $\xi_2(t)$ – амплитудные значения переменных x_{ik} и x_2 соответственно.

Вычисляя производные из выражения (2) и подставляя их в (1), имеем систему дифференциальных уравнений первого порядка

$$\begin{aligned}\dot{\sigma}_{ik} &= \frac{1}{2j\omega b_1} \left((\omega^2 - p_{ik}^2(\epsilon_1 + j\epsilon_2)) b_1 \sigma_{ik} + (\omega^2 - p_{ik}^2(\epsilon_1 - j\epsilon_2)) b_1 \xi_{ik} e^{-2j\omega t} + \right. \\ &\quad \left. + d_{3ik} u_{ik0} b_1 (\epsilon_3 + j\epsilon_4) \sigma_2 + d_{3ik} u_{ik0} b_1 (\epsilon_3 - j\epsilon_4) \xi_2 e^{-2j\omega t} - d_{ik} b_1 W_0 e^{-j\omega t} \right), \\ \dot{\xi}_{ik} &= -\frac{1}{2j\omega b_1} \left((\omega^2 - p_{ik}^2(\epsilon_1 + j\epsilon_2)) b_1 \sigma_{ik} e^{2j\omega t} + (\omega^2 - p_{ik}^2(\epsilon_1 - j\epsilon_2)) b_1 \xi_{ik} + \right. \\ &\quad \left. + d_{3ik} u_{ik0} b_1 (\epsilon_3 + j\epsilon_4) \sigma_2 e^{2j\omega t} + d_{3ik} u_{ik0} b_1 (\epsilon_3 - j\epsilon_4) \xi_2 - d_{ik} b_1 W_0 e^{j\omega t} \right), \\ \dot{\sigma}_2 &= \frac{1}{2j\omega} \left((\omega^2 - b_3(\epsilon_3 + j\epsilon_4)) \sigma_2 + (\omega^2 - b_3(\epsilon_3 - j\epsilon_4)) \xi_2 e^{-2j\omega t} + \right. \\ &\quad \left. + u_{ik0} p_{ik}^2(\epsilon_1 + j\epsilon_2) \sigma_{ik} + u_{ik0} p_{ik}^2(\epsilon_1 - j\epsilon_2) \xi_{ik} e^{-2j\omega t} - b_2 W_0 e^{-j\omega t} \right),\end{aligned}\tag{3}$$

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_2 = & -\frac{1}{2j\omega} \left((\omega^2 - b_3(\epsilon_3 + j\epsilon_4)) \sigma_2 e^{2j\omega t} + (\omega^2 - b_3(\epsilon_3 - j\epsilon_4)) \xi_2 + \right. \\ & \left. + u_{ik0}(\epsilon_1 + j\epsilon_2) p_{ik}^2 \sigma_{ik} e^{2j\omega t} + u_{ik0} p_{ik}^2 (\epsilon_1 - j\epsilon_2) \xi_{ik} - b_2 W_0 e^{j\omega t} \right), \end{aligned}$$

где $b_1 = n^2 d_{ik} + u_{ik0} d_{3ik}$; $b_2 = 1 - u_{ik0} d_{ik}$; $b_3 = n^2 + u_{ik0}^2 d_{3ik}$.

Используя метод статистической линеаризации на основе методики Ито, из (3) получим следующую систему:

$$\begin{aligned} d\sigma_{ik} = & \frac{1}{2j\omega} \left((\omega^2 - p_{ik}^2 (\epsilon_1 + j\epsilon_2)) \sigma_{ik} + d_{3ik} u_{ik0} b_1 (\epsilon_3 + j\epsilon_4) \sigma_2 \right) dt + \\ & + \frac{1}{4\omega^2} \sum_{l=1}^4 \gamma_{1l} dw_w(t), \\ d\xi_{ik} = & -\frac{1}{2j\omega} \left((\omega^2 - p_{ik}^2 (\epsilon_1 - j\epsilon_2)) \xi_{ik} + d_{3ik} u_{ik0} (\epsilon_3 - j\epsilon_4) \xi_2 \right) dt + \\ & + \frac{1}{4\omega^2} \sum_{l=1}^4 \gamma_{2l} dw_w(t), \\ d\sigma_2 = & \frac{1}{2j\omega} \left((\omega^2 - b_3 (\epsilon_3 + j\epsilon_4)) \sigma_2 + u_{ik0} p_{ik}^2 (\epsilon_1 + j\epsilon_2) \sigma_{ik} \right) dt + \\ & + \frac{1}{4\omega^2} \sum_{l=1}^4 \gamma_{3l} dw_w(t), \\ d\xi_2 = & -\frac{1}{2j\omega} \left((\omega^2 - b_3 (\epsilon_3 - j\epsilon_4)) \xi_2 + u_{ik0} p_{ik}^2 (\epsilon_1 - j\epsilon_2) \xi_{ik} \right) dt + \\ & + \frac{1}{4\omega^2} \sum_{l=1}^4 \gamma_{4l} dw_w(t), \end{aligned} \tag{4}$$

где $w_w(t)$ определяет процесс Винера и суммы $\sum_{l=1}^4 \gamma_{1l}$, $\sum_{l=1}^4 \gamma_{2l}$, $\sum_{l=1}^4 \gamma_{3l}$, $\sum_{l=1}^4 \gamma_{4l}$ вычисляются по следующей матрице [5]:

$$\|\gamma\gamma^T\| = \begin{vmatrix} 0 & d_{ik}^2 S_- & 0 & d_{ik} b_2 S_- \\ d_{ik}^2 S_+ & 0 & d_{ik} b_2 S_+ & 0 \\ 0 & d_{ik} b_2 S_- & 0 & b_2^2 S_- \\ d_{ik} b_2 S_+ & 0 & b_2^2 S_- & 0 \end{vmatrix}.$$

Спектральная плотность W_0 есть [5]

$$S_{\mp} = S_0(\omega) \mp j\Psi_0(\omega),$$

где

$$S_0(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau) \cos \omega\tau d\tau;$$

$$\Psi_0(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau) \sin \omega\tau d\tau,$$

здесь $R(\tau)$ – корреляционная функция ускорения основания: $R(\tau) = \langle W_0(t) W_0(t + \tau) \rangle$; $\langle W_0(t) W_0(t + \tau) \rangle$ – математическое ожидание ускорения основания, τ – время корреляции.

Устойчивость системы, имеющей упругодиссипативные характеристики гистерезисного типа, изучена в работе [7] по методике Ито с помощью статистической линеаризации. Используя этот метод, найдем математические ожидания уравнений (4):

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle\sigma_{ik}\rangle}{dt} &= \frac{1}{2j\omega} \left((\omega^2 - p_{ik}^2(\epsilon_1 + j\epsilon_2)) \langle\sigma_{ik}\rangle + d_{3ik} u_{ik0} (\epsilon_3 + j\epsilon_4) \langle\sigma_2\rangle \right), \\
\frac{d\langle\xi_{ik}\rangle}{dt} &= \frac{-1}{2j\omega} \left((\omega^2 - p_{ik}^2(\epsilon_1 - j\epsilon_2)) \langle\xi_{ik}\rangle + d_{3ik} u_{ik0} (\epsilon_3 - j\epsilon_4) \langle\xi_2\rangle \right), \\
\frac{d\langle\sigma_2\rangle}{dt} &= \frac{1}{2j\omega} \left((\omega^2 - b_3(\epsilon_3 + j\epsilon_4)) \langle\sigma_2\rangle + u_{ik0} p_{ik}^2 (\epsilon_1 + j\epsilon_2) \langle\sigma_{ik}\rangle \right), \\
\frac{d\langle\xi_2\rangle}{dt} &= \frac{-1}{2j\omega} \left((\omega^2 - b_3(\epsilon_3 - j\epsilon_4)) \langle\xi_2\rangle + u_{ik0} p_{ik}^2 (\epsilon_1 - j\epsilon_2) \langle\xi_{ik}\rangle \right).
\end{aligned} \tag{5}$$

Следовательно, устойчивость рассматриваемой системы не зависит от спектральной плотности ускорения основания – в отличие от случая параметрических случайных воздействий, когда такая зависимость имеется.

Результаты и их обсуждение

Определим условия устойчивости виброзащищаемой пластины. Для этого найдем решение системы дифференциальных уравнений (5), корни характеристических уравнений которой есть

$$\begin{aligned}
\lambda_{1,2} &= \frac{1}{4j\omega} \left(2\omega^2 - b_3\epsilon_3 - \epsilon_1 p_{ik}^2 - (\epsilon_2 p_{ik}^2 + b_3\epsilon_4) j \right) + \frac{\pm\lambda^* + j\lambda^{**}}{4\omega}, \\
\lambda_{3,4} &= \frac{1}{4j\omega} \left(-2\omega^2 + b_3\epsilon_3 + \epsilon_1 p_{ik}^2 - (\epsilon_2 p_{ik}^2 + b_3\epsilon_4) j \right) + \frac{\pm\lambda^* + j\lambda^{**}}{4\omega},
\end{aligned} \tag{6}$$

где

$$\lambda^* = \sqrt{\frac{-\kappa + \sqrt{\kappa^2 + \kappa_0^2}}{2}}; \quad \lambda^{**} = \text{sign} \kappa_0 \sqrt{\frac{\kappa + \sqrt{\kappa^2 + \kappa_0^2}}{2}},$$

$$\kappa = (b_3\epsilon_3 - \epsilon_1 p_{ik}^2)^2 - (\epsilon_2 p_{ik}^2 - b_3\epsilon_4)^2 + 4d_{3ik} u_{ik0}^2 p_{ik}^2 (\epsilon_1\epsilon_3 - \epsilon_2\epsilon_4);$$

$$\kappa_0 = 2(b_3\epsilon_3 - \epsilon_1 p_{ik}^2)(\epsilon_2 p_{ik}^2 - b_3\epsilon_4) - 4d_{3ik} u_{ik0}^2 p_{ik}^2 (\epsilon_2\epsilon_3 + \epsilon_1\epsilon_4).$$

С учетом (6) найдем решения системы дифференциальных уравнений (5) в виде

$$\langle\sigma_{ik}\rangle = \langle C_1^{(1)}\rangle e^{\lambda_1 t} + \langle C_1^{(2)}\rangle e^{\lambda_2 t},$$

$$\langle\xi_{ik}\rangle = \langle D_1^{(1)}\rangle e^{\lambda_3 t} + \langle D_1^{(2)}\rangle e^{\lambda_4 t},$$

$$\langle\sigma_2\rangle = \langle C_2^{(1)}\rangle e^{\lambda_1 t} + \langle C_2^{(2)}\rangle e^{\lambda_2 t},$$

$$\langle\xi_2\rangle = \langle D_2^{(1)}\rangle e^{\lambda_3 t} + \langle D_2^{(2)}\rangle e^{\lambda_4 t}.$$

Здесь коэффициенты определяются из условия нормирования, т. е.

$$\langle C_1^{(1)}\rangle = \frac{d_{3ik} u_{ik0} \sqrt{\epsilon_3^2 + \epsilon_4^2}}{\sqrt{z_1^2 + z_2^2}},$$

$$z_1 = (\epsilon_2 p_{ik}^2 - b_3\epsilon_4 + \lambda^*)^2 - (\epsilon_1 p_{ik}^2 - b_3\epsilon_3 - \lambda^{**})^2 - 4d_{3ik}^2 u_{ik0}^2 (\epsilon_3^2 - \epsilon_4^2),$$

$$z_2 = -2(\epsilon_2 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_4 + \lambda^*)(\epsilon_1 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_3 - \lambda^{**}) - 8\epsilon_3 \epsilon_4 d_{3ik}^2 u_{ik0}^2;$$

$$\langle C_1^{(2)} \rangle = \frac{d_{3ik} u_{ik0} \sqrt{\epsilon_3^2 + \epsilon_4^2}}{\sqrt[4]{z_3^2 + z_4^2}},$$

$$z_3 = (\epsilon_2 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_4 - \lambda^*)^2 - (\epsilon_1 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_3 - \lambda^{**})^2 - 4d_{3ik}^2 u_{ik0}^2 (\epsilon_3^2 - \epsilon_4^2),$$

$$z_4 = -2(\epsilon_2 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_4 - \lambda^*)(\epsilon_1 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_3 - \lambda^{**}) - 8\epsilon_3 \epsilon_4 d_{3ik}^2 u_{ik0}^2;$$

$$\langle C_2^{(1)} \rangle = \frac{\sqrt{(\epsilon_2 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_4 + \lambda^*)^2 + (\epsilon_1 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_3 - \lambda^{**})^2}}{\sqrt[4]{z_1^2 + z_2^2}};$$

$$\langle C_2^{(2)} \rangle = \frac{\sqrt{(\epsilon_2 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_4 - \lambda^*)^2 + (\epsilon_1 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_3 - \lambda^{**})^2}}{\sqrt[4]{z_3^2 + z_4^2}};$$

$$\langle D_1^{(1)} \rangle = \frac{\sqrt{(\epsilon_2 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_4 - \lambda^*)^2 + (\epsilon_1 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_3 + \lambda^{**})^2}}{\sqrt[4]{z_5^2 + z_6^2}};$$

$$z_5 = (\epsilon_2 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_4 - \lambda^*)^2 - (\epsilon_1 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_3 + \lambda^{**})^2 - 4p_{ik}^4 u_{ik0}^2 (\epsilon_1^2 - \epsilon_2^2),$$

$$z_6 = -2(\epsilon_2 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_4 - \lambda^*)(\epsilon_1 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_3 + \lambda^{**}) + 8\epsilon_1 \epsilon_2 p_{ik}^4 u_{ik0}^2;$$

$$\langle D_1^{(2)} \rangle = \frac{\sqrt{(\epsilon_2 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_4 + \lambda^*)^2 + (\epsilon_1 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_3 + \lambda^{**})^2}}{\sqrt[4]{z_7^2 + z_8^2}};$$

$$z_7 = (\epsilon_2 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_4 - \lambda^*)^2 - (\epsilon_1 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_3 + \lambda^{**})^2 - 4p_{ik}^4 u_{ik0}^2 (\epsilon_1^2 - \epsilon_2^2),$$

$$z_8 = -2(\epsilon_2 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_4 + \lambda^*)(\epsilon_1 p_{ik}^2 - b_3 \epsilon_3 + \lambda^{**}) + 8\epsilon_1 \epsilon_2 p_{ik}^4 u_{ik0}^2;$$

$$\langle D_2^{(1)} \rangle = \frac{p_{ik}^2 u_{ik0} \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}}{\sqrt[4]{z_5^2 + z_6^2}};$$

$$\langle D_2^{(2)} \rangle = \frac{p_{ik}^2 u_{ik0} \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}}{\sqrt[4]{z_7^2 + z_8^2}}.$$

Среднеквадратичные отклонения стационарно-амплитудных значений переменных x_{ik} определяются из выражения

$$\langle x_{ika}^2 \rangle = 4(\langle C_1^{(1)} \rangle + \langle C_1^{(2)} \rangle)(\langle D_1^{(1)} \rangle + \langle D_1^{(2)} \rangle).$$

Для устойчивости нелинейных случайных колебаний виброзащищаемой пластины с ДГК достаточно, чтобы действительные части корней характеристических уравнений были отрицательными, т. е.

$$\begin{aligned} -\epsilon_2 p_{ik}^2 - \epsilon_4 b_3 + \lambda^* &< 0, \\ -\epsilon_2 p_{ik}^2 - \epsilon_4 b_3 - \lambda^* &< 0. \end{aligned} \tag{7}$$

Поскольку ϵ_2, ϵ_4 – положительные функции, определяющие рассеяние энергии в материалах пластины и ДГК, для достаточно малых значений $\langle x_{ika} \rangle, \langle x_{2a} \rangle$ значения κ, κ_0 будут положительными, то $\lambda^* > 0$. Первое неравенство в (7) является условием устойчивости виброзащищаемой пластины с ДГК:

$$\lambda^* < \epsilon_2 p_{ik}^2 + \epsilon_4 b_3. \quad (8)$$

Упростив по параметрам неравенство (8), имеем

$$\epsilon_2 \epsilon_4 \left(\left(\epsilon_2 p_{ik}^2 + \epsilon_4 n^2 + \epsilon_4 d_{3ik} u_{ik0}^2 \right)^2 + \left(\epsilon_1 p_{ik}^2 - \epsilon_3 n^2 - \epsilon_3 d_{3ik} u_{ik0}^2 \right)^2 \right) + \left(\epsilon_2 \epsilon_3 + \epsilon_1 \epsilon_4 \right)^2 p_{ik}^2 d_{3ik} u_{ik0}^2 > 0.$$

Из полученного неравенства следует, что при наличии случайных воздействий в виде белого шума колебания виброзащищаемой пластины асимптотически устойчивы, а условия устойчивости не зависят от спектральной плотности ускорения основания.

Заключение

Использование методики Ито позволяет определить аналитические выражения условия устойчивости виброзащищаемой пластины, на основе которых можно анализировать области и границы устойчивости при различных параметрах пластины и ДГК (отношение масс, место установки ДГК, диссипативные свойства материалов пластины, а также упругодемпфирующих элементов и частоты настройки ДГК) и при случайных воздействиях. Наличие нелинейных свойств виброзащищаемой системы и ДГК обуславливает качественные особенности, связанные с определением оптимальных параметров и области устойчивости системы, повышением эффективности гашения колебаний в широком диапазоне частот.

Библиографические ссылки

1. Писаренко ГС, Богинич ОЕ. *Колебания кинематически возбуждаемых механических систем с учетом диссипации энергии*. Киев: Наукова думка; 1981. 220 с.
2. Павловский МА, Рыжков ЛМ, Яковенко ВБ, Дусматов ОМ. *Нелинейные задачи динамики виброзащитных систем*. Киев: Техника; 1997. 204 с.
3. Писаренко ГС, Яковлев АП, Матвеев ВВ. *Вибропоглощающие свойства конструкционных материалов. Справочник*. Киев: Наукова думка; 1971. 327 с.
4. Bernt O. *Stochastic differential equations: An introduction with applications*. New York: Springer Science and Business Media Press; 2010. 379 p.
5. Cho WS To. *Nonlinear random vibrations: Analytical techniques and applications*. Boca Raton: CRC Press; 2012. 293 p.
6. Villarroel J. On solutions to Ito stochastic differential equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2003; 158(1):225–231. DOI: 10.1016/S0377-0427(03)00477-1.
7. Pavlovskii MA, Ryzhkov LM. Random parametric oscillations of elastic systems with hysteresis energy dissipation. *Soviet of Applied Mechanics*. 1990;26(9):890–895. DOI: 10.1007/BF00888776.

References

1. Pisarenko GS, Boginich OE. *Kolebaniya kinematicheskikh vozvuzhdaemykh mekhanicheskikh sistem s uchetom dissipatsii energii* [Vibration kinematic lifted mechanical system with calculs losing energy]. Kiev: Naukova dumka; 1981. 220 p. Russian.
2. Pavlovsky MA, Rijkov LM, Yakovenko VB, Dusmatov OM. *Nelineinye zadachi dinamiki vibrozashchitnykh sistem* [Nonlinear problems of dynamics of vibro-protected system]. Kiev: Tekhnika; 1997. 204 p. Russian.
3. Pisarenko GS, Yakovlev AP, Matveev VV. *Vibropogloshchayushchie svoystva konstruktсионnykh materialov. Spravochnik* [Vibroabsorbing properties of construction materials. Handbook]. Kiev: Naukova dumka; 1971. 327 p. Russian.
4. Bernt O. *Stochastic differential equations: An introduction with applications*. New York: Springer Science and Business Media Press; 2010. 379 p.
5. Cho WS To. *Nonlinear random vibrations: Analytical techniques and applications*. Boca Raton: CRC Press; 2012. 293 p.
6. Villarroel J. On solutions to Ito stochastic differential equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2003; 158(1):225–231. DOI: 10.1016/S0377-0427(03)00477-1.
7. Pavlovskii MA, Ryzhkov LM. Random parametric oscillations of elastic systems with hysteresis energy dissipation. *Soviet of Applied Mechanics*. 1990;26(9):890–895. DOI: 10.1007/BF00888776.

УДК 620.191:621.373.820

ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИМЕСИ В ИОННО-ЛЕГИРОВАННЫХ СЛОЯХ ПРИ БЫСТРОЙ ТЕРМООБРАБОТКЕ ПОДЗАТВОРНОГО ДИЭЛЕКТРИКА

**В. М. АНИЩИК¹⁾, В. А. ГОРУШКО²⁾,
В. А. ПИЛИПЕНКО¹⁾, В. В. ПОНАРЯДОВ¹⁾, В. А. СОЛОДУХА³⁾**

¹⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

²⁾Государственный центр «Белмикрoанализ» филиала НТЦ «Белмикросистемы» ОАО «Интеграл»,
ул. Казинца, 121А, 220108, г. Минск, Беларусь

³⁾ОАО «Интеграл», ул. Казинца, 121А, 220108, г. Минск, Беларусь

Введение. Приведены результаты исследования влияния быстрой термической обработки подзатворного диэлектрика на поверхностное сопротивление и глубину залегания ранее сформированных ионно-легированных слоев.

Образец цитирования:

Анищик ВМ, Горушко ВА, Пилипенко ВА, Понарядов ВВ, Солодуха ВА. Перераспределение примеси в ионно-легированных слоях при быстрой термообработке подзатворного диэлектрика. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2019;2:48–53.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-48-53>

For citation:

Anishchik VM, Harushka VA, Pilipenka UA, Ponariadov VV, Saladukha VA. Redistribution of impurity in ion-doped layers during fast heat treatment of gate dielectric. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2019;2:48–53. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-48-53>

Авторы:

Виктор Михайлович Анищик – доктор физико-математических наук; профессор кафедры физики твердого тела физического факультета.

Валентина Алексеевна Горушко – ведущий инженер.

Владимир Александрович Пилипенко – член-корреспондент НАН Беларуси, доктор технических наук; профессор кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники физического факультета.

Владимир Васильевич Понарядов – кандидат физико-математических наук, доцент; заместитель декана физического факультета.

Виталий Александрович Солодуха – кандидат технических наук; генеральный директор.

Authors:

Victor M. Anishchik, doctor of science (physics and mathematics); professor at the department of solid-state physics, faculty of physics.

anishchik@bsu.by

Valiantsina A. Harushka, leading engineer.

office@bms.by

Uladzimir A. Pilipenka, corresponding member of the National Academy of Sciences of Belarus, doctor of science (engineering); professor at the department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics.

office@bms.by

Vladimir V. Ponariadov, PhD (physics and mathematics), doцент; deputy dean of the faculty of physics.

ponariadov@bsu.by

Vitali A. Saladukha, PhD (engineering); general director.

vsaladukha@integral.by

Методика эксперимента. На кремниевых пластинах различного типа проводимости формировался подзатворный диэлектрик толщиной 42,5 нм и проводилось легирование кремния ионами бора и фосфора с последующим отжигом в диффузионной печи при температуре 1150 °С в течение 90–270 мин в среде азота. Далее часть пластин подвергалась быстрой термической обработке путем облучения их нерабочей стороны некогерентным световым потоком в естественных атмосферных условиях в течение 7 с при температуре 1100 °С.

Результаты эксперимента и их обсуждение. Установлено, что данная обработка подзатворного диэлектрика, полученного путем пирогенного окисления кремния, приводит к уменьшению величины поверхностного сопротивления ранее сформированных ионно-легированных слоев на 1–2 % и увеличению глубины залегания введенной примеси на 0,05 мкм для фосфора и на 0,02 мкм для бора.

Заключение. Уменьшение величины поверхностного сопротивления связано с электрической доактивацией введенной примеси в процессе быстрой термической обработки, а увеличение глубины ее залегания – с удвоением коэффициента диффузии, обусловленным электрическим полем, возникающим под воздействием фотонного потока.

Ключевые слова: ионно-легированные слои; быстрая термическая обработка; поверхностное сопротивление; коэффициент диффузии.

REDISTRIBUTION OF IMPURITY IN ION-DOPED LAYERS DURING FAST HEAT TREATMENT OF GATE DIELECTRIC

V. M. ANISHCHIK^a, V. A. HARUSHKA^b,
U. A. PILIPENKA^a, V. V. PONARIADOV^a, V. A. SALADUKHA^c

^aBelarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus

^b«Belmikroanaliz» of the branch «Belmikrosistemy», JSC «Integral»,
121A Kazinca Street, Minsk 220108, Belarus

^cJSC «Integral», 121A Kazinca Street, Minsk 220108, Belarus

Corresponding author: V. V. Ponariadov (ponariadov@bsu.by)

Introduction. The investigation results are shown about influence of the rapid thermal treatment of the gate dielectric for the surface resistance and the location depth of the previously formed ion-doped layers.

Experimental methods. On the silicon wafers of the different type of conductivity a gate dielectric was formed with the thickness of 42.5 nm and silicon was doped with the boron and phosphorus ions with the subsequent annealing in the diffusion oven at the temperature of 1150 °C during 90–270 min in the nitrogen medium. Further, some wafers were subjected to the rapid thermal treatment by means of irradiation of the non-working side with the non-coherent light beam under the natural atmospheric conditions during 7 s at the temperature of 1100 °C.

Experimental results and discussion. It was determined, that the given treatment of the gate dielectric, obtained by means of the silicon pyrogenic oxidation, results in reduction of the surface resistance value of the previously formed ion-doped layers by 1–2 % and in increase of the bulk depth of the introduced admixture for 0.05 μm for phosphorus and for 0.02 μm for boron.

Conclusion. It was demonstrated, that reduction of the surface resistance value is in correlation with the electric pre-activation of the introduced admixture in the rapid thermal treatment, and increase of its bulk depth – with the doubled value of the diffusion ratio, determined by the electric field, occurring under influence of the photon stream.

Keywords: ion-doped layer; fast heat treatment; surface resistance; diffusion factor.

Введение

Основное место в технологическом процессе изготовления полупроводниковых приборов и интегральных микросхем занимает термическая обработка [1–4]. При современном уровне интеграции, когда с уменьшением топологических размеров элементов уменьшается толщина всех пассивных и активных слоев, а также глубина залегания p – n -переходов, все большее значение приобретает снижение тепловой нагрузки, оказываемой на полупроводниковую пластину в процессе формирования на ней полупроводниковых приборов и интегральных микросхем. Это требует применения технологических

процессов, уменьшающих отрицательное воздействие высоких температур на параметры изготавливаемых изделий электронной техники. Одним из таких процессов является быстрый термический отжиг некогерентным световым излучением секундной длительности, который в последнее время находит широкое применение в электронной промышленности. В отличие от термического отжига он существенно уменьшает время температурной нагрузки, что не позволяет развиваться трудноконтролируемым диффузионным процессам, приводящим к нежелательным изменениям в характеристиках структуры [5–7]. В [8] показано улучшение свойств подзатворного диэлектрика при использовании данной обработки, однако не исследовано ее воздействие на ранее сформированные ионно-легированные слои.

Цель работы – изучение влияния быстрой термической обработки подзатворного диэлектрика на перераспределение примеси в ранее сформированных ионно-легированных слоях.

Методика эксперимента

Для изучения влияния быстрой термической обработки на параметры ранее сформированных ионно-легированных слоев использовалось два подхода по созданию *p*- и *n*-канального МОП-транзистора. На эпитаксиальных структурах 18КДБ-6,0/КДБ-0,005 и 28КЭФ-5,5/КЭМ-0,01 ориентации <100> путем их пирогенного окисления при 850 °С формировался подзатворный диэлектрик толщиной 42,5 нм. Затем на пластинах КЭМ-0,01 проводилось ионное легирование бором дозой 85 мкКл/см² и энергией 60 кэВ с последующим отжигом при 1150 °С в течение 270 мин, а на пластинах КДБ-0,005 – легирование фосфором дозой 3 мКл/см² и энергией 75 кэВ с последующим отжигом при 1150 °С в течение 90 мин в среде азота. Далее на части пластин, легированных как бором, так и фосфором, проводилась быстрая термическая обработка путем облучения нерабочей стороны пластины некогерентным световым потоком в естественных атмосферных условиях при температуре 1100 °С в течение 7 с.

Поверхностное сопротивление R_s , характеризующее объемное (интегральное) сопротивление, проходящее на квадрат поверхности, находили с помощью четырехзондовой установки RS-30. Через два токовых зонда пропускался ток 100 мА, а на двух потенциальных зондах определялась величина падения напряжения. Погрешность измерений при доверительной вероятности 0,997 составляла ±4 %.

Глубины залегания *p* – *n*-переходов исследовали методом косого шлифа с последующим его декорированием и проведением измерений на интерференционном микроскопе МИИ-4 [9; 10].

Результаты эксперимента и их обсуждение

В итоге проведенных исследований установлено, что быстрая термическая обработка подзатворного диэлектрика приводит к уменьшению величины поверхностного сопротивления ранее сформированных ионно-легированных слоев (см. таблицу). Это означает, что в результате отжига происходит электрическая доактивация внедренной примеси. При этом глубина залегания *p* – *n*-перехода незначительно увеличивается. Такое поведение внедренной примеси за столь малое время (при быстрой термообработке) невозможно объяснить только ускоренной диффузией по вакансиям и междоузлиям. В связи с этим следует рассмотреть вклад в данный процесс мощного светового потока.

Параметры ионно-легированных слоев после различных видов обработки

Parameters of the ion-doped layers after different types of treatment

Тип и режимы внедрения ионов	Термообработка		Поверхностное сопротивление, Ом/□	Глубина <i>p</i> – <i>n</i> -перехода, мкм
	Вид	Режим		
В ⁺ Д = 85 мкКл/см ² Е = 60 кэВ	Длительная	1150 °С, 270 мин	92,8	2,10
	Быстрая	1100 °С, 7 с	90,9	2,12
Р ⁺ Д = 3 мКл/см ² Е = 75 кэВ	Длительная	1150 °С, 90 мин в среде азота	352,9	4,60
	Быстрая	1100 °С, 7 с	348,6	4,65

Примечание. Д и Е – доза и энергия легирования соответственно.

Перераспределение примеси в процессе нагрева описывается уравнением

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = \bar{\nabla} \cdot (D_i \bar{\nabla} N_i + z_i \mu_i N_i \bar{E}), \quad (1)$$

где N_i – концентрация *i*-й примеси; D_i – коэффициент диффузии *i*-й примеси;

$$z_i = \begin{cases} 1 & \text{для акцепторов,} \\ -1 & \text{для доноров;} \end{cases}$$

$\mu_i = \frac{D_i}{kT}$ – подвижность i -й примеси; \vec{E} – вектор напряженности электрического поля во время обработки ионно-легированного слоя.

При быстрой термообработке коэффициент диффузии в выражении (1) зависит от температуры, поэтому его изменение в процессе обработки учитывалось путем решения уравнения теплопроводности. Если предположить, что световой поток генерирует электронно-дырочные пары равномерно в области ионно-легированного слоя, то в ней возникает разность потенциалов ϕ . Учитывая, что во время такой обработки напряженность электрического поля

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi = -kT(N_i)^{-1}\vec{\nabla}N_i,$$

то в случае доноров плотность диффузионного потока можно описать выражением

$$D_d\vec{\nabla}N_d - \mu_d N_d E = D_d\vec{\nabla}N_d - D_d(kT)^{-1}N_d - kT(N_d)^{-1}\vec{\nabla}N_d = 2D_d\vec{\nabla}N_d. \quad (2)$$

Аналогично для акцепторов получим

$$D_a\vec{\nabla}N_a + \mu_a N_a E = 2D_a\vec{\nabla}N_a. \quad (3)$$

Из (2) и (3) видно, что совместная диффузия носителей заряда и примеси приводит к появлению электрического поля, которое удваивает коэффициент диффузии примеси в ионно-легированных слоях кремния и обуславливает увеличение глубины залегания p – n -перехода. В случае традиционного отжига ионно-легированных слоев такое удвоение коэффициента диффузии имеет место в первоначальный момент отжига, поскольку в силу высокой подвижности носителей заряда они быстро рассасываются, и в дальнейшем происходит диффузия только внедренной примеси. При быстрой термообработке идет постоянное «подкачивание» электронов и дырок световым потоком, вызывая ускоренный процесс диффузии (в отличие от длительной термообработки).

Приведенные выше данные о глубине залегания p – n -перехода после быстрой термообработки подзатворного диэлектрика свидетельствуют о том, что в случае фосфора она увеличилась на 0,05 мкм, а в случае бора – на 0,02 мкм. Для объяснения этого проведем расчет перераспределения примеси при быстрой термообработке ионно-легированных слоев путем решения уравнения (1) с учетом (2), (3) и условия нестационарности нагрева кремниевых пластин.

В качестве начального распределения примесей, которыми являются бор и фосфор, после ионного легирования брались общепринятое гауссово распределение

$$N(x) = D \exp\left(-\frac{x - R_p}{\sqrt{2}\Delta R_p}\right) \left(\sqrt{2\pi}\Delta R_p \operatorname{erfc}\left(-\frac{R_p}{\sqrt{2}\Delta R_p}\right) \right)^{-1},$$

где $D = \int_0^{\infty} N(x) dx$ – полная доза легирования; R_p и ΔR_p – нормальная длина пробега ионов и его дисперсия.

Поскольку легирование бора и фосфора в нашем случае осуществлялось в эпитаксиальную пленку, расположенную над высоколегированными областями кремния, то при расчете учитывалось наличие такого высоколегированного скрытого слоя, распределение которого задавалось экспериментально полученным выражением

$$N_0(x) = \frac{N_{\max}}{1 + \exp(-(x - h)/a)},$$

где $N_{\max} = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2}$ – максимальная поверхностная концентрация примеси в скрытом высоколегированном n^+ -слое; h – толщина эпитаксиальной пленки, мкм; a – параметр, характеризующий крутизну переходной области эпитаксиальная пленка – скрытый n^+ -слой ($a = 0,07$ мкм для хлоридно-гидридной эпитаксии).

Аналитическое решение для (1) находили с использованием функции Грина. По определению она удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial G(x - x', t)}{\partial t} = \dot{D}(t) \frac{\partial^2 G(x - x', t)}{\partial x^2} + \delta(x - x'), \quad (4)$$

где $\check{D}(t)$ – коэффициент диффузии примеси:

$$\check{D}(t) = \begin{cases} D(T(t)) & \text{при длительной термообработке,} \\ 2D(T(t)) & \text{при быстрой термообработке;} \end{cases}$$

$\delta(x - x')$ – дельта-функция Дирака.

Поскольку решение уравнения (4) при условии отсутствия утечки через поверхность есть

$$G(x - x', t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D_i}} \left(\exp\left(-\frac{(x - x')^2}{4D_i}\right) + \exp\left(-\frac{(x - x')^2}{4D_i}\right) \right), \quad (5)$$

где $D_i = \int D(t) dt$, то после быстрой термообработки распределение примеси определяется выражением

$$N_1(x) = \int G(x - x', t_1) N_0(x') dx'. \quad (6)$$

После m -й операции быстрой термообработки равенство (6) примет вид

$$N_m(x) = \int G(x - x_m, t_m) N_{0m-1}(x_m) dx_m. \quad (7)$$

Используя соотношения (5) и (7), прямым интегрированием получаем окончательное распределение примеси после разных видов и режимов обработок:

$$N(x) = D \left(\sqrt{2\pi(2D^* + \Delta R_p^2)} \operatorname{erfc}\left(-R_p(\sqrt{2\Delta R_p})^{-1}\right) \right)^{-1} \times \\ \times \sum_{i=\pm} \exp\left(-\frac{(x - iR_p)^2}{4D^* + 2\Delta R_p^2}\right) \operatorname{erfc}(-\tau_i),$$

где $\tau_{\pm} = \left(\pm x \sqrt{\Delta R_p^2 (2D^*)^{-1}} + R_p \sqrt{2D^* (\Delta R_p^2)^{-1}} \right) (4D^* + 2\Delta R_p^2)^{-1/2}$; $D^* = \sum_{i=1}^m \int_0^{t_i} \check{D}(T(t)) dt$, $t_i = \tau_i + \tau'_i$ – полное время одной i -й обработки; τ'_i – время остывания пластины кремния после i -го процесса быстрой термической обработки.

Данные расчеты показали, что за один процесс быстрой термообработки в случае бора происходит его перераспределение на величину 0,02 мкм, а фосфора – на 0,045 мкм, что полностью соответствует приведенным выше результатам.

Заключение

Быстрая термическая обработка подзатворного диэлектрика, полученного путем пирогенного окисления кремния, приводит к уменьшению величины поверхностного сопротивления ранее сформированных ионно-легированных слоев на 1–2 % за счет электрической доактивации введенной примеси. При этом имеет место увеличение глубины ее залегания на 0,05 мкм для фосфора и 0,02 мкм для бора за счет удвоения коэффициента их диффузии, обусловленного электрическим полем, возникающим под воздействием фотонного потока.

Библиографические ссылки

1. Мазель ЕЗ, Пресс ФП. *Планарная технология кремниевых приборов*. Москва: Энергия; 1974.
2. *Технология СБИС. Книга 1*, 2. Зи СМ, редактор. Москва: Мир; 1986.
3. Зи СМ. *Физика полупроводниковых приборов. Том 1*. Сурис РА, редактор. Москва: Мир; 1984. 456 с.
4. Достанко АП. *Технология интегральных схем*. Минск: Вышэйшая школа; 1982.
5. Красников ГЯ. *Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП-транзисторов*. Москва: Техносфера; 2002.
6. Двуреченский АВ, Качурин ГА, Нидаев ЕВ, Смирнов ЛС. *Импульсный отжиг полупроводниковых материалов*. Москва: Наука; 1982.
7. Пилипенко ВА. *Быстрые термообработки в технологии СБИС*. Минск: Издательский центр БГУ; 2004.
8. Солодуха ВА, Пилипенко ВА, Горушко ВА. Влияние быстрой термической обработки подзатворного диэлектрика на параметры мощных полевых MOSFET транзисторов. *Доклады БГУИР*. 2018;5(115):99–103.
9. Емельянов ВА, Баранов ВВ, Буйко ЛД, Петлицкая ТВ. *Методы контроля параметров твердотельных структур СБИС*. Минск: Бестпринт; 1998.
10. Буйко ЛД, Гойденко ПП, Пилипенко ВА, Ухов ВА. Измерение угла косоугольного шлифа с помощью интерференционного микроскопа МИИ-4. *Электронная техника. Серия 8*. 1974;6:83–85.

References

1. Mazel EZ, Press FP. *Planarnaya tekhnologiya kremnievykh priborov* [Planar technology of silicon devices]. Moscow: Energiya; 1974. Russian.
2. *VLSI technology*. Sze SM, editor. New York: McGraw-Hill; 1983. 654 p.
Russian edition: *Tekhnologiya SBIS. Kniga 1, 2*. Zi SM, editor. Moscow: Mir, 1986.
3. Sze SM. *Physics of semiconductor devices. Volume 1*. New York: John Wiley and Sons; 1981. 878 p.
Russian edition: Zi SM. *Fizika poluprovodnikovyykh priborov. Kniga 1*. Suris RA, editor. Moscow: Mir, 1984. 456 p.
4. Dostanko AP. *Tekhnologiya integral'nykh skhem* [Technology of integrated circuits]. Minsk: Vysheishaya shkola; 1982. Russian.
5. Krasnikov GYa. *Konstruktivno-tekhnologicheskie osobennosti submikronnykh MOP-tranzistorov* [Design and technological characteristics of submicron MOS transistors]. Moscow: Tekhnosfera; 2002. Russian.
6. Dvurechensky AV, Kachurin GA, Nidaev EV, Smirnov LS. *Impul'snyi otzhig poluprovodnikovyykh materialov* [Pulsed annealing of semiconductor materials]. Moscow: Nauka; 1982. Russian.
7. Pilipenko VA. *Bystrye termoobrabotki v tekhnologii SBIS* [Fast heat treatments in VLSI technology]. Minsk: Publishing Center of Belarusian State University; 2004. Russian.
8. Solodukha VA, Pilipenko VA, Gorushko VA. Influence of rapid thermal treatment of the gate dielectric on the parameters of power field MOSFET transistors. *Doklady BGUIR*. 2018;5(115):99–103. Russian.
9. Emelyanov VA, Baranov VV, Buiko LD, Petlitskaya TV. *Metody kontrolya parametrov tverdotel'nykh struktur SBIS* [Methods for monitoring the parameters of solid-state VLSI structures]. Minsk: Bestprint; 1998. Russian.
10. Buiko LD, Goydenko PP, Pilipenko VA, Ukhov VA. [Angle lap measurement using an MII-4 interference microscope]. *Elektronnaya tekhnika. Seriya 8*. 1974;6:83–85. Russian.

Статья поступила в редколлегию 14.01.2019.
Received by editorial board 14.01.2019.

СТРУКТУРА ТРОЙНОГО СПЛАВА СИСТЕМЫ ВИСМУТ – ИНДИЙ – ОЛОВО

В. Г. ШЕПЕЛЕВИЧ¹⁾, Е. Л. КУХАРЕНКО²⁾

¹⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

²⁾Саутгемптонский университет, ул. Университетская, Саутгемптон SO17 1BJ, Великобритания

Экспериментально рентгеноструктурным анализом установлено, что сплав $\text{Bi}_{26}\text{In}_{39}\text{Sn}_{35}$, полученный при скорости охлаждения порядка 10^2 К/с, состоит из трех фаз: ϵ -фазы BiIn , Bi_3In_5 и γ -фазы Sn_4In . Фазы образуют три структуры, объемные доли которых, определенные методом случайных секущих, равны 0,54; 0,41 и 0,05. В сплаве структуры распределены однородно. Рентгеноспектральным микроанализом найдены концентрации компонентов в различных областях сплава и установлено, что в светлых областях находится ϵ -фаза BiIn , серые области состоят из фаз BiIn и Bi_3In_5 . Распределение максимальных хорд l_{\max} сечений светлых выделений по размерным группам характеризуется двумя максимумами. Средние длины хорд случайных секущих на сечениях выделений структур не превышают 15 мкм. На заключительном этапе кристаллизации происходит эвтектическое превращение, при котором образуется эвтектическая смесь трех фаз (ϵ -фазы BiIn , Bi_3In_5 и γ -фазы Sn_4In).

Ключевые слова: висмут; индий; олово; припой; микроструктура; фаза; эвтектическое превращение.

THE TERNAY ALLOY STRUCTURE OF THE BISMUTH – INDIUM – TIN SYSTEM

V. G. SHEPELEVICH^a, E. L. KOUKHARENKO^b

^aBelarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus

^bUniversity of Southampton, University Road, Southampton SO17 1BJ, United Kingdom

Corresponding author: V. G. Shepelevich (shepelevich@bsu.by)

By means of X-ray structural analysis, it was established experimentally that the $\text{Bi}_{26}\text{In}_{39}\text{Sn}_{35}$ alloy obtained at the cooling rate $\approx 10^2$ K/s, includes three phase: ϵ -phase BiIn , Bi_3In_5 , and γ -phase Sn_4In . The phases form three structures with the volume parts determined by the random secant method as 0.54; 0.41, and 0.05, respectively. The structures are homogeneously distributed within the alloy volume. Using X-ray spectroscopic microanalysis, the authors determined concentrations of the components in different regions of the alloy and demonstrated that light regions are associated with ϵ -phase BiIn ; grey regions represent BiIn and Bi_3In_5 phases. Distribution of the maximal bisecants l_{\max} in size groups for light regions has two maxima. The average bisecant lengths of random secants for the structures are no greater than 15 μm . Eutectic transformation at the final stage of crystallization is associated with the formation of the eutectic compound comprising the three phases (ϵ -phase BiIn , Bi_3In_5 and γ -phase Sn_4In).

Keywords: bismuth; indium; tin; solder; microstructure; phase; eutectic transformation.

Образец цитирования:

Шепелевич ВГ, Кухаренко ЕЛ. Структура тройного сплава системы висмут – индий – олово. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2019;2:54–57.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-54-57>

For citation:

Shepelevich VG, Koukharenko EL. The ternay alloy structure of the bismuth – indium – tin system. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2019;2:54–57. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-54-57>

Авторы:

Василий Григорьевич Шепелевич – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры физики твердого тела физического факультета.

Елена Леонидовна Кухаренко – приглашенный старший научный сотрудник.

Authors:

Vasili G. Shepelevich, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of solid-state physics, faculty of physics.

shepelevich@bsu.by

Elena L. Koukharenko, visiting senior researcher.
ak@ecs.soton.ac.uk

Введение

В последние два десятилетия активно разрабатываются легкоплавкие припои, не содержащие компоненты, опасные для здоровья человека и окружающей среды (свинец, ртуть и др.), а также обладающие более высокими технологическими параметрами [1; 2]. Припои на основе системы Bi – Sn – In являются перспективными материалами для различных отраслей промышленности (электроники, электротехники, машиностроения и др.). В работах [3; 4] проведено исследование микроструктуры и фазового состава сплавов тройной системы Bi – Sn – In, полученных при малых и средних скоростях охлаждения, не превышающих 10^2 K/c. При изучении микроструктуры эвтектического сплава [3] после направленного затвердевания при очень медленной скорости роста (0,74–55,0 мм/сут) установлено, что он состоит из двух грубых структур: BiIn – Sn₄In и Bi – Sn₄In.

Цель настоящего исследования – определение параметров микроструктуры тройного сплава Bi₂₆In₃₉Sn₃₅ (атомные проценты), состав которого незначительно отличается от эвтектики и полученного при скоростях охлаждения $\approx 10^2$ K/c, что представляет научный интерес и имеет прикладное значение.

Материалы и методы

Сплав Bi₂₆In₃₉Sn₃₅, изготовленный сплавлением компонентов в кварцевой ампуле, заливался в графитовую изложницу. Длина полученного стержня составляла 70 мм, площадь квадратного поперечного сечения – 25 мм². Средняя скорость охлаждения при таких условиях, как показал расчет [5], достигает $2 \cdot 10^2$ K/c. Микроструктура сплава исследована с помощью растрового электронного микроскопа LEO 2455 VP, дополнительно оснащенного приставкой для проведения рентгеноспектрального микроанализа. Фазовый состав определен рентгеноструктурным анализом. Параметры микроструктуры определены методом случайных секущих [6].

Результаты и их обсуждение

Дифракционные линии исследуемого сплава представлены на рис. 1. Наблюдаются дифракционные отражения фаз: BiIn (110, 101, 200, 002, 102, 211, 112 и др.), Bi₃In₅ (211, 202, 220, 213, 310, 006 и др.) и Sn₄In (0001, 10 $\bar{1}$ 0, 11 $\bar{2}$ 0, 0002, 11 $\bar{2}$ 1 и др.). Дифракционные отражения висмута, индия и олова не наблюдались.

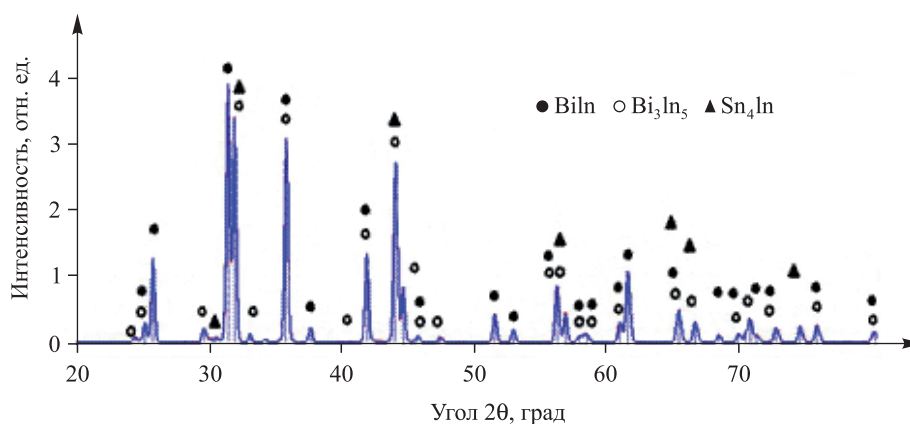


Рис. 1. Дифрактограмма сплава Bi₂₆In₃₉Sn₃₅

Fig. 1. X-ray diffraction pattern of Bi₂₆In₃₉Sn₃₅ alloy

На рис. 2, а, представлено полученное с помощью растрового микроскопа изображение микроструктуры сплава Bi₂₆In₃₉Sn₃₅, имеющей кружевоподобный вид. Дендритная структура не обнаружена. Наблюдаются светлые, серые и темные области, что свидетельствует о различных концентрациях компонентов и фазах в них. При больших увеличениях (5–10 тыс.) выявлены светлые выделения в серой области (рис. 2, б) и светлые и серые выделения в темных областях. Методом случайных секущих определены объемные доли светлых, серых и темных участков – 0,54; 0,05 и 0,41 соответственно. Значения средних хорд, находящихся на сечениях разных структур, не превышают 15 мкм.

Распределение максимальных хорд l_{\max} сечений светлых выделений по размерным группам представлено на рис. 3. Наблюдаются два максимума в распределении. Дисперсные выделения, средний размер хорд которых составляет 2,6 мкм, окружены темной структурой. Более крупные светлые выделения, средний размер хорд которых равен 18 мкм, контактируют с серыми и темными структурами.

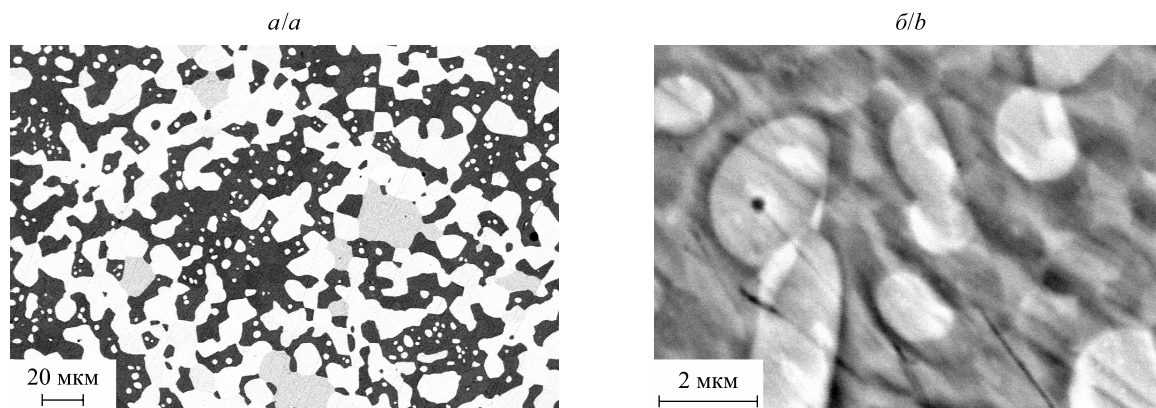


Рис. 2. Микроструктура образца сплава $\text{Bi}_{26}\text{In}_{39}\text{Sn}_{35}$ при различных увеличениях (а, б)
 Fig. 2. Images of the $\text{Bi}_{26}\text{In}_{39}\text{Sn}_{35}$ alloy microstructure at different magnifications (a, b)

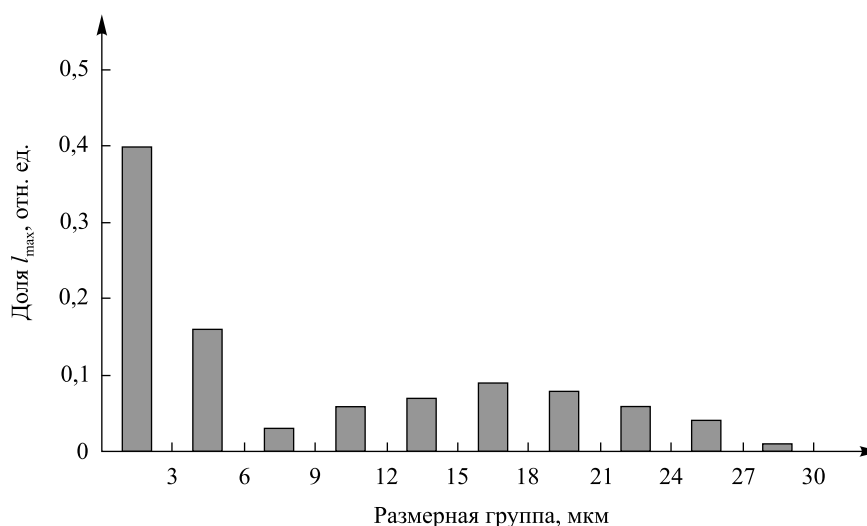


Рис. 3. Распределение максимальных хорд сечений светлых выделений $\text{Bi}_{26}\text{In}_{39}\text{Sn}_{35}$
 Fig. 3. Distributin of the maximal bisecants of $\text{Bi}_{26}\text{In}_{39}\text{Sn}_{35}$ for light regions

Средние значения концентраций компонентов в различных областях сплава представлены в таблице.

**Концентрация компонентов
 в различных областях сплава $\text{Bi}_{26}\text{In}_{39}\text{Sn}_{35}$, ат. %
 Concentrations of the components
 in difference regions of $\text{Bi}_{26}\text{In}_{39}\text{Sn}_{35}$ alloy, at. %**

Области	Компонент		
	Bi	Sn	In
Светлые	48	4	48
Серые	37	7	56
Темные	9	60	31

В светлых областях отношение атомных концентраций висмута и индия равно единице, а концентрация олова низкая, поэтому данная область соответствует фазе BiIn . Выделения BiIn распределены однородно в объеме и имеют преимущественно выпуклые границы. Это указывает на то, что данная фаза кристаллизуется первой. В серых участках отношение концентраций индия и висмута находится в пределах от 1,2 до 1,6, а концентрация олова составляет несколько процентов. Можно предположить, что серые области состоят из смеси двух фаз: Bi_3In_5 и BiIn . Дисперсные выделения фазы BiIn в серых участках наблюдаются при больших увеличениях (см. рис. 2, б). В темных областях, имеющих преимущественно вогнутые границы и содержащих дисперсные более светлые выделения, образуется смесь фаз Sn_4In , BiIn и Bi_3In_5 . В темных областях концентрация висмута менее 10 %, а отношение концентраций олова и индия достигает 2. Фаза Sn_4In относится к фазам с переменным составом и имеет простую

гексагональную кристаллическую решетку [7], в которой при комнатной температуре растворяется висмут [8] до 4 %. Остальной висмут может образовывать с индием фазы BiIn и Bi_3In_5 .

Формирование наблюдаемой микроструктуры объясняется тем, что при охлаждении расплава со скоростью порядка 10^2 К/с из-за переохлаждения в жидкой фазе появляются области, в которых состав близок к составу промежуточных фаз [9], что способствует образованию центров кристаллизации фазы BiIn в этих местах в первую очередь. Выделение фазы BiIn сопровождается выделением теплоты, что уменьшает переохлаждение жидкости. Затем из жидкости образуется смесь BiIn и Bi_3In_5 (серая область), на заключительном этапе кристаллизации происходит образование выделений трех фаз: BiIn , Sn_4In и Bi_3In_5 , имеющих вогнутые границы с ранее образовавшимися выделениями фаз. Случайный характер образования центров кристаллизации фазы BiIn в объеме расплава способствует формированию микроструктуры с однородным распределением выделений и отсутствием дендритных образований, что имеет важное практическое значение при изготовлении припоев и элементов электронных устройств, используемых в противопожарной технике [10].

Заключение

Сплав $\text{Bi}_{26}\text{In}_{39}\text{Sn}_{35}$, изготовленный при скорости охлаждения около 10^2 К/с, состоит из трех фаз: BiIn , Bi_3In_5 и Sn_4In , образующих кружевоподобные светлые области, а также серые и темные области. Светлые области состоят из фазы BiIn , серые – из смеси фаз BiIn и Bi_3In_5 , темные – из смеси фаз Sn_4In , BiIn и Bi_3In_5 . Средняя длина хорд случайных секущих, расположенных на сечениях областей, не превышает 15 мкм. Формирование дисперсной и бездендритной структуры способствует повышению качества легкоплавких припоев сплава $\text{Bi}_{26}\text{In}_{39}\text{Sn}_{35}$.

Библиографические ссылки

1. Kamal V, Goudo ES. Effect of rapid solidification on structure and properties of some lead-free solder alloy. *Materials and Manufacturing Process*. 2006;21:736–740. DOI: 10.1080/10426910600727890.
2. Yoon SW, Pho B-S, Lee NM, Kim C-U, Lee B-J. Investigation of the phase equilibria in the Sn – Bi – In alloys system. *Metallurgical and Materials Transactions*. 1999;30(6):1503–1515. DOI: 10.1007/s11661-999-0087-8.
3. Ruggiero MA, Rutter JW. Origin of microstructure in 310 K eutectic of Bi – In – Sn ternary system. *Materials Science and Technology*. 1995;11(2):136–142. DOI: 10.1179/mst.1995.11.2.136.
4. Sengupta S, Sodo H, Mclean A. Evolution of microstructure in bismuth – indium – tin eutectic alloy. *Journal of Materials Science*. 2005;40:2607–2610. DOI: 10.1007/s10853-005-2086-5.
5. Прижибыл Й. *Теория литейных процессов. Основные вопросы теории и примеры приложений*. Поляков ЯГ, переводчик; Головин СЯ, редактор. Москва: Мир; 1967. 328 с.
6. Салтыков СА. *Стереометрическая металлография*. Москва: Металлургия; 1976. 273 с.
7. Смитлз КДж. *Металлы*. Москва: Металлургия; 1980. 447 с.
8. Шепелевич ВГ, Гусакова СВ, Гусакова ОВ. Структура и микротвердость сплавов $(\text{SnIn})_{100-x}\text{Bi}_x$. В: *Приборостроение-2017. Материалы X Международной научно-технической конференции; 1–3 ноября 2017 г.; Минск, Беларусь*. Минск: БНТУ; 2017. с. 240–242.
9. Баум БА. *Металлические жидкости*. Москва: Наука; 1979. 120 с.
10. Пашков ИН, Пикунов МВ, Таволжанский СА, Пашков АИ. Разработка процессов получения и применения сплавов припоев в дисперсионном состоянии с микрокристаллической или аморфной структурой. *Металлург*. 2010;6:43–45.

References

1. Kamal V, Goudo ES. Effect of rapid solidification on structure and properties of some lead-free solder alloy. *Materials and Manufacturing Process*. 2006;21:736–740. DOI: 10.1080/10426910600727890.
2. Yoon SW, Pho B-S, Lee NM, Kim C-U, Lee B-J. Investigation of the phase equilibria in the Sn – Bi – In alloys system. *Metallurgical and Materials Transactions*. 1999;30(6):1503–1515. DOI: 10.1007/s11661-999-0087-8.
3. Ruggiero MA, Rutter JW. Origin of microstructure in 310 K eutectic of Bi – In – Sn ternary system. *Materials Science and Technology*. 1995;11(2):136–142. DOI: 10.1179/mst.1995.11.2.136.
4. Sengupta S, Sodo H, Mclean A. Evolution of microstructure in bismuth – indium – tin eutectic alloy. *Journal of Materials Science*. 2005;40:2607–2610. DOI: 10.1007/s10853-005-2086-5.
5. Przhbl I. *Teoriya liteinykh protsessov. Osnovnye voprosy teorii i primery prilozhenii* [Theory of casting processes. The main questions of the theory and examples of applications]. Polyakov YaG, translator; Golovin SYa, editor. Moscow: Mir; 1967. 328 p. Russian.
6. Saltykov SA. *Stereometricheskaya metallografiya*. Moscow: Metallurgiya; 1976. 273 p. Russian.
7. Smitls KD. *Metally*. Moscow: Metallurgiya; 1980. 447 p. Russian.
8. Shepelevich VG, Gusakova SV, Gusakova OV. Structure i microtverdest splayov $(\text{SnIn})_{100-x}\text{Bi}_x$. In: *Priborostroenie-2017. Materialy X Mezhdunarodnoi nauchno-tekhnicheskoi konferentsii; 1–3 noyabrya 2017 g.; Minsk, Belarus* [Instrumentation engineering – 2017. 10th International Scientific Conference; 2017 November 1–3; Minsk, Belarus]. Minsk: Belorusskii natsional'nyi tekhnicheskii universitet; 2017. p. 240–242. Russian.
9. Baum BA. *Metallicheskie zhidkosti*. Moscow: Nauka; 1979. 120 p. Russian.
10. Pashkov IN, Picunov MV, Tavolzhansy SA, Pashkov AI. Development of production and use of solder alloys with microcrystallinity or amorphous structure. *Metallurg*. 2010;6:43–45. Russian.

УДК 538.911,543.424.2,620.186

СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА НА МЕДНЫХ ПОДЛОЖКАХ

Е. А. КОЛЕСОВ¹⁾, А. Д. ПАШИНСКИЙ¹⁾, М. С. ТИВАНОВ¹⁾,
О. В. КОРОЛИК¹⁾, О. О. КАПИТАНОВА²⁾, Г. Н. ПАНИН^{3), 4)}

¹⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

²⁾Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,
ул. Ленинские горы, 1, строение 3, 119234, г. Москва, Россия

³⁾Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН,
ул. Институтская, 6, 142432, г. Черноголовка, Московская обл., Россия

⁴⁾Академия нанотехнологических технологий, Университет Донгук,
Пилдонг, Юнг-Гу, 3-26, 100-715, г. Сеул, Южная Корея

Введение. Актуальность изучения влияния подложки на свойства графена обусловлена высокой чувствительностью данного двумерного материала к самым малым воздействиям. При этом исследования, посвященные разделению влияний непосредственно подложки и последствий синтеза на свойства графена, на сегодняшний день описаны в литературных источниках недостаточно подробно.

Материалы и методы. В настоящей работе описаны изученные с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света и сканирующей зондовой микроскопии структурные свойства графена, выращенного методом химического осаждения из газовой фазы на медной подложке, а также графена, полученного аналогично и перенесенного после синтеза на другую медную подложку.

Образец цитирования:

Колесов ЕА, Пашинский АД, Тиванов МС, Королик ОВ, Капитанова ОО, Панин ГН. Структурные свойства графена на медных подложках. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2019;2:58–65.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-58-65>

For citation:

Kolesov EA, Pashinskiy AD, Tivanov MS, Korolik OV, Kapitanova OO, Panin GN. Structural properties of graphene on copper substrates. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2019;2:58–65. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-58-65>

Авторы:

Егор Александрович Колесов – аспирант кафедры энергофизики физического факультета. Научный руководитель – М. С. Тиванов.

Артем Дмитриевич Пашинский – магистрант кафедры философии и методологии науки факультета философии и социальных наук. Научный руководитель – кандидат философских наук, доцент А. И. Екадумов.

Михаил Сергеевич Тиванов – кандидат физико-математических наук, доцент; заведующий кафедрой энергофизики физического факультета.

Ольга Васильевна Королик – кандидат физико-математических наук; заведующий научно-исследовательской лабораторией энергоэффективных материалов и технологий кафедры энергофизики физического факультета.

Олеся Олеговна Капитанова – кандидат химических наук; младший научный сотрудник кафедры неорганической химии химического факультета.

Геннадий Николаевич Панин – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник лаборатории локальной диагностики полупроводниковых материалов³⁾, профессор физического факультета⁴⁾.

Authors:

Egor A. Kolesov, postgraduate student at the department of energy physics, faculty of physics.
cryptic.still@gmail.com

<http://orcid.org/0000-0001-8917-8937>

Artem D. Pashinskiy, master's degree student at the department of philosophy and methodology of science, faculty of philosophy and social science.

clusly@gmail.com

<http://orcid.org/0000-0003-4457-5183>

Mikhail S. Tivanov, PhD (physics and mathematics), docent; head of the department of energy physics, faculty of physics.

tivanov@bsu.by

<http://orcid.org/0000-0002-4243-0813>

Olga V. Korolik, PhD (physics and mathematics); head of the research laboratory of energy efficient materials and technologies, department of energy physics, faculty of physics.

olga_zinchuk@tut.by

<http://orcid.org/0000-0001-9430-4010>

Olesya O. Kapitanova, PhD (chemistry); junior researcher at the department of inorganic chemistry, faculty of chemistry.

olesya.kapitanova@gmail.com

<http://orcid.org/0000-0002-7384-3426>

Gennady N. Panin, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the laboratory of local diagnosis for semiconductor materials^c, professor at the faculty of physics^d.

panin@iptm.ru

<http://orcid.org/0000-0003-3658-6958>

Результаты и их обсуждение. С помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света обнаружено, что механические напряжения для выращенного графена повышены, в то время как в перенесенном графене они пренебрежимо малы, при этом коэффициенты механического напряжения составили 0,22–0,33 и ~0 % соответственно. Методом сканирующей зондовой микроскопии показано, что данный эффект не связан с неровностями на поверхности меди: средняя шероховатость подложки, на которой графен был выращен, составляет 20,4 нм, для подложки перенесенного графена – 62,0 нм; при этом перепады высот во втором случае почти на порядок больше. Данное противоречие нами связывается с наличием остаточных эффектов синтеза в случае выращенного графена.

Заключение. Результаты настоящей работы важны как для уточнения методов первичной характеристики графена после синтеза, так и для практических приложений, требующих нанесения графена на рифленые и перфорированные подложки, мембраны и объекты сложной формы.

Ключевые слова: графен; механические напряжения; спектроскопия комбинационного рассеяния света; сканирующая зондовая микроскопия; СЗМ; подложка.

Благодарность. Работа была выполнена при финансовой поддержке государственной программы научных исследований «Фотоника, опто- и микроэлектроника» и гранта Российского фонда фундаментальных исследований № 16-33-60229.

STRUCTURAL PROPERTIES OF GRAPHENE ON COPPER SUBSTRATES

*E. A. KOLESOV^a, A. D. PASHINSKIY^a, M. S. TIVANOV^a,
O. V. KOROLIK^a, O. O. KAPITANOVA^b, G. N. PANIN^{c,d}*

^aBelarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus

^bLomonosov Moscow State University, 1 Leninskie Gory Street, building 3, Moscow 119234, Russia

^cInstitute for Microelectronics Technology and High Purity Materials,

Russian Academy of Sciences, 6 Institutskaya Street, Chernogolovka 142432, Moscow region, Russia

^dNano-Information Technology Academy, Dongguk University, 3-26 Pildong, Junggu, Seoul 100-715, South Korea

Corresponding author: E. A. Kolesov (cryptic.still@gmail.com)

Introduction. Studies of the substrate influence on graphene properties are relevant due to the high sensitivity of this two-dimensional material to the smallest effects. At the same time, studies dedicated to the separation of direct substrate influence and residual synthesis effects on graphene properties are not described in the literature in sufficient detail.

Materials and methods. This paper presents the results of a study of the structural properties of as-grown and transferred graphene on copper substrates by Raman spectroscopy and atomic force microscopy.

Results and discussion. Using Raman spectroscopy, we found that the mechanical strain in the as-grown graphene is increased, while negligibly small in transferred graphene, the strain coefficients being of 0.22–0.33 and ~0 %, respectively. Using atomic force microscopy, we showed that this effect does not relate to the copper surface irregularities: the average roughness of the substrate surface for as-grown graphene was of 20.4 nm, while for the transferred graphene it was of 62.0 nm, the height difference being of almost an order of magnitude greater for the latter. This contradiction was explained in terms of residual synthesis effects present in case of as-grown graphene.

Conclusion. Taking into account the analyzed substrate effects is important both for the refinement of methods for the initial characterization of as-grown graphene, and for practical applications requiring graphene transfer to corrugated and perforated substrates, membranes and objects of complex shape.

Keywords: graphene; mechanical strain; Raman spectroscopy; AFM; substrate.

Acknowledgements. This work was supported by Belarusian State Program for Research «Photonics, opto- and microelectronics» and Russian Foundation of Basic Researches grant No. 16-33-60229.

Введение

Графен – двумерный углеродный кристалл с гексагональной решеткой толщиной в один атомарный слой графита. Благодаря своим уникальным свойствам он привлекает к себе огромное внимание как материал, эффективный для целого ряда различных приложений. Высокие значения теплопроводности (~ $5 \cdot 10^3$ Вт · м⁻¹ К⁻¹ [1]), механической жесткости (~1 ТПа [2]), а также подвижности носителей заряда (до $2 \cdot 10^5$ см² · В⁻¹ · с⁻¹ [3]) делают графен одним из самых перспективных объектов исследования среди наноматериалов.

В то же время, как следует из литературных источников, свойства графена в значительной мере могут зависеть от подложки; при этом металлические подложки (Ni, Cu) влияют наиболее выражено в связи с сильным взаимодействием графен – металл [4]. В частности, воздействие подложки может проявляться в возникновении механических напряжений в графеновой решетке [5; 6]. В связи с тем что наиболее часто в экспериментальных работах встречается синтез графена химическим осаждением из газовой фазы (CVD) на медных подложках, разделение влияния последствий синтеза и непосредственного воздействия подложки на свойства графенового слоя представляется актуальной задачей как для уточнения методов первичной характеристики графена после синтеза, так и для практических приложений, налагающих жесткие требования на свойства монослоя. В частности, для некоторых применений необходимы образцы графена не только на гладких и сплошных подложках (SiO_2/Si , кварц, SiC и др.), но и на шероховатых, таких как рифленые кварцевые подложки [7], перфорированные подложки (металлические сетки для просвечивающей электронной микроскопии [8]), подложки-мембраны для измерений рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и сканирующей электронной микроскопии при изучении интерфейсов твердое тело/жидкость, жидкость/газ в условиях вакуума [9]), а также объекты сложной формы, например кантилеверы для сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ) [10; 11].

Вследствие универсальности и чувствительности к целому ряду свойств материала спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) является популярным неразрушающим методом характеристики углеродных наноматериалов [12]. СЗМ – классический метод получения данных о топографии поверхности исследуемых материалов.

Цель работы – установление структурных свойств графена, выращенного на медных подложках или перенесенного на них, методами спектроскопии КРС и СЗМ.

Материалы и методы

Перед синтезом графена медная фольга (99,999 %, 10×30 см, толщина 25 мкм) предварительно отжигалась при 1060°C с расходом водорода 300 см^3 и аргона 2000 см^3 при давлении ниже 10^{-4} мм рт. ст. в течение 1–2 ч. Для минимизации окисления подложки до роста графена синтез последнего производился непосредственно после отжига (образец оставался в камере) при температуре 1020°C методом CVD с использованием смеси CH_4 (40 см^3) и H_2 (10 см^3). После окончания процесса роста графена образец охлаждался до комнатной температуры.

Один из полученных образцов графена оставлен на медной фольге, на которой был выращен (*as-grown* – в первоначальном виде после синтеза). Второй перенесен на другую медную подложку с использованием ПММА [13]. Последний (молекулярная масса 996 000) был растворен в анизоле и нанесен на графен при помощи спин-коутинга (3000 об/мин, 1 мин). Для травления меди использован 0,1 моль/л водный раствор $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$, в то время как промывка графена от продуктов травления производилась при помощи смеси воды и изопропилового спирта [14]. Затем ПММА удалялся путем погружения образца в особо чистую ледяную уксусную кислоту на 4 ч [15].

Спектры КРС регистрировали с использованием конфокального спектрометра Nanofinder HE (*LOTIS III*, Беларусь – Япония) со спектральным разрешением не хуже 3 см^{-1} ($1,0\text{ см}^{-1}$ для линии 2D и $2,3\text{ см}^{-1}$ для линии G). Применялся непрерывный твердотельный лазер (длина волны 473 нм, мощность излучения 2400 мкВт), диаметр лазерного пятна составлял 0,6 мкм.

Изображения СЗМ получали с помощью микроскопа SolverNano в полуконтактном режиме, диаметр закругления зонда составлял 10 нм, резонансная частота колебаний 229 кГц.

Результаты и их обсуждение

На рис. 1 приведены экспериментальные спектры КРС для графена, выращенного на медной подложке, и графена, перенесенного на таковую. В данных спектрах в интервале $1000\text{--}3000\text{ см}^{-1}$ присутствуют характерные для графена линии G ($\sim 1580\text{ см}^{-1}$, процесс КРС в центре зоны Бриллюэна в углеродных sp^2 - и sp^3 -решетках), 2D ($\sim 2700\text{ см}^{-1}$, процесс КРС на краю зоны Бриллюэна в графитоподобных материалах), D ($\sim 1350\text{ см}^{-1}$, процесс КРС на краю зоны Бриллюэна, происходящий с участием дефекта, вследствие чего интенсивность данной линии чувствительна к концентрации всех КРС-активных дефектов в области лазерного пятна, таких как вакансии, границы зерен, sp^3 -кластеры и др.) [12]. Для выращенного графена соотношение интенсивностей линий 2D и G составляет ~ 1 – это первичный фактор наличия монослоя [16]. В случае перенесенного графена указанное соотношение превышает 1, что также соответствует однослойному графену. На вкладки рис. 1 приведены аппроксимации линии 2D одиночной функцией Лоренца. Из рисунка видно, что функция достаточно хорошо соответствует экспериментальному спектру; данный факт подтверждает наличие монослоя графена [16]. Кроме того, значения полной ширины на полувысоте FWHM(2D) для данных образцов составляют $\sim 30\text{ см}^{-1}$, что также характерно для монослоя [17].

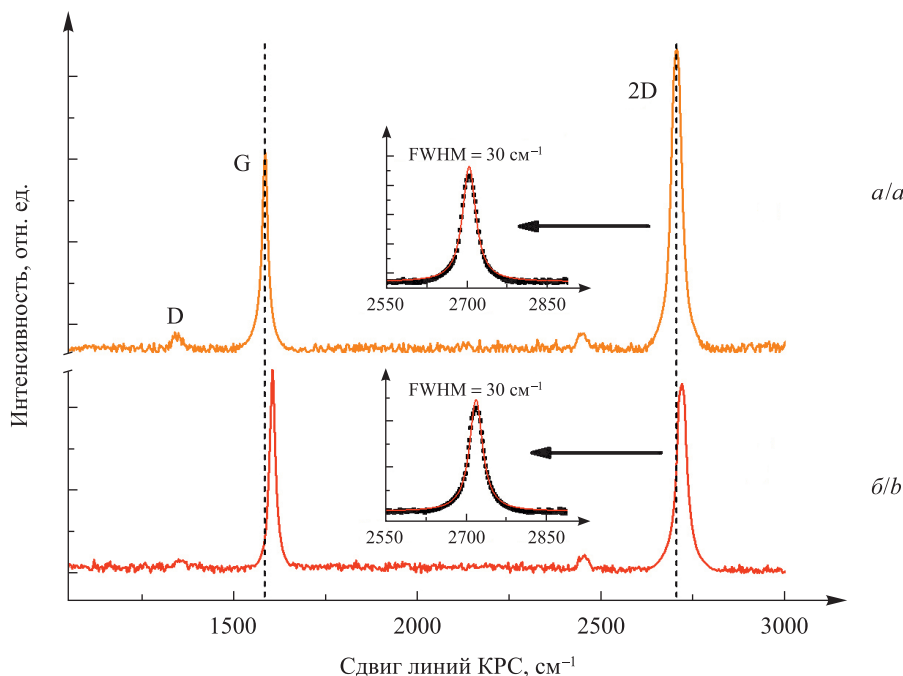


Рис. 1. Характерные спектры КРС экспериментальных образцов графена, выращенного на медной подложке (*б*) и перенесенного на медную подложку (*а*).
На вкладках: аппроксимации линии 2D одиночной функцией Лоренца

Fig. 1. Typical Raman spectra of as-grown (*b*) and transferred graphene (*a*) on copper substrates.
Insets: 2D peak single Lorentz approximation

Малая относительная интенсивность линии D на рис. 1 свидетельствует о низкой дефектности графена в образцах [12]. Увеличение относительной интенсивности данной линии после переноса связано с внедрением дефектов в структуру материала при травлении меди и в процессе переноса [18]. Кроме того, из рисунка видно, что после переноса графена происходит смещение линий G и 2D в область меньших значений положения. Это может быть связано с высвобождением механических напряжений [5; 6].

Изображения экспериментальных образцов графена, полученные с помощью оптической микроскопии, представлены на рис. 2, из которого видно, что поверхность выращенного образца равномерна и однородна, при этом на ней присутствуют отдельные черные точки, которые можно связать с дефектными областями, а также слабо выраженные складки. Их образование, согласно известным литературным данным [17; 19], свидетельствует о локальном высвобождении присутствовавших в графене встроенных механических напряжений.

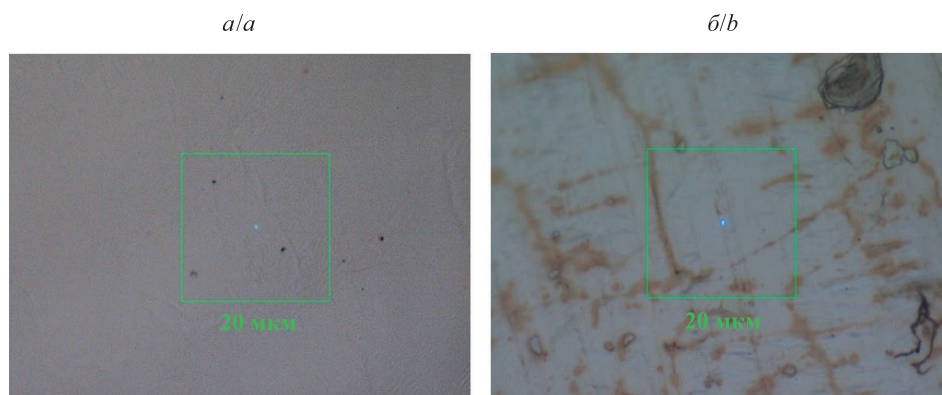


Рис. 2. Изображение образцов графена, выращенного на медной подложке (*а*) и перенесенного на медную подложку (*б*), полученное с помощью оптической микроскопии (увеличение $\times 100$). Зеленый квадрат указывает размер области КРС-картирования (20×20 мкм)

Fig. 2. Optical microscopy images ($\times 100$) of as-grown (*a*) and transferred graphene (*b*) on copper substrates.
Green squares indicate Raman mapping areas of 20×20 μm

На изображении графена, перенесенного на медь, также наблюдаются черные точки; при этом оно отличается выраженными неоднородностями в виде темно-серых областей, бесцветных борозд, а также линий медного цвета. Происхождение таких особенностей может быть связано, во-первых, со следами шлифовки подложки, во-вторых, с образованием дефектов в процессе переноса пленки, в-третьих, с попаданием кислорода между пленкой графена и медью, что приводит к окислению последней.

Из представленных на рис. 3 карт видно, что положение G в случае с перенесенным графеном достаточно близко к литературным данным (1580 см^{-1}), в то время как для графена, выращенного на медной подложке, данная линия смещена в сторону больших значений положения (в среднем около 1600 см^{-1}) [17]. Аналогичный эффект наблюдается и для линии 2D: положение для перенесенного графена имеет значение, близкое к литературным данным (2688 см^{-1}), при этом значение положения для выращенного графена повышено (в среднем 2720 см^{-1}) [17]. Большие значения положений линий G и 2D для выращенного графена свидетельствуют об увеличенных локальных механических напряжениях [20], которые, в свою очередь, могут быть вызваны высокой шероховатостью поверхности подложки либо наличием остаточных эффектов синтеза [4].

Также на основании рис. 3 можно сделать вывод, что механические напряжения распределены по поверхности пленки относительно равномерно, за исключением отдельных областей. Данные области соответствуют складкам графена, наблюдаемым на изображении оптической микроскопии, что дополнительно подтверждает связь сдвига линий после переноса с высвобождением механических напряжений [4].

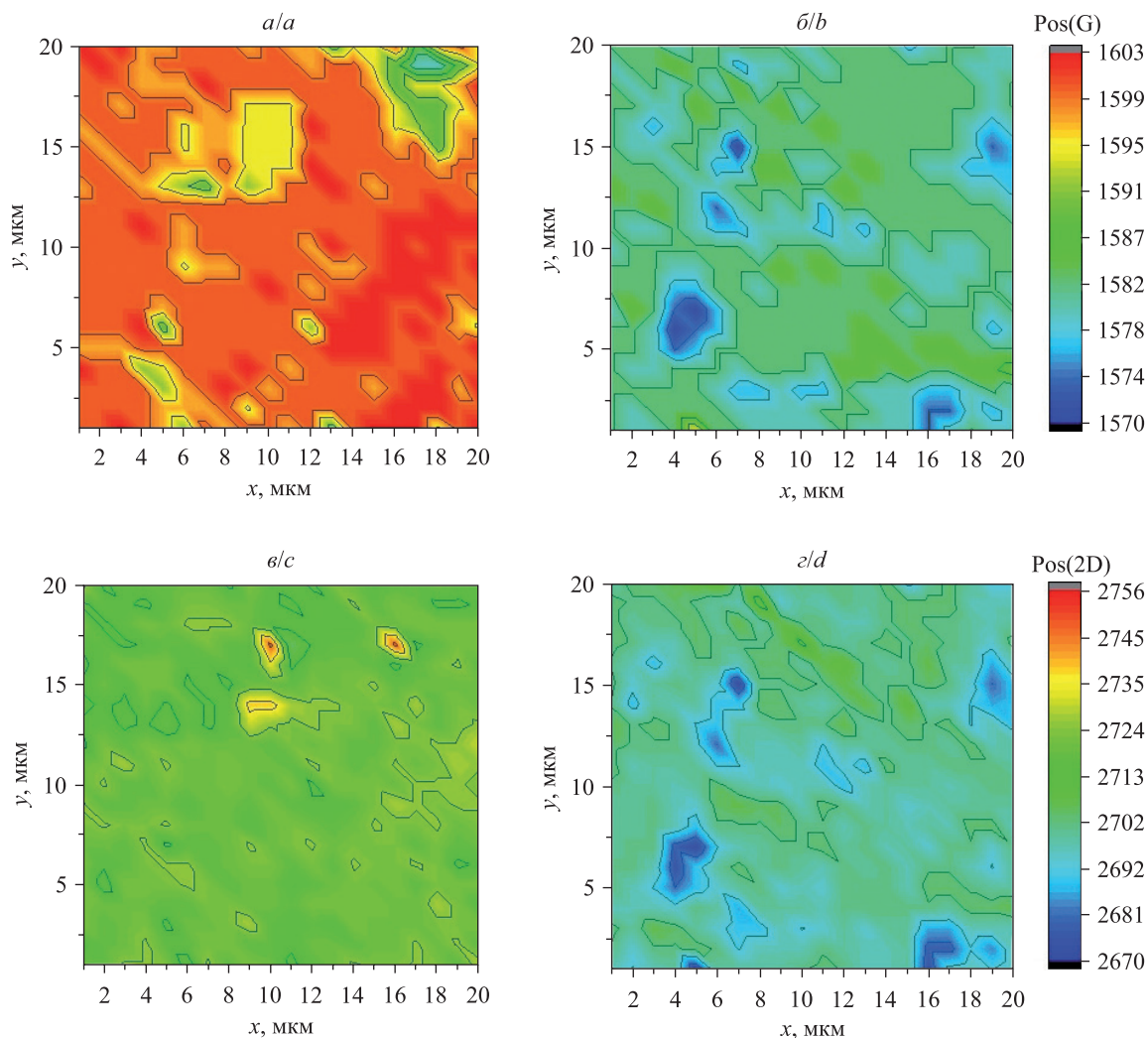


Рис. 3. Карты КРС ($20 \times 20\text{ мкм}$, шаг сканирования 1 мкм) положения линий G и 2D (Pos(G) и Pos(2D) соответственно) для образцов графена, выращенного на медной подложке (a, c) и перенесенного на медную подложку (b, d)

Fig. 3. Raman maps ($20 \times 20\text{ }\mu\text{m}$, scanning step of $1\text{ }\mu\text{m}$) of G and 2D peak positions for as-grown (a, c) and transferred graphene (b, d) on copper substrates

Механические напряжения, вносимые подложкой в графен, можно рассчитать по формуле [21]

$$\varepsilon = -\frac{\Delta\omega_{G,2D}}{2\omega_{G,2D}^0\gamma_{G,D}},$$

где ε – коэффициент механического напряжения; $\Delta\omega_{G,2D}$ – сдвиг линий КРС относительно нормального положения; $\omega_{G,2D}^0$ – нормальные положения линий КРС; $\gamma_{G,D}$ – параметр Грюнайзена для оптических фононов (использовались значения $\gamma_G = 1,8$ и $\gamma_D = 2,7$ для линий G и 2D соответственно [20]).

С помощью указанной формулы рассчитаны значения ε , усредненные по картам КРС (400 спектров на образец). Результаты расчета приведены в табл. 1, из которой видно, что после переноса образца на другую подложку в графене произошло высвобождение напряжений от 0,22–0,33 до ~ 0 %. Как уже отмечалось, данный результат может быть обусловлен различной шероховатостью поверхности подложек либо присутствием в случае выращенного графена остаточных эффектов синтеза – локальных химических связей между графеном и медью или механических напряжений, образованных в процессе охлаждения образца после синтеза и связанных с разными коэффициентами теплового расширения графена и меди [4; 22]. Данные эффекты удаляются при переносе и, соответственно, прекращают влиять на повышение механических напряжений.

Таблица 1

Рассчитанные из карт КРС по положению линий G и 2D
средние значения коэффициента механического
напряжения для образцов графена, %

Table 1

Average values of mechanical strain coefficient
calculated from Raman mapping data on G and 2D peak positions, %

Образец графена	ε (G)	ε (2D)
Выращенный на меди	0,33	0,22
Выращенный на меди и перенесенный на медь	0,03	0,07

В целях определения связи напряжений в графене с шероховатостью поверхности подложки производилось картирование СЗМ. На изображении СЗМ для образца графена, выращенного на меди (рис. 4), наблюдаются монотонные участки с малыми перепадами высоты, а также островки высотой более 200 нм. Последние можно связать со следами неравномерно вытравленной в ходе предварительного отжига меди или островками углерода, которые образовались во время синтеза вблизи дефектов подложки (эти дефекты могут становиться центрами зарождения таких островков; на них вместо графена,

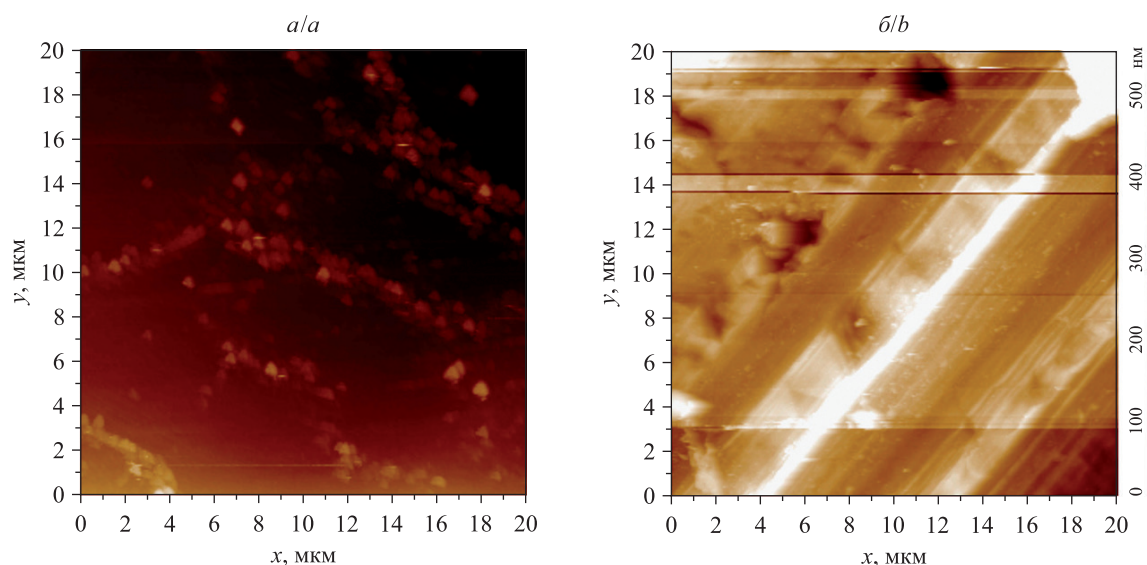


Рис. 4. Изображение СЗМ (20×20 мкм, 256×256 точек) для образцов графена, выращенного на медной подложке (а) и перенесенного на медную подложку (б)

Fig. 4. AFM images (20×20 μm , 256×256 points) for as-grown (a) and transferred grapheme (b) on copper substrates

как правило, образуется многослойный графитоподобный углерод [4]). Результаты спектроскопии КРС свидетельствуют о том, что в масштабах порядка 20×20 мкм наблюдаются отдельные островки многослойного графена (спектры в данных точках находятся на переходной стадии между графеном и графитом), подтверждая второе предположение.

На изображении СЗМ образца перенесенного графена присутствуют диагональные линии, соответствующие следам шлифовки подложки. Перепады высоты имеют масштабы более 1 мкм. В табл. 2 приведено сравнение рассчитанных из карт СЗМ параметров, описывающих шероховатость поверхности образцов. Из табл. 2 и рис. 4 следует, что поверхность подложки, на которую графен был перенесен, более шероховатая по сравнению с той, на которой он был выращен, при этом перепады высоты отличаются приблизительно на порядок. Данное наблюдение свидетельствует о том, что неровности поверхности подложки в рамках нашего эксперимента вносят малый вклад в образование механических напряжений в графене.

Таблица 2

Рассчитанные из карт СЗМ значения параметров шероховатости поверхности для образцов графена, выращенного на медной подложке и перенесенного на медную подложку

Table 2

Mean surface roughness and standard deviation of height, calculated from the AFM maps for as-grown and transferred graphene on copper substrates

Образец графена	Область сканирования, мкм	Средняя шероховатость поверхности, нм	Среднеквадратичное отклонение высоты, нм
Выращенный на меди	20×20	20,4	30,1
Выращенный на меди и перенесенный на медь	20×20	62,0	86,3
Выращенный на меди	2×2	1,7	2,1

В целях получения более подробной информации о параметрах поверхности подложки, на которой графен синтезирован, в областях малого контраста на рис. 4 производилось дополнительное СЗМ-картирование в масштабах 2×2 мкм, результаты которого представлены на рис. 5.

Малые перепады высоты (порядка 10 нм) (см. рис. 5), а также малые значения параметров шероховатости поверхности (см. табл. 2) в микрометровом масштабе подтверждают успешный отжиг поверхности меди при подготовке к росту графенового слоя, а также дополнительно свидетельствуют о том, что в случае графена, оставленного на первоначальной подложке, повышенные механические напряжения обусловлены не грубостью поверхности подложки, а остаточными эффектами синтеза.

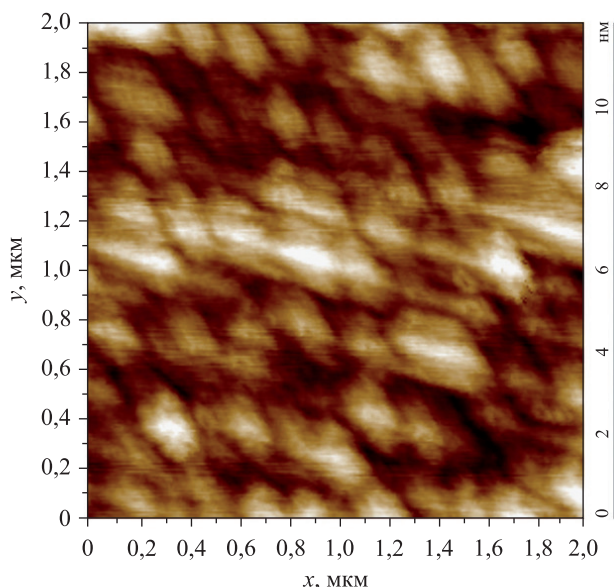


Рис. 5. Изображение СЗМ (2×2 мкм, 256×256 точек) гладкой области для образца графена, выращенного на медной подложке

Fig. 5. AFM image ($2 \times 2 \mu\text{m}$, 256×256 points) of a smooth area for as-grown graphene on copper

Заключение

В спектрах КРС образцов графена обнаружено, что положения линий G и 2D сдвинуты в сторону больших значений в выращенном графене на меди (1600 см^{-1} для линии G и 2720 см^{-1} для 2D), в то время как после его переноса на медную подложку линии принимают положения, соответствующие литературным данным (1580 и 2688 см^{-1} для линий G и 2D соответственно).

С использованием известного метода определения механических напряжений из положений линий G и 2D установлено, что коэффициент механического напряжения для образца с выращенным графеном имеет значения $0,22\text{--}0,33\%$, для перенесенного графена – около 0% . Путем измерений СЗМ показано, что данный эффект не связан с шероховатостью поверхности меди: перепады высот поверхности подложки с выращенным графеном на порядок меньше, поскольку использовался предварительный отжиг непосредственно перед синтезом, при этом ее средняя шероховатость приблизительно в 3 раза меньше. Полученный результат объясняется наличием остаточных эффектов синтеза для графена, выращенного на медной подложке.

Библиографические ссылки / References

- Balandin AA. Superior thermal conductivity of single-layer graphene. *Nano Letters*. 2008;8(3):902–907. DOI: 10.1021/nl0731872.
- Bunch S, van der Zande AM, Verbridge SS, Frank IW, Tanenbaum DM, Parpia JM, et al. Electromechanical resonators from graphene sheets. *Science*. 2007;315(5811):490–493. DOI: 10.1126/science.1136836.
- Bolotin KI, Sikes KJ, Jiang Z, Klima M, Fudenberg G, Hone J, et al. Ultrahigh electron mobility in suspended graphene. *Solid State Communications*. 2008;146(9–10):351–355. DOI: 10.1016/j.ssc.2008.02.024.
- Shin H, Yoon S-M, Choi WM, Park S, Lee D, Song IY, et al. Influence of Cu crystallographic orientation on electron transport in graphene. *Applied Physics Letters*. 2013;102:163102. DOI: 10.1063/1.4802719.
- Frank O, Vejpravova J, Holy V, Kavan L, Kalba M. Interaction between graphene and copper substrate: The role of lattice orientation. *Carbon*. 2014;68:440–451. DOI: 10.1016/j.carbon.2013.11.020.
- He R, Zhao L, Petrone N, Kim KS, Roth M, Hone J, et al. Large Physisorption Strain in Chemical Vapor Deposition of Graphene on Copper Substrates. *Nano Letters*. 2012;12(5):2408–2413. DOI: 10.1021/nl300397v.
- Guo L, Zhang Z, Sun H, Dai D, Cui J, Liad M, et al. Direct formation of wafer-scale single-layer graphene films on the rough surface substrate by PECVD. *Carbon*. 2018;129:456–461. DOI: 10.1016/j.carbon.2017.12.023.
- Regan W, Alem N, Alemán B, Geng B, Girit Ç, Maserati L, et al. A direct transfer of layer-area graphene. *Applied Physics Letters*. 2010;96:113102. DOI: 10.1063/1.3337091.
- Nemšák S, Strelcov E, Guo H, Hoskins BD, Duchoň T, Mueller DN, et al. In aqua electrochemistry probed by XPEEM: experimental setup, examples, and challenges. 2018. ArXiv:1802.02545.
- Hui F, Porti M, Nafria M, Duan H, Lanza M. Fabrication of graphene MEMS by standard transfer: High performance atomic force microscope tips. In: *10th Spanish Conference on Electron Devices (CDE); 2015 February 11–13; Madrid, Spain*. Madrid: IEEE; 2015. 978-1-4799-8108-3/151. DOI: 10.1109/CDE.2015.7087444.
- Martin-Olmos C, Rasool HI, Weiller BH, Gimzewski JK. Graphene MEMS: AFM Probe Performance Improvement. *ACS Nano*. 2013;7(5):4164–4170. DOI: 10.1021/nn400557b.
- Ferrari AC, Basko DM. Raman spectroscopy as a versatile tool for studying the properties of graphene. *Nature Nanotechnology*. 2013;8(4):235–246. DOI: 10.1038/nnano.2013.46.
- Liang X, Sperling BA, Calizo I, Cheng G, Hacker CA, Zhang Q, et al. Toward Clean and Crackless Transfer of Graphene. *ACS Nano*. 2011;5(11):9144–9153. DOI: 10.1021/nn203377t.
- Gao L, Ni G-X, Liu Y, Liu B, Neto AHC, Loh KP. Face-to-face transfer of wafer-scale graphene films. *Nature*. 2014;505(7482):190–194. DOI: 10.1038/nature12763.
- Her M, Beams R, Novotny L. Graphene transfer with reduced residue. *Physics Letters A*. 2013;377(21–22):1455–1458. DOI: 10.1016/j.physleta.2013.04.015.
- Ferrari AC, Meyer JC, Scardaci V, Casiraghi C, Lazzeri M, Mauri F, et al. Raman spectrum of graphene and graphene layers. *Physical Review Letters*. 2006;97(18):187401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.97.187401.
- Hao Y, Wang Y, Wang L, Ni Z, Wang Z, Wang R, et al. Probing Layer Number and Stacking Order of Few-Layer Graphene by Raman Spectroscopy. *Small*. 2010;6:195–200. DOI: 10.1002/sml.200901173.
- Cançado LG, Jorio A, Ferreira EHM, Stavale F, Achete CA, Capaz RB, et al. Quantifying defects in graphene via Raman spectroscopy at different excitation energies. *Nano Letters*. 2011;11(8):3190–3196. DOI: 10.1021/nl201432g.
- Tivanov MS, Kolesov EA, Praneuski AG, Korolik OV, Saad AM, Komissarov IV, et al. Significant G peak temperature shift in Raman spectra of graphene on copper. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 2016;27(9):8879–8883. DOI: 10.1007/s10854-016-4913-7.
- Mohiuddin TMG, Lombardo A, Nair RR, Bonetti A, Savini G, Jalil R, et al. Uniaxial strain in graphene by Raman spectroscopy: G peak splitting, Grüneisen parameters, and sample orientation. *Physical Review B*. 2009;79:205433. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.205433.
- Ferraris N. Probing mechanical properties of graphene with Raman spectroscopy. *Journal of Materials Science*. 2010;45(19):5135–5149. DOI: 10.1007/s10853-010-4673-3.
- Zhang Y, Gao T, Gao Y, Xie S, Ji Q, Yan K, et al. Defect-like Structures of Graphene on Copper Foils for Strain Relief Investigated by High-Resolution Scanning Tunneling Microscopy. *ACS Nano*. 2011;5(5):4014–4022. DOI: 10.1021/nn200573v.

Статья поступила в редакцию 09.11.2018.
Received by editorial board 09.11.2018.

ВЛИЯНИЕ ОБРАБОТКИ ПИРИДИНОМ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКИХ ПЕРОВСКИТОВ

Н. С. МАГОНЬ¹⁾, Т. Ю. ЗЕЛЕНЯК²⁾, О. В. КОРОЛИК¹⁾,
П. П. ГЛАДЫШЕВ²⁾, А. В. МАЗАНИК¹⁾

¹⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

²⁾Государственный университет «Дубна»,
ул. Университетская, 19, 141982, г. Дубна, Московская область, Россия

Исследованы обработанные парами пиридина пленки органо-неорганических перовскитов составов $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ и $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{0,57}\text{Cl}_{0,43})_3$. Анализ измеренных спектров пропускания, фотолюминесценции, а также кинетик интенсивности и центра масс полосы фотолюминесценции в процессе непрерывного освещения показал, что влияние пиридина на органо-неорганические перовскиты неоднозначно: наряду с фотостабилизацией (уменьшением скорости изменения параметров полосы фотолюминесценции при освещении) возникает нежелательный эффект, проявляющийся в резком снижении темновой стабильности (изменении фазового состава в процессе хранения).

Ключевые слова: фотовольтаика; органо-неорганические перовскиты; фотостабильность; пиридин; конфокальная спектроскопия.

Благодарность. Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (договор № Ф16МС-015).

Образец цитирования:

Магонь НС, Зеленьяк ТЮ, Королик ОВ, Гладышев ПП, Мазаник АВ. Влияние обработки пиридином на оптические свойства пленок органо-неорганических перовскитов. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2019;2:66–72.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-66-72>

For citation:

Mahon NS, Zelenyak TY, Korolik OV, Gladyshev PP, Mazanik AV. Influence of pyridine treatment on the optical properties of organic-inorganic perovskite films. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2019;2:66–72. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-66-72>

Авторы:

Наталья Сергеевна Магонь – аспирантка кафедры энергофизики физического факультета. Научный руководитель – А. В. Мазаник.

Татьяна Юрьевна Зеленьяк – аспирантка кафедры химии, новых технологий и материалов факультета естественных и инженерных наук. Научный руководитель – П. П. Гладышев.

Ольга Васильевна Королик – кандидат физико-математических наук; заведующий научно-исследовательской лабораторией энергоэффективных материалов и технологий кафедры энергофизики физического факультета.

Павел Павлович Гладышев – доктор химических наук, профессор; заместитель заведующего кафедрой химии, новых технологий и материалов факультета естественных и инженерных наук.

Александр Васильевич Мазаник – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры энергофизики физического факультета.

Authors:

Natalia S. Mahon, postgraduate student at the department of energy physics, faculty of physics.
natalimahon@gmail.com

Tatyana Y. Zelenyak, postgraduate student at the department of chemistry, new technologies and materials, faculty of natural and engineering sciences.
tatyana.zelenyak@bk.ru

Olga V. Korolik, PhD (physics and mathematics); head of the research laboratory of energy-efficient materials and technologies, department of the energy physics, faculty of physics.
olga_zinchuk@tut.by

Pavel P. Gladyshev, doctor of science (chemistry), full professor; deputy head of the department of chemistry, new technologies and materials, faculty of natural and engineering science.
pglad@yandex.ru

Alexander V. Mazanik, PhD (physics and mathematics), doцент; associate professor at the department of energy physics, faculty of physics.
mazanikalexander@gmail.com

INFLUENCE OF PYRIDINE TREATMENT ON THE OPTICAL PROPERTIES OF ORGANIC-INORGANIC PEROVSKITE FILMS

*N. S. MAHON^a, T. Y. ZELENYAK^b, O. V. KOROLIK^a,
P. P. GLADYSHEV^b, A. V. MAZANIK^a*

^a*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*

^b*Dubna State University, 19 Universitetskaya Street, Dubna 141982, Moscow region, Russia*

Corresponding author: N. S. Mahon (natalimahon@gmail.com)

The pyridine treated films of organic-inorganic perovskites with $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ and $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{0.57}\text{Cl}_{0.43})_3$ composition were studied. An analysis of the transmission and photoluminescence spectra, as well as kinetics of photoluminescence band intensity and mass center under continuous illumination showed that the effect of pyridine on organic-inorganic perovskites is ambiguous, because along with photostabilization (decrease in the rate of change of photoluminescence band parameters under illumination), the substantial decrease of dark stability takes place, which manifests itself in the change of phase composition during storage.

Keywords: photovoltaics; organic-inorganic perovskites; photostability; pyridine; confocal spectroscopy.

Acknowledgements. The work was supported by the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (contract No. Ф16МС-015).

Введение

В настоящее время органо-неорганические перовскиты (ОНП) – перспективные фотопоглощающие материалы для фотовольтаики. Это обусловлено простыми, экологичными и недорогими методами производства, высоким коэффициентом поглощения света, близкой к оптимальному значению шириной запрещенной зоны, большим временем жизни (до единиц микросекунд) и длиной диффузии носителей заряда (порядка нескольких микрометров, что превышает толщину поглощающего слоя) [1–4]. Сегодня перовскитные солнечные элементы имеют КПД более 23 % [5]. Однако их главным недостатком является низкая стабильность в реальных условиях эксплуатации. Они достаточно легко деградируют при контакте с молекулами воды, кислорода, а также при нагреве и длительном освещении [6–9]. Химическую и термическую деградацию можно минимизировать, используя инкапсуляцию и теплоотвод, поэтому фотодеградация – главная проблема на пути коммерциализации органо-неорганических перовскитных солнечных элементов.

Одним из основных фотоиндуцированных процессов, возникающих в перовскитах, является перераспределение катионов и анионов в соответствующих подрешетках [10–14]. Такой процесс может приводить к увеличению скорости поверхностной рекомбинации на границах между перовскитом и транспортными слоями и, соответственно, уменьшению эффективного времени жизни носителей заряда [8; 11; 15; 16]. В работах [17; 18] предложено использовать пиридин для стабилизации перовскитной решетки. Показано, что обработка пиридином приводит к увеличению степени кристалличности перовскита, делает его более однородным и способствует увеличению интенсивности фотолюминесценции (ФЛ), а также уменьшению скорости поверхностной рекомбинации носителей заряда [15; 19]. Однако обработка пиридином может сопровождаться нежелательными эффектами, одним из которых является образование новой фазы, проявляющейся в спектрах ФЛ [20]. Тем не менее информация о механизмах влияния пиридина на свойства органо-неорганических перовскитов по-прежнему недостаточна и противоречива.

Фотоиндуцированные процессы в ОНП могут детектироваться, начиная с ранних стадий, посредством регистрации спектров и кинетик ФЛ [16; 21]. В настоящей работе была использована конфокальная фотолюминесцентная спектроскопия, позволяющая извлекать информацию о локальном спектре электронных состояний системы, а также об относительной вероятности излучательной и безызлучательной рекомбинации. В предложенном нами подходе лазерный луч использовался не только для возбуждения спектров ФЛ, но и в качестве источника фотодеградации. Периодически регистрируя спектры ФЛ при непрерывном освещении лазерным лучом, можно наблюдать эволюцию системы в режиме *online*, что дает представление о фотоиндуцированных процессах, протекающих в солнечных элементах и материалах для их создания.

Материалы и методы

Исследовались пленки органо-неорганических перовскитов составов $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ и $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{0,57}\text{Cl}_{0,43})_3$, а также их аналоги, обработанные пиридином. Все образцы изготовлены одностадийным методом из прекурсоров в перчаточном боксе в атмосфере аргона. Тонкопленочные структуры получены методом *spin-coating* на подложках, представляющих собой предметные стекла размером 10×10 мм. При получении $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ прекурсорами выступали растворенные в безводном диметилформамиде соли $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$ и PbI_2 , при получении $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{0,57}\text{Cl}_{0,43})_3$ – $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$ и PbCl_2 . Соль PbCl_2 получена растворением PbO в концентрированной соляной кислоте (HCl) в соотношении 1 : 2 при постоянном перемешивании. Остальные реактивы были приобретены в *Sigma Aldrich* (США). Растворы перемешивались в течение 12 ч при 60°C . Раствор из прекурсоров наносился на стеклянную подложку при скорости вращения 500 об/мин в течение 10 с, 2000 об/мин – 20 с, 4000 об/мин – 20 с. После образования перовскитных пленок образцы $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ отжигались 30 мин при температуре 60°C , образцы $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{0,57}\text{Cl}_{0,43})_3$ – 30 мин при температуре 120°C . Затем часть образцов была обработана парами пиридина при комнатной температуре в течение часа, после чего проводилась герметизация с помощью покровного стекла и герметика во избежание влияния атмосферной влаги и кислорода на перовскитный слой.

Спектры ФЛ регистрировались на конфокальном спектрометре Nanofinder HE (*LOTIS III*, Беларусь – Япония). Условия измерения спектров: длина волны возбуждающего света 532 нм; числовая апертура объектива 0,3, что соответствовало диаметру лазерного пучка на образце порядка 2 мкм и глубине фокуса свыше 10 мкм; спектральное разрешение не хуже 0,1 нм; мощность возбуждающего излучения 0,6 мВт; время накопления сигнала при записи одного спектра ФЛ 5 с. Кинетики ФЛ были получены путем последовательной регистрации отдельных спектров при таких же условиях. Поскольку диаметр лазерного пучка на образце сопоставим с характерными значениями диффузионной длины неравновесных носителей заряда в пленках перовскитов, анализ кинетик ФЛ проводился с учетом диффузии носителей в плоскости образца. Также следует отметить, что глубина конфокального объема существенно превышает толщину исследованных пленок, поэтому регистрируемые спектры ФЛ были сформированы излучением, генерированным по всей толщине изучаемых перовскитных слоев.

Результаты и их обсуждение

Характерные спектры ФЛ образцов представлены на рис. 1. Для всех пленок доминирует полоса, обусловленная межзонной излучательной рекомбинацией электронно-дырочных пар. Для определения положения центра масс наблюдаемых полос они были аппроксимированы кривыми Гаусса. Обработка органо-неорганических перовскитов парами пиридина привела к увеличению интенсивности ФЛ в несколько раз как для $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, так и для $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{0,57}\text{Cl}_{0,43})_3$ (см. рис. 1), что согласно [14] связано с подавлением безызлучательной рекомбинации носителей заряда. Кроме того, для перовскита состава $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ наблюдается заметный (на 20 нм) сдвиг центра масс полосы ФЛ в коротковолновую область, что может быть объяснено уменьшением концентрации мелких центров, участвующих в процессах излучательной рекомбинации, в результате обработки пиридином [14]. Отсутствие сдвига полос ФЛ в область длинных волн после обработки пиридином свидетельствует о том, что он незначительно влияет на кристаллическую структуру перовскита, в частности, не приводит к появлению хвостов Урбаха в плотности электронных состояний.

Представленные на рис. 2, а, кинетики демонстрируют монотонное увеличение интенсивности полосы ФЛ для необработанных пиридином пленок обоих составов при непрерывном освещении лазером, что можно объяснить деактивацией центров безызлучательной рекомбинации при освещении [14]. Кроме того, допустимо предположить, что под воздействием света в перовскитах сложного состава уменьшается коэффициент диффузии носителей заряда из-за перегруппировки ионов разных видов в подрешетках и, соответственно, формирования случайного потенциального рельефа. Применительно к конфокальной спектроскопии данный эффект является дополнительным механизмом, отвечающим за увеличение интенсивности ФЛ вследствие повышения вероятности рекомбинации фотогенерированных носителей заряда в области возбуждения [21]. Влияние указанного эффекта на наблюдаемую нами кинетику изменения интенсивности полосы ФЛ подтверждается заметным смещением ее центра масс в область длинных волн в процессе освещения лазером (рис. 2, б, кривая 3). Такой сдвиг указывает на возникновение в материале разброса локальных значений ширины запрещенной зоны E_g от точки к точке и повышение вклада областей с меньшими значениями E_g в наблюдаемые спектры ФЛ [16; 21].

Как видно из рис. 2, обработка пиридином не приводит к качественному изменению кинетик интенсивности и центра масс полосы ФЛ для перовскита простого состава. В то же время для перовскита сложного состава $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{0,57}\text{Cl}_{0,43})_3$ такая обработка способствует уменьшению скорости изменения параметров ФЛ, стабилизируя значения центра масс и интенсивности ФЛ во времени. Так, для обработанных пиридином пленок $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{0,57}\text{Cl}_{0,43})_3$ смещение центра масс полосы ФЛ в процессе

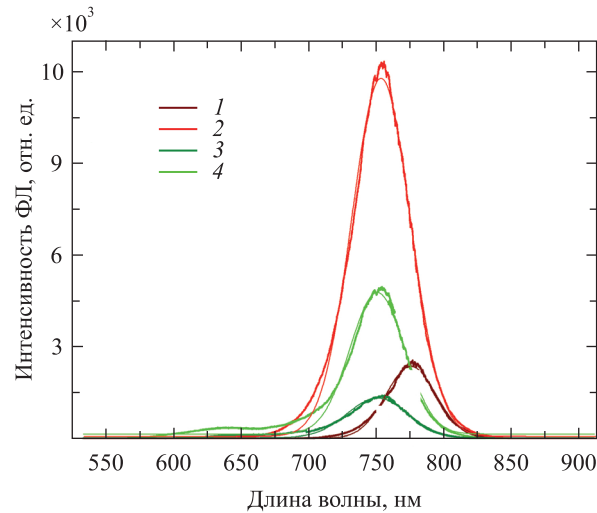


Рис. 1. Спектры ФЛ пленок $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (1, 2) и $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{0.57}\text{Cl}_{0.43})_3$ (3, 4) без обработки (1, 3) и обработанные пиридином (2, 4) и их аппроксимация кривыми Гаусса
Fig. 1. Photoluminescence spectra for $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (1, 2) and $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{0.57}\text{Cl}_{0.43})_3$ films (3, 4) without (1, 3) and with pyridine treatment (2, 4) and their fitting with the Gauss lines

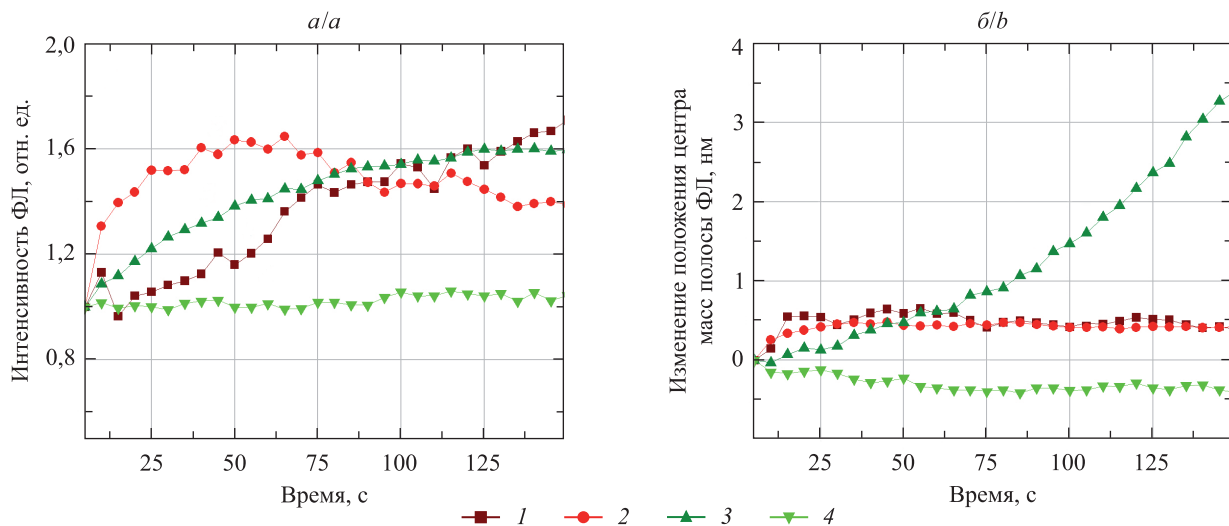
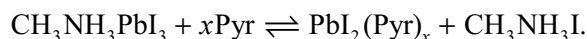


Рис. 2. Кинетики интенсивности (а) и центра масс (б) полосы ФЛ пленок $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (1, 2) и $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{0.57}\text{Cl}_{0.43})_3$ (3, 4) без обработки (1, 3) и обработанные пиридином (2, 4)
Fig. 2. Kinetics of PL intensity (a) and mass center (b) for $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (1, 2) and $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{0.57}\text{Cl}_{0.43})_3$ films (3, 4) without (1, 3) and with pyridine treatment (2, 4)

освещения лазером уменьшается приблизительно в 7 раз по сравнению с необработанными пленками. Таким образом, обработка пиридином приводит к стабилизации ионов в решетке перовскита и, соответственно, препятствует образованию случайного потенциального рельефа.

Для оценки долговременной стабильности перовскитных пленок, обработанных пиридином, выполнялось измерение их спектров пропускания после года хранения в темновых условиях (рис. 3).

Качественное изменение спектров пропускания указывает на модификацию фазового состава пленок, для объяснения которой необходимо учесть возможные механизмы взаимодействия пиридина: поверхностный и объемный. Так, в [17] постулировалось, что влияние пиридина ограничивается взаимодействием с поверхностью кристалла, что связано с пассивацией атомами азота не полностью координированных атомов Pb на поверхности кристалла. Однако в [18] показано, что пиридин и его производные способны проникать внутрь кристаллов перовскита и, нарушая исходную структуру, образовывать новые фазы. На основании данных, полученных с помощью рентгенофазного анализа и ИК-спектроскопии, авторами [18] предложена следующая схема взаимодействия перовскитной пленки с пиридином:



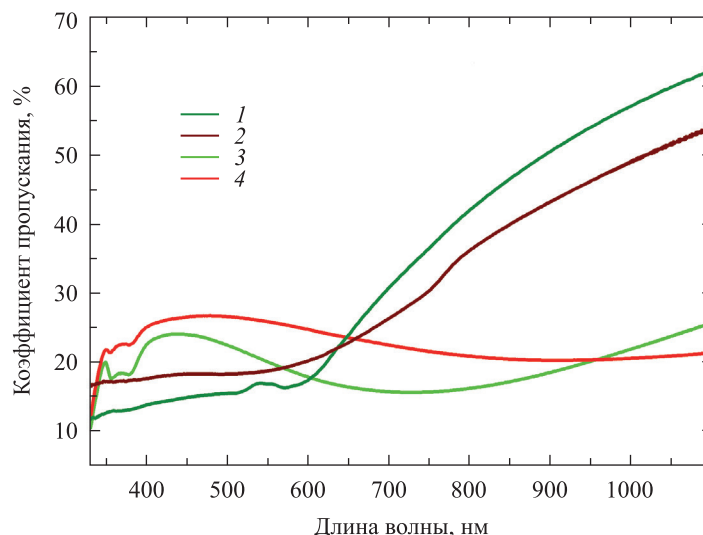


Рис. 3. Спектры пропускания обработанных пиридином пленок перовскитов $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{0.57}\text{Cl}_{0.43})_3$ (1, 3) и $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (2, 4), измеренные после изготовления (1, 2) и через год хранения в темновых условиях (3, 4)

Fig. 3. Transmission spectra for pyridine treated $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{0.57}\text{Cl}_{0.43})_3$ (1, 3) and $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (2, 4) perovskite films measured after preparation (1, 2) and after one year of storage in the dark (3, 4)

Пиридин является более слабым основанием ($\text{p}K_a = 5,30$), и реакция замещения метиламина – более сильного основания ($\text{p}K_a = 10,62$) – может представляться маловероятной. Однако следует учесть, что приведенные величины $\text{p}K_a$ связаны с различной степенью гидратации указанных веществ. В газовой фазе значение сродства пиридина к протону близко к таковому для алифатических аминов [22; 23], что делает реальным протекание указанной реакции. Такое отличие связывают с возможностью мезомерной делокализации положительного заряда в катионе пиридина, приводящей к уменьшению энергии гидратации [22; 24]. Представляется, что, кроме образования комплекса пиридина с катионом свинца с участием неподеленной электронной пары азота, можно ожидать образование π -комплексов пиридина с ионами металлов подобно комплексам бензола. Таким образом, уточнение механизмов взаимодействия пиридинов с органо-неорганическими перовскитами требует дополнительных углубленных исследований.

Заключение

Обработка пиридином приводит к заметному снижению темновой стабильности органо-неорганических перовскитов, что проявляется в исчезновении края поглощения исходного материала и указывает на изменение фазового состава пленок вследствие химического взаимодействия ионов перовскита с пиридином. Вместе с тем такая обработка способствует уменьшению плотности глубоких ловушек (увеличение интенсивности ФЛ за счет подавления безызлучательной рекомбинации); уменьшению плотности мелких центров, участвующих в излучательных переходах (сдвиг центра масс полосы ФЛ в коротковолновую область для ОНП состава $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$); фотостабилизации кристаллической решетки перовскита (стабилизация интенсивности и центра масс полосы ФЛ благодаря замедлению образования случайного потенциального рельефа для ОНП с анионной подрешеткой сложного состава). Таким образом, решение задачи повышения долговременной стабильности органо-неорганических перовскитов требует дальнейших исследований.

Библиографические ссылки

1. Park N-G, Grätzel M, Miyasaka T, editors. *Organic-Inorganic Halide Perovskite Photovoltaics. From Fundamentals to Device Architectures*. Cham: Springer; 2016. DOI: 10.1007/978-3-319-35114-8.
2. Song Zh, McElvany Ch, Phillips A, Celik I, Krantz PW, Wathage SC, et al. A techno-economic analysis of perovskite solar module manufacturing with low-cost materials and techniques. *Energy and Environmental Science*. 2017;10(6):1297–1305. DOI: 10.1039/C7EE00757D.
3. Chen Q, De Marco N, Yang Y, Song T-B, Chen C-C, Zhao H, et al. Under the spotlight: The organic-inorganic hybrid halide perovskite for optoelectronic applications. *Nano Today*. 2015;10(3):355–396. DOI: 10.1016/J.NANTOD.2015.04.009.

4. Zhou D, Zhou T, Tian Yu, Zhu X, Yafang Tu. Perovskite-Based Solar Cells: Materials, Methods, and Future Perspectives. *Journal of Nanomaterials*. 2018;2018:15. DOI: 10.1155/2018/8148072.
5. National Renewable Energy Laboratory (NREL) [Internet]. 2018 [cited 2018 December]. Available from: <https://www.nrel.gov/pv/assets/images/efficiency-chart-20180716.jpg>.
6. Berhe TA, Su W-N, Chen Ch-Hs, Pan C-J, Cheng J-H, Chen H-M, et al. Organometal halide perovskite solar cells: degradation and stability. *Energy and Environmental Science*. 2016;9:323–356. DOI: 10.1039/C5EE02733K.
7. Saliba M, Matsui T, Seo J-Y, Domanski K, Correa-Baena J-P, Nazeeruddin MK, et al. Cesium-containing triple cation perovskite solar cells: improved stability, reproducibility and high efficiency. *Energy and Environmental Science*. 2016;9(6):1989–1997. DOI: 10.1039/C5EE03874J.
8. Gottesman R, Zaban A. Perovskites for photovoltaics in the spotlight: photoinduced physical changes and their implications. *Accounts of Chemical Research*. 2016;49(2):320–329. DOI: 10.1021/acs.accounts.5b00446.
9. Yao Y, Wang G, Wu F, Liu D, Lin C, Rao X, et al. The interface degradation of planar organic-inorganic perovskite solar cell traced by light beam induced current (LBIC). *RSC Advances*. 2017;7(68):42973–42978. DOI: 10.1039/C7RA06423C.
10. Zhao Y, Zhou W, Tan H, Fu R, Li Q, Lin F, et al. Mobile-ion-induced degradation of organic hole-selective layers in perovskite solar cells. *Journal of Physical Chemistry C*. 2017;121(27):14517–14523. DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b04684.
11. DeQuilettes DW, Zhang W, Burlakov VM, Graham DJ, Leijtens T, Osheroov A, et al. Photo-induced halide redistribution in organic-inorganic perovskite films. *Nature Communications*. 2016;7:9. DOI: 10.1038/ncomms11683.
12. Li Zh, Xiao Ch, Yang Ye, Harvey SP, Kim DH, Christians JA, et al. Extrinsic ion migration in perovskite solar cells. *Energy and Environmental Science*. 2017;10(5):1234–1242. DOI: 10.1039/C7EE00358G.
13. Zhang T, Cheung S-H, Meng X, Zhu L, Bai Y, Ho CHY, et al. Pinning down the anomalous light soaking effect towards high performance and fast response perovskite solar cells: the ion-migration induced charge accumulation. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 2017;8(20):5069–5076. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.7b02160.
14. Quilettes DW, Vorpahl SM, Stranks SD, Nagaoka H, Eperon GE, Ziffer ME, et al. Impact of microstructure on local carrier lifetime in perovskite solar cells. *Science*. 2015;348(6235):683–686. DOI: 10.1126/science.aaa5333.
15. Hu J, Gottesman R, Gouda L, Kama A, Priel M, Tirosh S, et al. Photovoltage behavior in perovskite solar cells under light-soaking showing photoinduced interfacial changes. *ACS Energy Letters*. 2017;2(5):950–956. DOI: 10.1021/acsenenergylett.7b00212.
16. Hoke ET, Slotcavage DJ, Dohner ER, Bowring AR, Karunadasa HI, McGehee MD. Reversible photo-induced trap formation in mixed-halide hybrid perovskites for photovoltaics. *Chemical Science*. 2015;6(1):613–617. DOI: 10.1039/C4SC03141E.
17. Noel NK, Abate A, Stranks SD, Parrott ES, Burlakov VM, Goriely A, et al. Enhanced photoluminescence and solar cell performance via lewis base passivation of organic-inorganic lead halide perovskites. *ACS Nano*. 2014;8(10):9815–9821. DOI: 10.1021/nn5036476.
18. Yue Y, Salim NT, Wu Y, Yang X, Islam A, Chen W, et al. Enhanced stability of perovskite solar cells through corrosion-free pyridine derivatives in hole-transporting materials. *Advanced Materials*. 2016;28(48):10738–10743. DOI: 10.1002/adma.201602822.
19. Ahmed GhH, Yin J, Bose R, Sinatra L, Alarousu E, Yengel E, et al. Pyridine-induced dimensionality change in hybrid perovskite nanocrystals. *Chemistry of Materials*. 2017;29(10):4393–4400. DOI: 10.1021/acs.chemmater.7b00872.
20. Yang D, Yang R, Ren X, Zhu X, Yang Z, Li C. Hysteresis-suppressed high-efficiency flexible perovskite solar cells using solid-state ionic-liquids for effective electron transport. *Advanced Materials*. 2016;28(26):5206–5213. DOI: 10.1002/adma.201600446.
21. Ščajev P, Qin C, Aleksiejunas RN, Baronas P, Miasojedovas S, Fujihara T, et al. Diffusion enhancement in highly excited MAPbI₃ perovskite layers with additives. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 2018;9(12):3167–3172. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.8b01155.
22. Джоэль ДжА, Миллс К. *Химия гетероциклических соединений*. Зайцева ФВ, Карчава АВ, переводчики. Москва: Мир; 2004. 728 с.
23. Speranza M. The reactivity of heteroaromatic compounds in gas phase. *Advances in Heterocyclic Chemistry*. 1986;40:25–104. DOI: 10.1016/S0065-2725(08)60091-4.
24. Arnett EM, Chawla B. Complete thermodynamic analysis of the hydration of thirteen pyridines and pyridinium ions. The special case of 2,6-di-tert-butylpyridine. *Journal of the American Chemical Society*. 1979;101(24):7141–7146. DOI: 0.1021/ja00518a001.

References

1. Park N-G, Grätzel M, Miyasaka T, editors. *Organic-Inorganic Halide Perovskite Photovoltaics. From Fundamentals to Device Architectures*. Cham: Springer; 2016. DOI: 10.1007/978-3-319-35114-8.
2. Song Zh, McElvany Ch, Phillips A, Celik I, Krantz PW, Wathage SC, et al. A techno-economic analysis of perovskite solar module manufacturing with low-cost materials and techniques. *Energy and Environmental Science*. 2017;10(6):1297–1305. DOI: 10.1039/C7EE00757D.
3. Chen Q, De Marco N, Yang Y, Song T-B, Chen C-C, Zhao H, et al. Under the spotlight: The organic-inorganic hybrid halide perovskite for optoelectronic applications. *Nano Today*. 2015;10(3):355–396. DOI: 10.1016/J.NANTOD.2015.04.009.
4. Zhou D, Zhou T, Tian Yu, Zhu X, Yafang Tu. Perovskite-Based Solar Cells: Materials, Methods, and Future Perspectives. *Journal of Nanomaterials*. 2018;2018:15. DOI: 10.1155/2018/8148072.
5. National Renewable Energy Laboratory (NREL) [Internet]. 2018 [cited 2018 December]. Available from: <https://www.nrel.gov/pv/assets/images/efficiency-chart-20180716.jpg>.
6. Berhe TA, Su W-N, Chen Ch-Hs, Pan C-J, Cheng J-H, Chen H-M, et al. Organometal halide perovskite solar cells: degradation and stability. *Energy and Environmental Science*. 2016;9:323–356. DOI: 10.1039/C5EE02733K.
7. Saliba M, Matsui T, Seo J-Y, Domanski K, Correa-Baena J-P, Nazeeruddin MK, et al. Cesium-containing triple cation perovskite solar cells: improved stability, reproducibility and high efficiency. *Energy and Environmental Science*. 2016;9(6):1989–1997. DOI: 10.1039/C5EE03874J.
8. Gottesman R, Zaban A. Perovskites for photovoltaics in the spotlight: photoinduced physical changes and their implications. *Accounts of Chemical Research*. 2016;49(2):320–329. DOI: 10.1021/acs.accounts.5b00446.
9. Yao Y, Wang G, Wu F, Liu D, Lin C, Rao X, et al. The interface degradation of planar organic-inorganic perovskite solar cell traced by light beam induced current (LBIC). *RSC Advances*. 2017;7(68):42973–42978. DOI: 10.1039/C7RA06423C.

10. Zhao Y, Zhou W, Tan H, Fu R, Li Q, Lin F, et al. Mobile-ion-induced degradation of organic hole-selective layers in perovskite solar cells. *Journal of Physical Chemistry C*. 2017;121(27):14517–14523. DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b04684.
11. DeQuilettes DW, Zhang W, Burlakov VM, Graham DJ, Leijtens T, Osherov A, et al. Photo-induced halide redistribution in organic-inorganic perovskite films. *Nature Communications*. 2016;7:9. DOI: 10.1038/ncomms11683.
12. Li Zh, Xiao Ch, Yang Ye, Harvey SP, Kim DH, Christians JA, et al. Extrinsic ion migration in perovskite solar cells. *Energy and Environmental Science*. 2017;10(5):1234–1242. DOI: 10.1039/C7EE00358G.
13. Zhang T, Cheung S-H, Meng X, Zhu L, Bai Y, Ho CHY, et al. Pinning down the anomalous light soaking effect towards high performance and fast response perovskite solar cells: the ion-migration induced charge accumulation. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 2017;8(20):5069–5076. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.7b02160.
14. Quilettes DW, Vorpahl SM, Stranks SD, Nagaoka H, Eperon GE, Ziffer ME, et al. Impact of microstructure on local carrier lifetime in perovskite solar cells. *Science*. 2015;348(6235):683–686. DOI: 10.1126/science.aaa5333.
15. Hu J, Gottesman R, Gouda L, Kama A, Priel M, Tirosh S, et al. Photovoltage behavior in perovskite solar cells under light-soaking showing photoinduced interfacial changes. *ACS Energy Letters*. 2017;2(5):950–956. DOI: 10.1021/acscenergylett.7b00212.
16. Hoke ET, Slotcavage DJ, Dohner ER, Bowring AR, Karunadasa HI, McGehee MD. Reversible photo-induced trap formation in mixed-halide hybrid perovskites for photovoltaics. *Chemical Science*. 2015;6(1):613–617. DOI: 10.1039/C4SC03141E.
17. Noel NK, Abate A, Stranks SD, Parrott ES, Burlakov VM, Goriely A, et al. Enhanced photoluminescence and solar cell performance via lewis base passivation of organic-inorganic lead halide perovskites. *ACS Nano*. 2014;8(10):9815–9821. DOI: 10.1021/nm5036476.
18. Yue Y, Salim NT, Wu Y, Yang X, Islam A, Chen W, et al. Enhanced stability of perovskite solar cells through corrosion-free pyridine derivatives in hole-transporting materials. *Advanced Materials*. 2016;28(48):10738–10743. DOI: 10.1002/adma.201602822.
19. Ahmed GhH, Yin J, Bose R, Sinatra L, Alarousu E, Yengel E, et al. Pyridine-induced dimensionality change in hybrid perovskite nanocrystals. *Chemistry of Materials*. 2017;29(10):4393–4400. DOI: 10.1021/acs.chemmater.7b00872.
20. Yang D, Yang R, Ren X, Zhu X, Yang Z, Li C. Hysteresis-suppressed high-efficiency flexible perovskite solar cells using solid-state ionic-liquids for effective electron transport. *Advanced Materials*. 2016;28(26):5206–5213. DOI: 10.1002/adma.201600446.
21. Ščajev P, Qin C, Aleksiejunas RN, Baronas P, Miasojedovas S, Fujihara T, et al. Diffusion enhancement in highly excited MAPbI₃ perovskite layers with additives. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 2018;9(12):3167–3172. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.8b01155.
22. Joule JA, Mills K. *Heterocyclic Chemistry*. Oxford: Blackwell; 2002. 589 p.
Russian edition: Dzhoul' DzhA, Mills K. *Khimiya geterotsiklicheskich soedinenii*. Zaitseva FV, Karchava AV, translators. Moscow: Mir; 2004. 728 p.
23. Speranza M. The reactivity of heteroaromatic compounds in gas phase. *Advances in Heterocyclic Chemistry*. 1986;40:25–104. DOI: 10.1016/S0065-2725(08)60091-4.
24. Arnett EM, Chawla B. Complete thermodynamic analysis of the hydration of thirteen pyridines and pyridinium ions. The special case of 2,6-di-tert-butylpyridine. *Journal of the American Chemical Society*. 1979;101(24):7141–7146. DOI: 0.1021/ja00518a001.

Статья поступила в редколлегию 04.02.2019.
Received by editorial board 04.02.2019.

РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОПОТЕНЦИАЛА В ПРИЭЛЕКТРОДНОЙ ОБЛАСТИ ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ИОННОГО ЭЛЕКТРОЛИТА

Г. С. БОКУН¹⁾, Д. ДИ КАПРИО²⁾, М. Ф. ГОЛОВКО³⁾

¹⁾Белорусский государственный технологический университет,
ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск, Беларусь

²⁾Национальная высшая школа химии Парижа,
ул. Пьера и Марии Кюри, 11, 75005, г. Париж, Франция

³⁾Институт физики конденсированных систем НАН Украины,
ул. Свентицкого, 1, 79011, г. Львов, Украина

Твердотельный электролит рассматривается как система, состоящая из катионов, перемещающихся по объему твердого тела, и анионов, подвижностью которых из-за их больших размеров по сравнению с размерами катионов можно пренебречь. Соответственно, в однородном случае имеет место локальная компенсация заряда. Под действием внешнего электрического поля катионы создают в приэлектродной области неоднородные перераспределения подвижных зарядов и электрического поля. Модель применяется для статистико-механического описания высокотемпературных ионных проводников и источников тока. Для получения функционала свободной энергии подсистемы подвижных зарядов в зависимости от распределения их плотности использована схема кластерного разложения по перенормированным майеровским функциям. В качестве базисного использован гамильтониан системы, состоящей из электрических зарядов, движущихся в поле одночастичных ячеечных потенциалов средних сил. Бинарная функция базисной системы на основании результатов метода коллективных переменных выражена через экранированный потенциал и потенциалы средних сил. Вычислена внутренняя энергия системы с учетом близко- и дальнего действия. По последней с помощью соотношений Гиббса – Дюгема найден функционал свободной энергии, из условия экстремальности которого определено распределение плотности числа подвижных частиц и электрического потенциала в приграничной области электролита. Потенциалы средних сил получены в результате решения системы интегральных уравнений в решеточном приближении с учетом близко- и дальнего действия. Переход от коррелятивной функции к корреляционной позволил выделить коррелированную и некоррелированную части электрического потенциала. Рассматривается случай линейных вкладов по отклонению концентрации зарядов от однородного распределения в химический потенциал. При расчетах учитывается вклад корреляции между частицами первых трех координационных сфер, что порождает случай притяжения первых, отталкивания вторых и третьих соседей. Описание осуществляется с помощью линейного дифференциального уравнения четвертого порядка с комплексными значениями корней характеристического уравнения. В работе выполнен анализ результатов аналитического решения.

Ключевые слова: твердые электролиты; экранированный потенциал; близкое действие; функционал свободной энергии.

Благодарность. Проект получил финансовую поддержку исследовательской и инновационной программы Евросоюза «Горизонт-2020» (грант Марии Склодовской-Кюри № 734276).

Образец цитирования:

Бокун ГС, ди Каприо Д, Головки МФ. Распределения электропотенциала в приэлектродной области твердотельного ионного электролита. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2019;2:73–83.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-73-83>

For citation:

Bokun HS, di Caprio D, Holovko MF. Distribution of electro-potential in the electrode area of a solid state ion electrolyte. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2019;2: 73–83. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-73-83>

Авторы:

Георгий Станиславович Бокун – кандидат физико-математических наук; доцент кафедры механики и конструирования факультета химической технологии и техники.
Дун ди Каприо – доктор наук (физика); научный сотрудник.
Мирослав Федорович Головки – член-корреспондент НАН Украины, доктор физико-математических наук, профессор; главный научный сотрудник отдела теории мягкой материи.

Authors:

Heorhi S. Bokun, PhD (physics and mathematics); associate professor at the department of mechanics and design, faculty of chemical technology and engineering.
gbokun12@gmail.com
Dung di Caprio, PhD (physics); researcher.
dung.di-caprio@chimie-paristech.fr
<https://orcid.org/0000-0001-6239-7427>
Myroslav F. Holovko, corresponding member of the National Academy of Sciences of Ukraine, doctor of science (physics and mathematics), full professor; chief researcher, department of soft matter theory.
holovko@icmp.lviv.ua

DISTRIBUTION OF ELECTROPOTENTIAL IN THE ELECTRODE AREA OF A SOLID STATE ION ELECTROLYTE

H. S. BOKUN^a, D. DI CAPRIO^b, M. F. HOLOVKO^c

^aBelarusian State Technological University, 13a Sviardlova Street, Minsk 220006, Belarus

^bNational Graduate School of Chemistry, 11 Pierre and Marie Curie Street, Paris 75005, France

^cInstitute for Condensed Matter Physics, National Academy of Sciences of Ukraine,
1 Sventitskogo Street, Lviv 79011, Ukraine

Corresponding author: H. S. Bokun (gbokun12@gmail.com)

A solid state electrolyte is considered as a system consisting of cations moving through the volume of a solid body and anions whose mobility can be neglected due to their large size compared to the size of the cations. Accordingly, in the homogeneous case local charge compensation takes place. Under the action of an external electric field, cations create in the near electrode area inhomogeneous redistribution of mobile charges and electric field. The model is used for the statistical-mechanical description of high-temperature ionic conductors and current sources. To obtain the free energy functional of the mobile charge subsystem depending on the distribution of their density, the cluster expansion scheme for the renormalized Mayer functions is used. The Hamiltonian of a system consisting of electric charges moving in the field of single-particle cell potentials of average forces is used as the basis one. The binary function of the host system is expressed in terms of the screened potentials and the potentials of the average forces based on the results of the method of collective variables. The internal energy of the system is calculated taking into account the short- and long-range effects. The Gibbs – Duhem relation was used for calculating the free energy functional of the system. The distribution of the number density of moving particles and the electric potential in the near electrode region were found from the condition of extremality of the free energy. The potentials of average forces are obtained as a result of solving a system of integral equations in the lattice approximation, with accounting of the short- and long-range effects. The transition from the correlation function to the correlation function allowed us to identify the correlated and uncorrelated parts of the electric potential. The linear contributions of the deviation of the charge concentrations from a uniform distribution to the chemical potential are considered. The calculations take into account the contribution of the correlation between the particles in the first three coordination spheres that leads to attraction of the first, repulsion of the second and third neighbors. The description is carried out using a linear differential equation of the fourth-order with complex values of the roots of the characteristic equation. The paper analyzes the results of the analytical solution.

Keywords: solid electrolytes; shielded potential; short range interaction; free energy functional.

Acknowledgements. The project has received funding from the European Union's Horizon-2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No. 734276.

Введение

Интеркаляционные керамики широко используются в качестве высокотемпературных ионных проводников и в источниках тока [1]. Для описания свойств таких материалов применяется модель, в которой исследуется подвижность катионов с учетом неподвижных анионов, обеспечивающих локальную компенсацию заряда. При этом изменением распределения анионов под воздействием внешнего поля можно пренебречь. В результате для статистического описания такой системы достаточно исследовать подсистему катионов с вандерваальсовым и кулоновским взаимодействиями. Поэтому рассматривается случай, когда гамильтониан системы из N катионов состоит из парных коротко- и дальнедействующих потенциалов. Твердотельная структура системы позволяет описывать ее с помощью ячеечной теории, основанной на применении ячеечных одночастичных потенциалов средних сил [2]. Используется подход, при котором весь объем V системы разбивается на M одинаковых ячеек ($M > N$). Состояние i -й ячейки ($i = 1, \dots, M$) характеризуется значениями числа заполнения α_i , соответствующими случаю, когда ячейка вакантна ($\alpha_i = 0$) или занята одной частицей ($\alpha_i = 1$). Рассматривается канонический ансамбль, соответственно, $\sum_{i=1}^M \alpha_i = N = \text{const}$.

Возникающую под действием поля электрода неоднородность опишем отклонением средних значений чисел заполнения c_{α_i} от концентрации частиц $c = \frac{N}{M}$ в однородном случае. Далее систему с вакансиями рассматриваем как двухсортную систему, состоящую из реальных частиц (катионов) и фиктивных частиц (вакансий), которые не взаимодействуют между собой и с катионами. Для описания малых колебаний частиц относительно узлов решетки привлекаем представления теории среднего поля, гамильтониан которого имеет вид

$$H_0 = \sum_{i=1}^M \sum_{\alpha_i=0}^1 P(q_{\alpha_i}), \quad (1)$$

где P – потенциальная энергия одночастичного поля q , в котором движется частица сорта α в ячейке i . При этом $P(q_{\alpha_i}) \neq 0$. Энергию $P(q_{\alpha_i})$, входящую в (1), выражаем через одночастичные ячеечные потенциалы [2; 3]:

$$P(q_{\alpha_i}) = \sum_{j(i)}^M \zeta_j(q_{\alpha_i}), \quad (2)$$

где $\zeta_j(q_{\alpha_i})$ – потенциал силового действия на частицу сорта α_i со стороны частиц, статистически распределенных в ячейке j . Суммирование в (2) выполняется по всем узлам j , окружающим ячейку i .

Построение системы уравнений, определяющей потенциалы средних сил

Потенциалы $\zeta_j(q_{\alpha_i})$ выбираются из условия наилучшего соответствия свойств изучаемой реальной системы и базисной [4], в гамильтониан которой, в отличие от [4], включается не только энергия среднего поля (1), (2), но и энергия дальнего действия. В итоге гамильтониан базисной системы примет вид

$$H_{0,U} = H_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \sum_{j(i)}^M \sum_{\alpha_i, \alpha_j} U(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}). \quad (3)$$

Здесь $U(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j})$ – потенциал кулоновского взаимодействия частиц, положения которых определяются радиус-векторами q_{α_i} и q_{α_j} .

Гамильтониану (3) с парным дальним действием частиц соответствует бинарная функция распределения [5]

$$F_2(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) = F_1(q_{\alpha_i}) F_1(q_{\alpha_j}) \exp(-\beta u(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j})), \quad (4)$$

где $F_1(q_{\alpha_i})$ – унарная функция распределения, определяемая формулой

$$F_1(q_{\alpha_i}) = \frac{c_{\alpha_i}}{Q_{\alpha_i}} \exp(-\beta P(q_{\alpha_i})), \quad (5)$$

$$Q_{\alpha_i} = \int_{\omega_i} \exp(-\beta P(q_{\alpha_i})) dq_{\alpha_i}, \quad (6)$$

ω_i – объем элементарной ячейки; β – обратная температура; $u(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j})$ – экранированный кулоновский потенциал [5; 6].

Используя функции (4), (5) и нормировку (6), будем разлагать на релевантную и возмущенную части конфигурационный интеграл Q_N исходной системы, гамильтониан H_N которой состоит из парных коротко- и дальнедействующих потенциалов:

$$H_N = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \sum_{j(i)}^M \sum_{\alpha_i, \alpha_j} (U(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) + \Phi(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j})), \quad (7)$$

где $\Phi(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j})$ – потенциал парного вандерваальсова взаимодействия.

Представим (7) в виде

$$H_N = H_{0,U} + \Delta H_{\Phi}, \quad (8)$$

где с учетом (1)–(3)

$$\Delta H_{\Phi} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \sum_{j(i)}^M \sum_{\alpha_i, \alpha_j=0}^1 \Delta \Phi(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}), \quad (9)$$

$$\Delta \Phi(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) = \Phi(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) - \zeta_j(q_{\alpha_i}) - \zeta_i(q_{\alpha_j}). \quad (10)$$

Разложим конфигурационный интеграл исходной системы по модифицированным майеровским функциям

$$s(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) = \exp(-\beta \Delta \Phi(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j})) - 1. \quad (11)$$

В силу (8)–(11) искомый интеграл запишем в форме

$$Q_N = Q_{0,U} \prod_{i=1}^M \prod_{j(i)} \prod_{\alpha_i, \alpha_j} \left\langle \left(1 + s(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) \right) \right\rangle_{U,0}. \quad (12)$$

Здесь $Q_{0,U}$ – конфигурационный интеграл базисной системы с гамильтонианом (3); $\langle \dots \rangle_{0,U}$ – усреднение по состояниям этой системы.

Учитывая в выражении (12) только линейные члены, имеем

$$Q_N = Q_{0,U} \left(1 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \sum_{j(i)} \sum_{\alpha_i, \alpha_j} \Phi_{\alpha_i, \alpha_j} \right), \quad (13)$$

где

$$\Phi_{\alpha_i, \alpha_j} = \int \int_{\omega_i, \omega_j} s(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) F_2(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) dq_{\alpha_i} dq_{\alpha_j}. \quad (14)$$

Для получения определяющих уравнений для $\zeta_j(q_{\alpha_i})$ в случае дальнего действия запишем уравнения

$$\sum_{\alpha_j=0} \int_{\omega_j} s(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) F_2(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) dq_{\alpha_j} = 0, \quad (15)$$

найденные ранее [6] для систем с короткодействием из условия экстремальности конфигурационного интеграла по отношению к вариациям одночастичных потенциалов

$$\frac{\delta Q_N}{\delta \zeta_j(q_{\alpha_i})} = 0. \quad (16)$$

Соотношение (16) указывает на экстремальность остатка в разложении (13). Условие (15) соответствует такому диаграммному разложению конфигурационного интеграла, при котором вклад всевозможных диаграмм со свободными вершинами оказывается нулевым. В случае систем с короткодействием (15) и (16) приводят к одной и той же системе уравнений для искомых величин $\zeta_j(q_{\alpha_i})$ [6].

В данной работе замкнутую систему интегральных уравнений для определения искомых потенциалов получим, подставив (11) с учетом (2), (4), (5) и (10) в условие (15). В итоге имеем

$$\begin{aligned} & \exp(-\beta \zeta_j(q_{\alpha_i})) = \\ & = \exp(\beta \Phi_j^*(q_{\alpha_i})) \sum_{\alpha_j=0}^1 \frac{c_{\alpha_j}}{Q_{\alpha_j, \omega_j}} \int \exp\left(-\beta \left(u(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) + \Phi(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) + \sum_{k \neq i, j} \zeta_k(q_{\alpha_j}) \right)\right) dq_{\alpha_j}, \end{aligned} \quad (17)$$

где

$$\exp(-\beta \Phi_j^*(q_{\alpha_i})) = \sum_{\alpha_j=0}^1 \frac{c_{\alpha_j}}{Q_{\alpha_j, \omega_j}} \int \exp\left(-\beta \left(u(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) + \sum_{k(j)} \zeta_k(q_{\alpha_j}) \right)\right) dq_{\alpha_j}. \quad (18)$$

Решение системы уравнений (17), (18) позволяет по формулам (4)–(6) рассчитать коррелятивные функции, предоставляющие возможность построить функционал свободной энергии, отвечающий заданному полю c_{α_i} .

Построение функционала свободной энергии неоднородной системы

Поскольку уравнения (17) и (18) приводят к равенству нулю второго слагаемого в соотношении (13), для Q_N в соответствии с (3) имеем

$$Q_N = Q_{0,U} = \sum_{\alpha_1} \int_{\omega_1} dq_{\alpha_1} \dots \int_{\omega_i} dq_{\alpha_i} \dots \sum_{\alpha_M} \int_{\omega_M} dq_{\alpha_M} \exp(-\beta H_{0,U}). \quad (19)$$

Выражение для искомого функционала свободной энергии

$$F = -\frac{\ln Q_N}{\beta}$$

получим, используя соотношения Гиббса – Гельмгольца

$$\frac{\partial \ln Q_N}{\partial \beta} = -\langle H_{0,U} \rangle_{0,U},$$

формулы (4)–(6) и уравнение связи между двух- и одночастичными функциями распределения

$$F_1(q_{\alpha_i}) = \frac{1}{V} \int F_2(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) dq_{\alpha_j}. \quad (20)$$

Для этого продифференцируем (19) по обратной температуре β и, привлекая (20), запишем результат в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln Q_N}{\partial \beta} = & -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \sum_{j(i)}^M \sum_{\alpha_i, \alpha_j} \int_{\omega_i} \int_{\omega_j} U(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) F_2(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) dq_{\alpha_i} dq_{\alpha_j} + \\ & + \sum_{i=1}^M \sum_{\alpha_i=0}^1 \int_{\omega_i} \int_{\omega_j} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(-\beta \sum_{k(i)} \zeta_k(q_{\alpha_i}) \right) F_1(q_{\alpha_i}) dq_{\alpha_i}. \end{aligned} \quad (21)$$

Обозначим среднюю энергию кулоновского взаимодействия частиц, распределенных в двух ячейках, как

$$V_{\alpha_i, \alpha_j} = \int_{\omega_i} \int_{\omega_j} U(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) F_2(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) dq_{\alpha_i} dq_{\alpha_j}. \quad (22)$$

В результате выражение (21) с учетом (5), (6) примет вид

$$\frac{\partial \ln Q_N}{\partial \beta} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \sum_{j(i)}^M \sum_{\alpha_i, \alpha_j} V_{\alpha_i, \alpha_j} + \sum_{i=1}^M \sum_{\alpha_i} c_{\alpha_i} \frac{\partial \ln Q_{\alpha_i}}{\partial \beta}. \quad (23)$$

Интегрируя (23) по обратной температуре от нуля до β и учитывая, что $\beta = 0$, согласно (19) и (6)

$$\ln Q_N|_{\beta=0} = \sum_{i=1}^M \sum_{\alpha_i=0}^1 c_{\alpha_i} \ln \left(\frac{\omega_{\alpha_i}}{c_{\alpha_i}} \right), \quad (24)$$

находим выражение для свободной энергии F с учетом (22)–(24):

$$\beta F = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \sum_{j(i)}^M \sum_{\alpha_i, \alpha_j=0}^1 \int_0^{\beta} V_{\alpha_i, \alpha_j} d\beta - \sum_{i=1}^M \sum_{\alpha_i=0}^1 c_{\alpha_i} \ln \left(\frac{Q_{\alpha_i}}{c_{\alpha_i}} \right). \quad (25)$$

Полученные общие соотношения и уравнения применим для описания свойств твердотельного электролита в решеточном приближении.

Уравнения для потенциалов и свободная энергия неоднородной системы в решеточном приближении

При малых колебаниях частиц относительно узлов решетки можно перейти к решеточному приближению, оставляя вклады только от состояний, когда частицы сосредоточены в узлах решетки. Это упрощение позволяет ввести сокращение обозначений в величинах, входящих в (17)–(22), ограничившись указанием номеров узлов и сортов частиц, занимающих эти узлы, т. е. все функции координат можно заменить их значениями в центрах соответствующих ячеек (узлов). Соответственно, далее используем следующие обозначения:

$$W_{\alpha_i, \alpha_j} = \exp(-\beta \Phi(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j})) = \exp(-\beta \Phi(\alpha_i, \alpha_j)), \quad (26)$$

$$G_{\alpha_i, \alpha_j} = \exp(-\beta u(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j})) = \exp(-\beta u(\alpha_i, \alpha_j)), \quad (27)$$

$$f_{j, \alpha_i} = \exp(-\beta \zeta_j(q_{\alpha_i})) = \exp(-\beta \zeta_j(\alpha_i)). \quad (28)$$

В результате интегральные уравнения (17), (18) с учетом (26)–(28) переходят в систему алгебраических уравнений для f_{j, α_i} :

$$f_{j, \alpha_i} f_{j, \alpha_i}^* = \sum_{\alpha_j=0}^1 \frac{c_{\alpha_j} W_{\alpha_i, \alpha_j} G_{\alpha_i, \alpha_j}}{f_{i, \alpha_j}}, \quad (29)$$

$$f_{j, \alpha_i}^* = \sum_{\alpha_j=0}^1 c_{\alpha_j} G_{\alpha_i, \alpha_j}. \quad (30)$$

Значения f_{j, α_i} , найденные из (29) и (30), позволяют рассчитать все величины, входящие в функционал свободной энергии (27). Так, для нормировочного фактора (6) в силу (28) получим

$$Q_{\alpha_i} = \omega_i \prod_{j(i)} f_{j, \alpha_i}. \quad (31)$$

Соответственно, бинарная функция (4), используемая для расчета V_{α_i, α_j} по формуле (22), с учетом (31) запишется как

$$F_2(\alpha_i, \alpha_j) = c_{\alpha_i} c_{\alpha_j} G_{\alpha_i, \alpha_j}. \quad (32)$$

Экранированный кулоновский потенциал, входящий в (27), выберем в виде [8]

$$\beta u(\alpha_i, \alpha_j) = \alpha_i \alpha_j \frac{r_b}{r_{ij}} \exp(-v r_{ij}), \quad (33)$$

где

$$v = v^* \sqrt{\beta}, \quad v^* = \frac{r}{H} \sqrt{\pi c (1-c) \frac{r_b}{\beta H}}, \quad (34)$$

$$r_b = \frac{\beta e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon}. \quad (35)$$

В соотношениях (33)–(35) r_{ij} – расстояние между узлами i и j ; H – параметр решетки; e – заряд электрона; ϵ_0 и ϵ – диэлектрическая постоянная и проницаемость среды. Далее для величин, относящихся к реальным частицам, будем указывать только номера узлов решетки.

Для вычисления средней энергии (22) используем в качестве дальнедействующего кулоновский потенциал

$$U(q_{\alpha_i}, q_{\alpha_j}) = \alpha_i \alpha_j U_{ij}, \quad U_{ij} = \frac{r_b}{\beta r_{ij}}. \quad (36)$$

Выражения (32) и (36) подставим в (22) и получим

$$V_{\alpha_i, \alpha_j} = \alpha_i \alpha_j c_i c_j U_{ij} G_{ij}. \quad (37)$$

С учетом (36) и (37) перепишем интеграл, входящий в (22), в форме

$$V_{ij}^\beta = c_i c_j U_{ij} \int_0^\beta G_{ij} d\beta. \quad (38)$$

Для расчета интеграла (38) в функции (27) используем корреляционную составляющую

$$h_{ij} = G_{ij} - 1. \quad (39)$$

Это позволяет представить искомый функционал свободной энергии (25) в виде трех слагаемых:

$$F = F_0 + F_{nc} + F_c. \quad (40)$$

В соответствии с (39) и (40) вклад короткодействующего взаимодействия:

$$F_0 = -\theta \sum_{i=1}^M \sum_{\alpha_i=0}^1 c_{\alpha_i} \ln(c_{\alpha_i} Q_{\alpha_i}), \quad \theta = \frac{1}{\beta}; \quad (41)$$

вклад некоррелированного кулоновского взаимодействия катионов между собой:

$$F_{nc} = \frac{\theta r_b}{2} \sum_{i=1}^M \sum_{j(i)}^M \frac{c_i c_j}{r_{ij}}; \quad (42)$$

вклад коррелированного кулоновского взаимодействия между катионами:

$$F_c = \frac{\theta}{2} \sum_{i=1}^M \sum_{j(i)}^M c_i c_j h_{ij}^\beta, \quad (43)$$

$$h_{ij}^\beta = \frac{r_\beta}{\beta r_{ij}} \int_0^\beta h_{ij} d\beta. \quad (44)$$

Поскольку вклад коррелированного кулоновского взаимодействия (43) выражается через короткодействующую корреляционную функцию (44), суммирование в (43) будем выполнять по узлам, расположенным в трех координационных сферах, окружающих узел i , тогда как суммирование в (42) из-за кулоновского дальнего действия должно осуществляться по всем узлам решетки.

Выражения (41)–(44), определяющие функционал свободной энергии (40), используются далее для вычисления локального химического потенциала катионов и распределения поля концентрации катионов в слабом однородном электрическом поле.

Построение системы уравнений для определения распределения концентрации подвижных ионов и электрического потенциала в диффузионной области электролита

Проведем расчеты в случае, когда дополнительный вклад ΔF внешнего однородного электрического поля в свободную энергию носит аддитивный характер:

$$\Delta F = \theta \sum_{i=1} c_i \psi_i^{\text{ext}}, \quad \psi_i^{\text{ext}} = E z_i, \quad E = \text{const}, \quad (45)$$

где ψ_i^{ext} , E – безразмерные потенциал и напряженность электрического поля; z_i – координата узла i по оси z , расположенной перпендикулярно пластине. Соответственно, неоднородность распределения концентрации и электрического потенциала будет характеризоваться функциями, зависящими только от этой координаты. Аналогично [7] в рассматриваемом случае слабого поля можно не учитывать зависимость h_{ij}^β от концентрации.

Выполняя при этих условиях варьирование (40) по отклонению поля концентрации от однородного, приходим к представлению локального химического потенциала в виде

$$\mu_i = \frac{\partial F}{\partial c_i} = \mu_i^0 + \mu_i^{nc} + \mu_i^c - \theta E z_i, \quad (46)$$

где

$$\mu_i^0 = \theta \ln \frac{c_i}{1 - c_i} + \mu_i^{sh}; \quad (47)$$

$$\mu_i^{nc} = \theta r_b \sum_{j(i)}^M \frac{c_j}{r_{ij}}; \quad (48)$$

$$\mu_i^c = \theta \sum_{j(i)}^{Z_3} h_{ij}^\beta c_j. \quad (49)$$

Входящая в (47) величина μ_i^{sh} , как следует из (41), определяется выражением

$$\mu_i^{sh} = \frac{\partial}{\partial c_i} \left(\sum_{i=1}^M \sum_{\alpha_i=0}^1 c_{\alpha_i} \ln Q_{\alpha_i} \right), \quad (50)$$

которое в решеточном приближении можно представить в виде [4]

$$\mu_i^{sh} = J \sum_{j(i)}^{Z_1} c_j, \quad J < 0, \quad (51)$$

где Z_1 – число ближайших соседей; J – параметр, характеризующий величину средней энергии короткодействия. Величина Z_1 в (51) означает, что суммирование ведется по узлам, образующим первую координационную сферу, а Z_3 в (49) – суммирование по узлам, принадлежащим всем трем координационным сферам, окружающим избранную ячейку i .

В силу электронейтральности в области однородного распределения концентраций электрические составляющие некоррелированной части дальнего действия компенсируются, поэтому выражение для значения химического потенциала μ_b в объемной фазе с учетом (47) и (51) имеет вид

$$\mu_b = \ln\left(\frac{c}{1-c}\right) + Z_1 c J + c \sum_{j(i)}^{Z_3} h_{ij}^\beta. \quad (52)$$

Систему уравнений для расчета значений c_i найдем из условия равенства всех μ_i величине химического потенциала μ_b в объемной фазе. Приравнявая (46) и (52), с учетом (47)–(49) получим

$$\delta\mu_i^0 + \delta\mu_i^{nc} + \delta\mu_i^c - Ez_i = 0, \quad (53)$$

где

$$\delta\mu_i^0 = \theta \ln \frac{c_i(1-c)}{(1-c_i)c} + J \sum_{j(i)}^{Z_1} \delta c_j; \quad (54)$$

$$\delta\mu_i^{nc} = \theta r_b \sum_{j(i)}^M \frac{\delta c_j}{r_{ij}}; \quad (55)$$

$$\delta\mu_i^c = \theta \sum_{j(i)}^{Z_3} h_{ij}^\beta \delta c_j. \quad (56)$$

Здесь $\delta c_j = c_j - c$ есть отклонение локальной концентрации от ее значения в объемной фазе.

Уравнения (53)–(56) образуют систему уравнений относительно неизвестных δc_j . Для замыкания этой системы вычислим с учетом (27) и (39) соответствующее значение (44). После разложения экспоненты линейное приближение дает

$$h_{ij}^\beta = -\frac{r_\beta}{\beta r_{ij}} \int_0^\beta \beta u_{ij} d\beta. \quad (57)$$

Используя (33) и (35), из (57) получим

$$h_{ij}^\beta = -\frac{r_\beta^2}{\beta^2 r_{ij}^2} I_\beta, \quad I_\beta = \int_0^\beta x \exp(-v^* r_{ij} \sqrt{x}) dx, \quad (58)$$

а вычислив последний интеграл, имеем

$$I_\beta = \frac{2\beta^2 \left(6 - \exp(-vr_{ij}) \left(6 + 6vr_{ij} + 3(vr_{ij})^2 + (vr_{ij})^3 \right) \right)}{(vr_{ij})^4}. \quad (59)$$

После разложения экспоненты в ряд равенство (59) примет вид

$$I_\beta = \frac{\beta^2}{2} \left(1 - \frac{4vr_{ij}}{5} + \frac{v^2 r_{ij}^2}{3} + \dots \right). \quad (60)$$

Выражение (60) указывает на отсутствие расходимости при малых значениях v , что позволяет применить (59) для вычисления корреляционной функции (58) при любых v . В итоге

$$h_{ij}^\beta = -\frac{r_\beta^2}{\beta^2 r_{ij}^2} I_\beta = -\frac{2r_\beta^2 \left(6 - \exp(-vr_{ij}) \left(6 + 6vr_{ij} + 3(vr_{ij})^2 + (vr_{ij})^3 \right) \right)}{r_{ij}^2 (vr_{ij})^4}. \quad (61)$$

Выражение (61) используется для решения линеаризованной системы (53)–(56).

Переход от дискретных полей концентраций зарядов и потенциала к линеаризованному континуальному описанию

Рассмотрим систему (53)–(56) при плавном изменении концентрации, когда δc_j можно разложить в ряд по отношению к c_i и ограничиться первыми членами такого разложения:

$$\delta c_j = \delta c_i + r_{ij} \nabla \delta c_i + \frac{1}{2} (r_{ij} \nabla)^2 \delta c_i. \quad (62)$$

Соотношение (62) позволяет преобразовать систему (53)–(56) в дифференциальное уравнение. Так, после разложения логарифма с учетом (62) выражение (54) в случае простой кубической решетки примет вид

$$\delta \mu_i^0 = \gamma_T \delta c_i + 3H^2 J \Delta \delta c_i, \quad (63)$$

$$\gamma_T = \frac{\partial \mu}{\partial c} = \frac{1}{c(1-c)} + 6J > 0. \quad (64)$$

Параметр γ_T , определяемый соотношением (64), имеет смысл сжимаемости и положителен в состоянии термодинамического равновесия.

Ранее было показано [7], что некоррелированная составляющая химического потенциала $\delta \mu_i^{nc}$ имеет смысл электрического потенциала ψ ($\psi = \delta \mu_i^{nc}$) и удовлетворяет уравнению Пуассона

$$H^2 \nabla^2 \psi = -n \delta c(z), \quad (65)$$

где

$$n = \frac{\beta e^2}{\epsilon \epsilon_0 H}. \quad (66)$$

Поскольку корреляционная функция (61) зависит только от расстояния r_{ij} между парами узлов, выражение (56) для коррелированной составляющей химического потенциала можно представить в виде трех слагаемых для трех координационных сфер:

$$\delta \mu_i^c = h_1 \sum_{j(i)}^{Z_1} \delta c_j + h_2 \sum_{j(i)=Z_1}^{Z_2} \delta c_j + h_3 \sum_{j(i)=Z_2}^{Z_3} \delta c_j, \quad (67)$$

где h_1, h_2, h_3 – значения функции (61) на расстояниях r_{ij} , равных радиусам соответствующих координационных сфер.

Выполнив суммирование в (67), с учетом разложения (62) получим

$$\delta \mu^c = -\mu_{1c} \delta c - \mu_{2c} \Delta \delta c. \quad (68)$$

Коэффициенты в соотношении (68) для случая простой кубической решетки равны соответственно

$$\mu_{1c} = -(6h_1 + 8h_2 + 8h_3), \quad (69)$$

$$\mu_{2c} = -H^2 (h_1 + 2h_2 + 4h_3). \quad (70)$$

Значения коэффициентов в (69) и (70) рассчитаны с учетом зависимости концентрации только от координаты z .

Полученные выражения (63) и (68) подставим в уравнение равновесия (53). В итоге получим

$$(\gamma_T - \mu_{1c}) \delta c + \psi - (\mu_{2c} - 3H^2 J) \nabla^2 \delta c - Ez = 0. \quad (71)$$

Здесь в отличие от [4] рассматривается случай $J < 0$, соответствующий притяжению первых соседей. Остальные величины, входящие в (71), больше нуля.

Подставляя (65) с учетом (66) в уравнение (71) и переходя к линейным размерам в единицах параметра решетки, приходим к линейному дифференциальному уравнению четвертого порядка относительно потенциала ψ внутреннего поля, создаваемого катионами:

$$\Delta^2 \psi - 2a \Delta \psi + b \psi = bEz, \quad (72)$$

$$a = \frac{\gamma_T - \mu_{1c}}{2(\mu_{2c} - 3J)}, \quad b = \frac{n}{\mu_{2c} - 3J}.$$

Корни характеристического уравнения для (72) имеют вид

$$k^2 = a \pm \sqrt{a^2 - b}. \quad (73)$$

Действительным значениям корней (73) соответствует аperiодическое затухание электропотенциала вглубь объемной фазы. Но при $a^2 < b$ корни становятся комплексными, что порождает осциллирующее затухание потенциала ψ по мере удаления от поверхности электрода. В этом случае решение уравнения (72) с учетом граничных условий задачи есть

$$\psi = C \exp(-k_1 z) \sin(k_2 z) + Ez, \\ k_1 = \sqrt{b} \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right); k_2 = \sqrt{b} \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right), \varphi = \arctg\left(\frac{\sqrt{b - a^2}}{a}\right). \quad (74)$$

Из (74) и (45) видно, что итоговый потенциал, создаваемый внутренними и расположенными на пластине зарядами, определяется формулой

$$\psi_{\Sigma} = \psi + \psi^{\text{ext}} = C \exp(-k_1 z) \sin(k_2 z). \quad (75)$$

Зависимость, аналогичная (75), была получена в [8; 9] при описании проникновения поверхностного электропотенциала в диффузионный слой ионной жидкости. Теория [8; 9] была распространена на описание систем, межмолекулярное взаимодействие в которых носит конкурирующий характер с притяжением на малых и отталкиванием на больших расстояниях.

Заключение

Разработана процедура статистико-механического описания твердотельной системы, взаимодействие частиц в которой описывается как коротко-, так и дальнедействующим потенциалом. Для этого использовано разложение конфигурационного интеграла системы по обобщенным майеровским функциям, включающим в себя (помимо короткодействующего потенциала) потенциалы средних сил. В базисное распределение включено дальнедействие на фоне среднего поля, создаваемого потенциалами средних сил. Характеристики базисной системы определены с помощью результатов метода коллективных переменных.

Теория использована для описывающих керамические материалы моделей, в которых рассматривается подвижность катионов в поле неподвижных анионов, обеспечивающих компенсацию электрического заряда. Вычислены свободная энергия и химический потенциал системы с учетом неоднородного распределения катионов по ее объему. Установлено равновесное распределение заряда при наложении малого электрического поля, когда возможно представление исходной системы уравнений линейным дифференциальным уравнением четвертого порядка.

Показано, что в данных системах (при определенных в работе условиях) корни уравнений становятся комплексными, что порождает осциллирующее затухание отклонения концентрации подвижных ионов от ее значения в объеме.

Библиографические ссылки

1. Fergus J, Hui R, Li X, Wilkinson DP, Zhang J, editors. *Solid oxide fuel cells: materials properties and performance*. London: CRC Press; 2009. 296 p.
2. Narkevich II. Statistical theory of nonuniform systems and reduced description in the density fluctuation theory. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 1982;112(1–2):167–192. DOI: 10.1016/0378-4371(82)90213-8.
3. Наркевич ИИ. Метод множителей Лагранжа в проблеме нормировки коррелятивных функций многокомпонентного кристалла с вакансиями. *Высокочистые вещества*. 1990;1:67–75.
4. Бокун ГС, ди Каприо Д. Распределение потенциала и концентрации носителей зарядов в твердотельном электролите между плоскими электродами. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2018;2:71–80.
5. Юхновский ИР, Головки МФ. *Статистическая теория классических равновесных систем*. Киев: Наукова думка; 1980. 372 с.
6. Bokun GS, Holovko MF. Cluster expansion for description of condensed state: crystalline cell approach. *Condensed Matter Physics*. 2018;21(4):43501. DOI: 10.5488/CMP.21.43501.
7. Bokun G, Vikhrenko V, di Caprio D, Holovko M. Chemical potential distribution of nonhomogeneous solid electrolyte. In: Pogrebnjak AD, editor. *Nanomaterials: Applications and Properties. Proceedings of the 2017 IEEE 7th International conference; 2017 September 10–15; Zatoka, Ukraine. Part 3*. Sumy: Sumy State University; 2017. p. 03NE16-1–03NE16-4. DOI: 10.1109/NAP.2017.8190247.
8. Ciach A, Gozdz WT. Mesoscopic description of network-forming clusters of weakly charged colloids. *Condensed Matter Physics*. 2010;13(2):23603.
9. Ciach A. Simple theory for oscillatory charge profile in ionic liquids near a charged wall. *Journal of Molecular Liquids*. 2018; 270:138. DOI: 10.1016/j.molliq.2017.10.002.

References

1. Fergus J, Hui R, Li X, Wilkinson DP, Zhang J, editors. Solid oxide fuel cells: materials properties and performance. London: CRC Press; 2009. 296 p.
2. Narkevich II. Statistical theory of nonuniform systems and reduced description in the density fluctuation theory. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 1982;112(1–2):167–192. DOI: 10.1016/0378-4371(82)90213-8.
3. Narkevich II. [The method of Lagrange multipliers in the problem of normalizing the correlation functions of a multicomponent crystal with vacancies]. *Vysokochistye veshchestva*. 1990;1:67–75. Russian.
4. Bokun GS, di Caprio D. Potential and charge-carrier concentration distributions in solid electrolyte between flat electrodes. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2018;2:71–80. Russian.
5. Yukhnovskiy IR, Holovko MF. *Statisticheskaya teoriya klassicheskikh ravnovesnykh sistem* [Statistical theory of classical equilibrium systems]. Kiev: Naukova dumka; 1980. 372 p. Russian.
6. Bokun GS, Holovko MF. *Cluster expansion for description of condensed state: crystalline cell approach*. *Condensed Matter Physics*. 2018;21(4):43501. DOI: 10.5488/CMP.21.43501.
7. Bokun G, Vikhrenko V, di Caprio D, Holovko M. Chemical potential distribution of nonhomogeneous solid electrolyte. In: Pogrebnyak AD, editor. *Nanomaterials: Applications and Properties. Proceedings of the 2017 IEEE 7th International conference; 2017 September 10–15; Zatoka, Ukraine. Part 3*. Sumy: Sumy State University; 2017. p. 03NE16-1–03NE16-4. DOI: 10.1109/NAP.2017.8190247.
8. Ciach A, Gozdz WT. Mesoscopic description of network-forming clusters of weakly charged colloids. *Condensed Matter Physics*. 2010;13(2):23603.
9. Ciach A. Simple theory for oscillatory charge profile in ionic liquids near a charged wall. *Journal of Molecular Liquids*. 2018; 270:138. DOI: 10.1016/j.molliq.2017.10.002.

Статья поступила в редколлегию 05.02.2019.
Received by editorial board 05.02.2019.

УДК 530.19

РЕШЕТОЧНЫЙ ФЛЮИД С ПРИТЯЖЕНИЕМ БЛИЖАЙШИХ И ОТТАЛКИВАНИЕМ ТРЕТЬИХ СОСЕДЕЙ НА ПРОСТОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

Я. Г. ГРОДА¹⁾, В. С. ВИХРЕНКО¹⁾, Д. ДИ КАПРИО²⁾

¹⁾Белорусский государственный технологический университет,
ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск, Беларусь

²⁾Национальная высшая школа химии Парижа,
ул. Пьера и Марии Кюри, 11, 75005, г. Париж, Франция

Исследован решеточный флюид с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на простой кубической решетке. Показано, что конкурирующие взаимодействия приводят к фазовым переходам типа порядок – беспорядок. Для локализации точек фазовых переходов второго рода введен геометрический параметр порядка, с его помощью установлено критическое значение параметра взаимодействия и построена фазовая диаграмма системы. Для аналитической оценки равновесных параметров системы предложено аналитическое квазихимическое приближение. Химический потенциал, термодинамический фактор и корреляционные функции определены как в рамках развитого приближенного подхода, так и в результате моделирования решеточной системы по методу Монте-Карло. Полученная зависимость термодинамического фактора системы от концентрации свидетельствует о сильном подавлении флуктуаций, характерном для упорядоченного состояния. В свою очередь, сложный характер зависимости корреляционных функций, отражающих структурные особенности системы, от концентрации демонстрирует большое значение конкурирующих взаимодействий. Предложенный аналитический подход позволяет правильно описать качественные особенности структурных свойств систем с конкурирующими взаимодействиями и может быть использован для количественной оценки термодинамических характеристик этих систем.

Ключевые слова: решеточный флюид; простая кубическая решетка; конкурирующие взаимодействия; SALR-потенциал; параметр порядка; алгоритм Монте-Карло; критический параметр; фазовая диаграмма; квазихимическое приближение.

Благодарность. Исследования выполнены при грантовой поддержке научной программы Евросоюза «Горизонт-2020» (проект AMD-734276-CONIN), а также Института ядерных проблем Белорусского государственного университета (договор № 209/103) и Министерства образования Республики Беларусь.

Образец цитирования:

Грода ЯГ, Вихренко ВС, ди Каприо Д. Решеточный флюид с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на простой кубической решетке. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2019;2:84–95.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-84-95>

For citation:

Groda YaG, Vikhrenko VS, di Caprio D. Lattice fluid with attractive interaction between nearest neighbors and repulsive interaction between next-next-nearest neighbors on simple cubic lattice. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2019;2:84–95. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-84-95>

Авторы:

Ярослав Геннадьевич Грода – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры механики и конструирования факультета химической технологии и техники.
Вячеслав Степанович Вихренко – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры механики и конструирования факультета химической технологии и техники.
Дунг ди Каприо – доктор наук (физика); научный сотрудник.

Authors:

Yaroslav G. Groda, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of mechanics and engineering, faculty of chemical technology and engineering.
yar.groda@gmail.com
Vyacheslav S. Vikhrenko, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of mechanics and engineering, faculty of chemical technology and engineering.
vvikhre@gmail.com
Dung di Caprio, PhD (physics); researcher.
dung.di-caprio@chimie-paristech.fr
<https://orcid.org/0000-0001-6239-7427>

LATTICE FLUID WITH ATTRACTIVE INTERACTION BETWEEN NEAREST NEIGHBORS AND REPULSIVE INTERACTION BETWEEN NEXT-NEXT-NEAREST NEIGHBORS ON SIMPLE CUBIC LATTICE

Ya. G. GRODA^a, V. S. VIKHRENKO^a, D. DI CAPRIO^b

^aBelarusian State Technological University, 13a Sviardlova Street, Minsk 220006, Belarus

^bNational Graduate School of Chemistry, 11 Pierre and Marie Curie Street, Paris 75005, France

Corresponding author: Ya. G. Groda (yar.groda@gmail.com)

The lattice system with competing interactions (attractive between nearest neighbors and repulsive between next-next-nearest neighbors) on a simple cubic lattice is studied. It is shown that the competing interactions lead to the order-disorder phase transitions. The geometric order parameter for localizing the second-order phase transition points is introduced. With its help the critical value of the interaction parameter was established, and the phase diagram of the system was constructed. An analytical quasi-chemical (QChA) approximation for evaluation of the equilibrium parameters of the system is proposed. The chemical potential, the thermodynamic factor, and the correlation functions are determined both within the framework of the developed approximate approach and as a result of the Monte Carlo simulation of the lattice system. The obtained dependence of the thermodynamic factor of the system on concentration indicates a strong suppression of fluctuations, characteristic for an ordered state. In turn, the complex nature of the concentration dependence of the correlation functions reflecting the structural features of the system demonstrates the important contribution of competing interactions. The proposed analytical approach allows one to correctly describe the qualitative features of the structural properties of systems with competing interactions and can be used to quantify the thermodynamic characteristics of these systems.

Keywords: lattice fluid; simple cubic lattice; competing interaction; SALR-potential; order parameter; Monte Carlo simulation; critical parameter; phase diagram; quasi-chemical approximation.

Acknowledgements. The project has received funding from European Union's Horizon-2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No. 734276, Institute for Nuclear Problems of Belarusian State University (agreement No. 209/103) and the Ministry of Education of the Republic of Belarus.

Введение

В настоящее время наблюдается большой интерес к изучению процессов самоорганизации и самосборки в наноразмерных системах. Элементами таких систем являются супрамолекулярные образования с достаточно большой молекулярной массой, что приводит к малым скоростям их теплового движения и большим по молекулярным масштабам характерным временам процессов внутри этих систем. В то же время взаимодействие между элементами очень сложно, и, несмотря на их довольно большие размеры, его величина имеет тот же порядок, что и тепловая энергия. Это обуславливает большое разнообразие возможностей для различных фазовых переходов в таких системах при комнатной температуре. Примерами описанных систем являются растворы белковых молекул [1], глины и почвенные суспензии [2], экосистемы [3] и т. д.

В целом динамика частиц рассматриваемых систем состоит в том, что на близких расстояниях друг от друга они притягиваются за счет, например, вандерваальсова взаимодействия, а на более далеких происходит экранированное электростатическое отталкивание (так называемые SALR-системы: Short-range Attractive and Long-range Repulsive) [4; 5]. В случае биологических молекул отталкивание может быть также обусловлено упругими деформациями липидных мембран. В любом случае притяжение между структурными элементами системы обеспечивает разделение фаз, а отталкивание – формирование кластеров в ней.

Одним из наиболее простых методов исследования общих свойств SALR-систем является рассмотрение их решеточных моделей, которые, с одной стороны, достаточно просты, что позволяет провести детальное исследование как аналитическими методами, так и в рамках компьютерного моделирования по методу Монте-Карло, а с другой стороны, дают возможность получить описание большого числа общих свойств таких систем.

Например, в работах [6; 7] рассмотрен решеточный флюид с притяжением ближайших соседей и отталкиванием третьих на плоской треугольной решетке. Исследованы возможные конфигурации ансамбля частиц флюида при $T = 0$, предложено приближение среднего поля, в рамках которого построена фазовая диаграмма системы. В дальнейшем методами компьютерного моделирования выявлено существование

в системе кластерных и двух ламеллярных фаз. В частности, установлено, что при определении критической температуры T_c системы с $\frac{J_3}{|J_1|} = 3$ (J_1 и J_3 – энергии взаимодействия первых и третьих соседей соответственно) ее критический параметр равен $\frac{|J_1|}{k_B T_c} = 1,05$ (k_B – постоянная Больцмана). Полученное значение менее чем на 5 % отличается от критического параметра решеточного флюида со взаимодействием ближайших соседей на плоской треугольной решетке.

В работах [8; 9] рассмотрена аналогичная модель решеточного флюида с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на плоской квадратной решетке. Моделирование системы по методу Монте-Карло показало наличие в ней при низких температурах упорядоченных фаз двух типов. Для описания обоих типов исходная решетка была разделена на систему восьми идентичных подрешеток и введен геометрический параметр порядка δc , определяющий разность концентраций на преимущественно заполненных и преимущественно вакантных подрешетках. С помощью указанного параметра найден критический параметр системы, который оказался равным $\frac{|J_1|}{k_B T_c} = 0,655 \pm 0,005$. Параметр порядка был учтен при построении аналитического квазихимического приближения (КХП), позволяющего определять термодинамические и структурные свойства модели во всей области изменения термодинамических параметров, за исключением ближайших окрестностей точек фазовых переходов. Сопоставление результатов КХП и данных моделирования показало, что с помощью развитого аналитического подхода можно получать адекватные полуколичественные результаты для любых термодинамических характеристик модели во всей области изменения термодинамических параметров.

В данной работе представлено дальнейшее развитие предлагаемых подходов для исследования равновесных свойств решеточного флюида с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на простой кубической решетке.

Модель и алгоритм моделирования

Рассматриваемая в работе модель представляет собой решеточный флюид из n частиц на простой кубической решетке, содержащей N решеточных узлов. Частицы, занимающие ближайшие решеточные узлы и узлы, являющиеся соседями третьего порядка, взаимодействуют друг с другом. Энергии взаимодействий равны J_1 и J_3 соответственно. При этом полагается, что $J_1 < 0$, $J_3 > 0$, т. е. имеет место притяжение ближайших соседей и отталкивание третьих.

Моделирование равновесных характеристик рассматриваемой решеточной системы по методу Монте-Карло может быть выполнено в большом каноническом ансамбле в рамках стандартного алгоритма Метрополиса [10]. В этом случае фиксируется значение химического потенциала μ и энергий взаимодействия J_1 и J_3 , а концентрация c частиц на решетке и их распределение определяются непосредственно в ходе моделирования.

В рамках данного алгоритма первоначально рассматривается произвольное распределение некоторого числа частиц по решетке, содержащей $N = L^d$ узлов (L – линейный размер решетки; d – размерность пространства, $d = 3$ в рассматриваемом случае). Затем произвольным образом выбирается узел решетки. Если этот узел занят частицей, то эта частица изымается, если же он вакантен, то частица добавляется, и определяется изменение энергии δE_N :

$$\delta E_N = \pm(J_1 s_1 + J_3 s_3 - \mu), \quad s_1 \leq z_1, \quad s_3 \leq z_3,$$

где знак «плюс» соответствует добавлению частицы, «минус» – изъятию; μ – химический потенциал системы; s_1 и s_3 – число частиц, занимающих ближайшие решеточные узлы и узлы, являющиеся соседями третьего порядка, соответственно; z_1 и z_3 – число ближайших решеточных узлов и узлов-соседей третьего порядка соответственно.

Если $\delta E_N \leq 0$, то новая конфигурация принимается, если $\delta E_N > 0$, то она принимается с вероятностью

$$W = \exp(-\beta \delta E_N), \quad \beta = (k_B T)^{-1}.$$

Для этого случайным образом генерируется число W_0 из интервала $[0; 1]$, и если $W \geq W_0$, то новая конфигурация принимается. В противном случае новая конфигурация отвергается и система возвращается в прежнее состояние. Повторение описанной процедуры n раз, где n – число частиц на решетке, формирует один шаг алгоритма Монте-Карло (МКШ).

Поскольку первоначальное состояние моделируемой системы является произвольным и может существенно отличаться от равновесного, для перехода системы в состояние термодинамического равновесия требуется некоторое число МКШ. При определении средних значений термодинамических величин эти начальные шаги не учитываются. В частности, при моделировании решеточного флюида с SALR-потенциалом на кубической решетке использовалась система, содержащая 13 824 (24^3) решеточных узлов в сочетании с периодическими граничными условиями. Полная длина процедуры моделирования состояла из 70 000 МКШ. При этом первые 20 000 МКШ отводились на процесс эквilibризации и не учитывались при дальнейшем усреднении.

По аналогии с работами [6–9] принималось, что $J_1 = -J$ и $J_3 = 3J$, где J – энергетический параметр, определяющий интенсивность взаимодействий в системе. При этом в силу геометрии рассматриваемой решеточной системы $z_1 = 6$ и $z_3 = 8$.

Параметр порядка модели

Предварительное моделирование на решетке, содержащей 1728 (12^3) решеточных узлов, показало, что при достаточно низких температурах и, соответственно, высоких значениях параметра взаимодействия $\frac{J}{k_B T}$, где T – абсолютная температура модели, в системе образуется упорядоченная фаза, вид которой представлен на рис. 1.

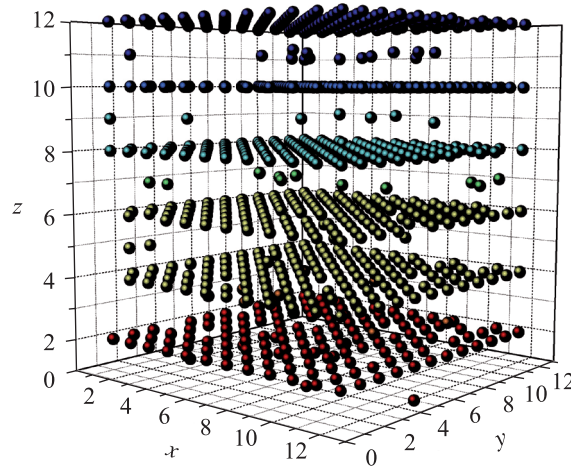


Рис. 1. Упорядоченная фаза решеточного флюида с притяжением ближайших соседей и отталкиванием третьих на простой кубической решетке при $\mu = 9J$ ($c = 0,5$) и $\frac{J}{k_B T} = 0,25$

Fig. 1. The ordered phase of lattice fluid with attractive interaction between nearest neighbors and repulsive interaction between next-next-nearest neighbors on simple cubic lattice at $\mu = 9J$ ($c = 0.5$) and $\frac{J}{k_B T} = 0.25$

Для описания упорядоченной фазы может быть предложено разбиение исходной кубической решетки на систему восьми идентичных кубических подрешеток с постоянной $2a$, где a – решеточная постоянная исходной решетки. Также можно отметить, что при таком разбиении каждый узел элементарной ячейки исходной решетки принадлежит отдельной подрешетке.

В случае полной упорядоченности системы при концентрации решеточного флюида, равной 0,5, четыре подрешетки оказываются полностью заполненными (p -подрешетки) и четыре – полностью вакантными (v -подрешетки). Это позволяет определить параметр порядка системы δc в ходе моделирования как полуразность максимальной (c_p^{\max}) и минимальной (c_v^{\min}) концентраций на подрешетках:

$$\delta c = \frac{c_p^{\max} - c_v^{\min}}{2}.$$

Введенный параметр порядка характеризует степень упорядоченности системы и обращается в нуль в неупорядоченном состоянии. Средняя концентрация c частиц на решетке и концентрации c_p и c_v частиц на p - и v -подрешетках соответственно связаны друг с другом соотношениями

$$\begin{aligned}
 c_p &= c_1^p = c + \delta c, \quad c_0^p = 1 - c_1^p = 1 - c - \delta c, \\
 c_v &= c_1^v = c - \delta c, \quad c_0^v = 1 - c_1^v = 1 - c + \delta c, \\
 c &= c_1 = \frac{n}{N} = \frac{c_1^p + c_1^v}{2}, \quad c_0 = 1 - c.
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

Здесь индексы 1 и 0 относятся к частицам и вакансиям соответственно.

Моделирование методом Монте-Карло показало, что при химическом потенциале $\mu = 9J$ (соответствует средней концентрации $c = 0,5$) параметр порядка является возрастающей функцией безразмерного параметра взаимодействия (рис. 2).

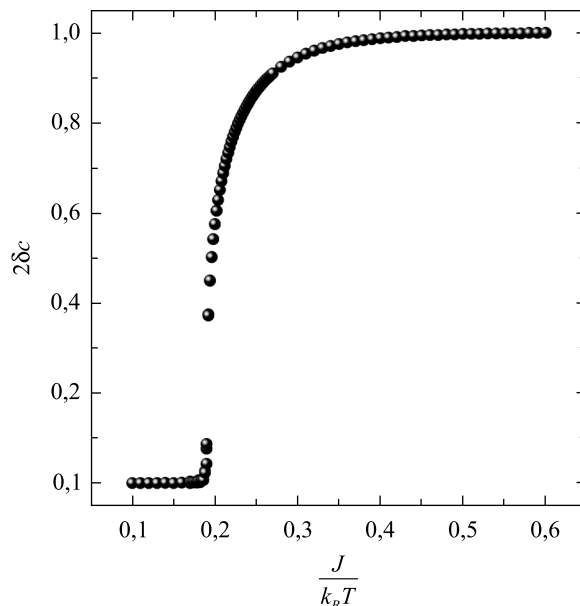


Рис. 2. Зависимость параметра порядка от параметра взаимодействия при $\mu = 9J$

Fig. 2. The order parameter versus the interaction parameter at $\mu = 9J$

Резкое возрастание параметра порядка соответствует фазовому переходу порядок – беспорядок, который является фазовым переходом второго рода и подобен фазовому переходу в системах с отталкиванием ближайших соседей [11–13]. В этом случае величина $\frac{J}{k_B T_c} = 0,186$ может быть интерпретирована как критический параметр системы.

Также можно отметить, что в отличие от аналогичной системы на плоской квадратной решетке, рассмотренной в [9], рост параметра является более плавным.

Введенный описанным выше образом параметр порядка модели может использоваться для локализации точек фазовых переходов и построения ее фазовой диаграммы.

Квазихимическое приближение

Свободная энергия F рассматриваемой системы может быть представлена как сумма свободной энергии $F^{(r)}$ подобной ей базисной системы и диаграммной части $F^{(d)}$ свободной энергии [12–14]:

$$F = F^{(r)} + F^{(d)}.$$

Базисная решеточная система определяется средними потенциалами $\Phi_j^\beta(n_i^\alpha)$, описывающими взаимодействие частицы ($n_i^\alpha = 1$) или вакансии ($n_i^\alpha = 0$), находящейся в узле i на подрешетке α , с узлом j на подрешетке β . Поскольку преобразование (1) является тождественным, свободная энергия системы не зависит от выбора средних потенциалов. Это позволяет определить средние потенциалы из принципа минимальной восприимчивости [15]:

$$\frac{\partial F}{\partial \varphi_i^\alpha} = 0.$$

Очевидно, что свободная энергия является функцией концентраций частиц на подрешетках либо функцией средней концентрации c частиц на всей решетке и параметра порядка δc . В свою очередь, параметр порядка может быть определен из условия минимальности свободной энергии системы:

$$\frac{\partial F}{\partial \delta c} = 0,$$

которое эквивалентно условию равенства химических потенциалов на всех подрешетках.

В качестве первого приближения при вычислении свободной энергии может быть рассмотрено КХП, при котором в диаграммной части свободной энергии учитывается вклад только двухвершинных графов, т. е.

$$F = \frac{k_B T}{2} \sum_{\alpha=p} \sum_{i=0}^v c_i^\alpha \left(\ln c_i^\alpha - \sum_k z_k \ln X_i^{\alpha(k)} \right) - \\ - \frac{k_B T}{2} \sum_k \frac{z_k}{2} \sum_{\alpha,\beta=p} \sum_{i,j=0}^v c_i^\alpha c_j^\beta \left(\frac{W_{ij}^{(k)}}{X_i^{\alpha(k)} X_j^{\beta(k)}} - 1 \right),$$

где z_k – k -е координационное число, т. е. число узлов, являющихся соседями k -го порядка для выделенного узла решетки заданного типа (в случае простой кубической решетки $z_1 = 6$, $z_2 = z_3 = 8$ и т. д.); $W_{ij}^{(k)} = \exp(-J_k n_i^\alpha n_j^\beta)$, $J_2 = J_k = 0$ для $k \geq 4$;

$$X_{n_i^\alpha}^{\alpha(k)} = \exp(-\beta \varphi^{(k)}(n_i^\alpha)).$$

В рамках этого приближения диаграммная часть свободной энергии равна нулю, и средние потенциалы для ближайших соседей не зависят от подрешеточной структуры. Это позволяет записать свободную энергию в виде

$$F^{\text{КХП}}(c, \delta c) = \frac{k_B T}{2} \sum_i c_i \left(\ln(c_i^2 - \delta c^2) - 2z_1 \ln X_i \right) - \\ - \frac{k_B T}{2} z_3 \left(\ln Z_0^p Z_0^v + c \ln \xi_v \xi_p \right) + \frac{k_B T}{2} \delta c \left(\sum_i \ln \frac{c_i + \delta c}{c_i - \delta c} - z_3 \ln \frac{\xi_p}{\xi_v} \right), \quad (2)$$

где

$$X_0 = \sqrt{c_0 + \frac{c_1}{\eta}}; \quad X_1 = \eta X_0,$$

здесь

$$\eta = -\frac{c_1 - c_0}{2c_0} + \sqrt{\left(\frac{c_1 - c_0}{2c_0} \right)^2 + \frac{c_1}{c_0} W}, \quad W = \exp\left(-\frac{J_1}{k_B T}\right); \\ Z_0^v Z_0^p = c_0^v + \frac{c_1^v}{\xi_v} = c_0^p + \frac{c_1^p}{\xi_p};$$

$$\xi_{p(v)} = -\frac{c_1 - c_0 \pm 2\Omega \delta c}{2(c_0 \mp \delta c)} + \sqrt{\left(\frac{c_1 - c_0 \pm 2\Omega \delta c}{2(c_0 \mp \delta c)} \right)^2 + \frac{c_1 \pm \delta c}{c_0 \mp \delta c} \Omega}, \quad \Omega = \exp\left(-\frac{J_3}{k_B T}\right).$$

Все термодинамические характеристики исследуемой системы могут быть определены на основе выражения (2) для свободной энергии. В частности, химический потенциал μ , термодинамический фактор χ_T и корреляционные функции $g_k(1; 1)$ заполнения частицами двух ближайших узлов ($k = 1$) и узлов-соседей порядка k определяются соотношениями

$$\beta\mu = \left(\frac{\partial(\beta F)}{\partial c} \right)_T,$$

$$\chi_T = \frac{\partial(\beta\mu)}{\partial \ln c}, \quad (3)$$

$$g_k(1; 1) = \frac{2}{z_k c^2} \left(\frac{\partial F}{\partial J_k} \right)_T. \quad (4)$$

Фазовая диаграмма модели

Наиболее важной структурной характеристикой, описывающей упорядоченное состояние системы, является параметр порядка. На рис. 3 представлена зависимость этого параметра от концентрации.

Введенный параметр порядка может быть использован для построения фазовой диаграммы модели (рис. 4). Отметим, что в отличие от аналогичной системы на плоской квадратной решетке [9] результаты КХП и моделирования методом Монте-Карло достаточно близкие. В частности, как уже было отмечено выше, критический параметр модели, определенный в ходе моделирования методом Монте-Карло, оказался равным 0,186, в то же время развитие КХП дает для этой величины значение 0,192. Таким образом, данные величины отличаются всего на 3 %, тогда как для плоских решеток отличие достигает 30 %.

Необходимо также заметить, что фазовые диаграммы модели на квадратной и кубической решетках оказываются существенно более простыми по сравнению с аналогичным решеточным флюидом на треугольной решетке [7]. По всей видимости, это объясняется тем, что и квадратная, и кубическая решетки являются слабоупакованными в отличие от плотноупакованной треугольной решетки.

Равновесные свойства модели

Изотермы химического потенциала представлены на рис. 5. Упорядоченная фаза в исследуемой системе существует при температуре ниже критической (βJ равно 0,20; 0,30; 0,40 и 0,50), где наблюдаются участки с резким увеличением химического потенциала с ростом концентрации частиц.

Разрывы на представленных на рис. 6 кривых (зависимости от концентрации производной по концентрации химического потенциала (или второй производной термодинамического потенциала Гиббса), или термодинамического фактора (3)) указывают на наличие фазового перехода второго рода. Высокие и резкие пики на данных кривых при $c = 0,5$ и температурах, меньших критической, соответствуют наиболее упорядоченным состояниям системы.

Термодинамический фактор является величиной, обратной величине флуктуаций концентрации частиц на решетке. После перехода от неупорядоченного состояния системы к упорядоченному флуктуации систематически снижаются до тех пор, пока не будет достигнута концентрация 0,5, при которой возможно наибольшее упорядочение системы. Физически это отражается подавлением флуктуаций в упорядоченном состоянии.

В рамках КХП химический потенциал и термодинамический фактор могут быть определены путем дифференцирования выражения (2). Однако такой подход неприменим для данных, полученных при моделировании методом Монте-Карло. В последнем случае термодинамический фактор вычислялся как величина, обратная среднеквадратичным флуктуациям числа частиц в системе, т. е.

$$\chi_T = \frac{\langle n \rangle}{\langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle}.$$

Следует отметить, что термодинамический фактор χ_T играет важную роль при описании транспортных процессов в решеточных системах [16].

Локальное упорядочивание в исследуемой системе может быть описано с помощью корреляционных функций (4). Эти функции являются более информативными объектами, чем обычные функции распределения, поскольку описывают отклонения короткодействующих корреляций во взаимодействующих системах от таковых в случае невзаимодействующих (ленгмюровских) решеточных газов, в которых они равны единице. Корреляционные функции для ближайших и третьих соседей представлены на рис. 7 и 8 соответственно.

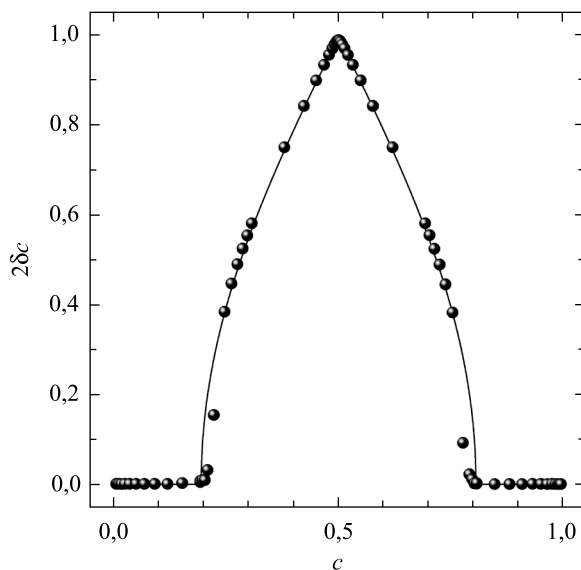


Рис. 3. Зависимость параметра порядка от концентрации при $\beta J = 0,4$.

Сплошной линией представлены результаты КХП, точками – данные моделирования методом Монте-Карло

Fig. 3. The order parameter versus concentration at $\beta J = 0.4$.

The solid line represents the QChA results, the full circles are the Monte Carlo simulation data

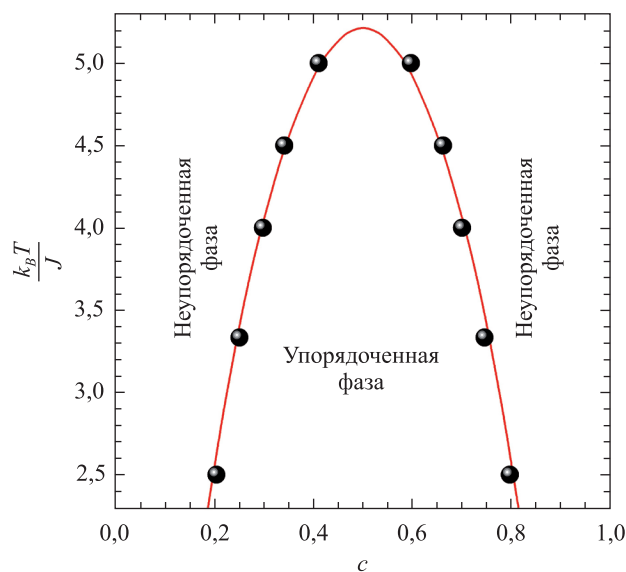


Рис. 4. Фазовая диаграмма решеточного флюида с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на простой кубической решетке.

Сплошной линией представлены результаты КХП, точками – данные моделирования методом Монте-Карло

Fig. 4. The order-disorder phase transition curves of lattice fluid with attractive interaction between nearest neighbors and repulsive interaction between next-next-nearest neighbors on simple cubic lattice.

The solid line represents the QChA results, the full circles are the Monte Carlo simulation data

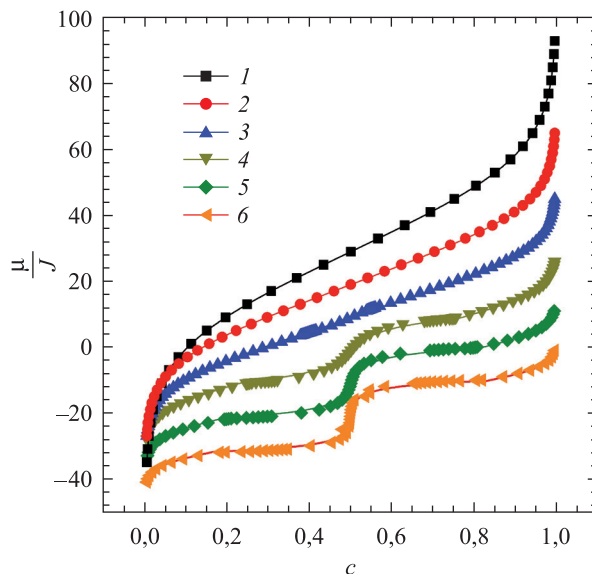


Рис. 5. Зависимость от концентрации химического потенциала системы (в единицах параметра J) при $\beta J = 0,10$ (кривая 1); $\beta J = 0,15$ (2); $\beta J = 0,20$ (3); $\beta J = 0,30$ (4); $\beta J = 0,40$ (5) и $\beta J = 0,50$ (6). Сплошной линией представлены результаты КХП, точками – данные моделирования методом Монте-Карло. Для большей наглядности каждая группа кривых смещена на 10 единиц вниз относительно предыдущей.

Положение несмещенной кривой 3 характеризуется значением $\frac{\mu}{J} = 9$ при $c = 0,5$, которое является общим для всех температур.

Таким образом, кривые 1 и 2 смещены вверх от своего исходного положения, а кривые 4, 5, 6 – вниз. Принятая нумерация кривых сохраняется на рис. 6–8

Fig. 5. The chemical potential (in units of the parameter J) versus concentration at $\beta J = 0.10$ (curves 1); $\beta J = 0.15$ (2); $\beta J = 0.20$ (3); $\beta J = 0.30$ (4); $\beta J = 0.40$ (5) and $\beta J = 0.50$ (6).

The solid lines represent the QChA results, the full circles are the Monte Carlo simulation data.

Each group of curves is shifted down by 10 units with respect to the previous one for better visibility.

The unshifted curve 3 is characterized by $\frac{\mu}{J} = 9$ at $c = 0.5$, and this point is the same for all the temperatures.

Thus, the groups of curves 1 and 2 are shifted up from their true position, while 4, 5 and 6 are shifted down.

The same curves numbers are kept in fig. 6–8

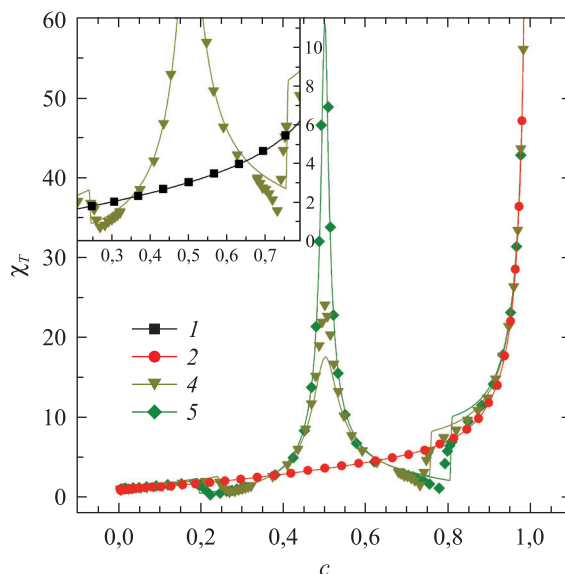


Рис. 6. Зависимость от концентрации термодинамического фактора при $\beta J = 0,10$ (кривая 1); $\beta J = 0,15$ (2); $\beta J = 0,30$ (4) и $\beta J = 0,40$ (5). Сплошной линией представлены результаты КХП, точками – данные моделирования методом Монте-Карло

Fig. 6. The thermodynamic factor versus concentration at $\beta J = 0.10$ (curves 1); $\beta J = 0.15$ (2); $\beta J = 0.30$ (4) and $\beta J = 0.40$ (5). The solid line represents the QChA results, the full circles are the Monte Carlo simulation data

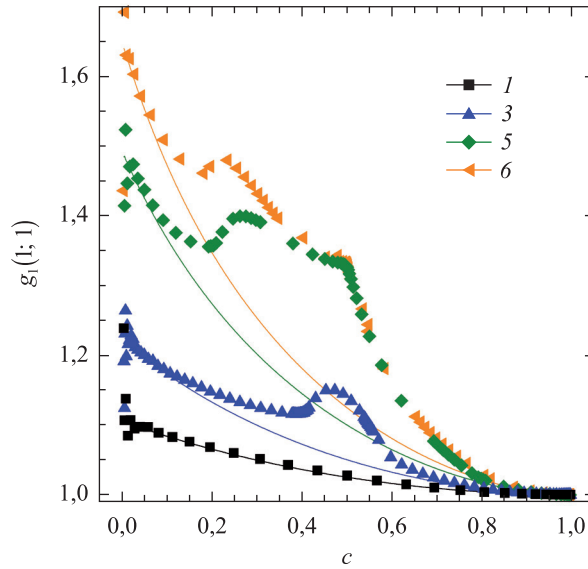


Рис. 7. Зависимость от концентрации корреляционных функций для ближайших соседей при $\beta J = 0,10$ (кривая 1); $\beta J = 0,20$ (3); $\beta J = 0,40$ (5) и $\beta J = 0,50$ (6). Сплошной линией представлены результаты КХП, точками – данные моделирования методом Монте-Карло

Fig. 7. The correlation functions for nearest neighbors versus concentration at $\beta J = 0.10$ (curves 1); $\beta J = 0.20$ (3); $\beta J = 0.40$ (5) and $\beta J = 0.50$ (6). The solid line represents the QChA results, the full circles are the Monte Carlo simulation data

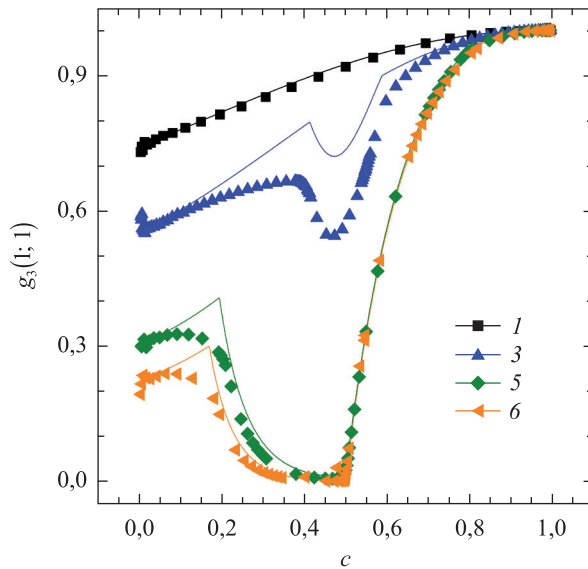


Рис. 8. Зависимость от концентрации корреляционных функций для третьих соседей при $\beta J = 0,10$ (кривая 1); $\beta J = 0,20$ (3); $\beta J = 0,40$ (5) и $\beta J = 0,50$ (6). Сплошной линией представлены результаты КХП, точками – данные моделирования методом Монте-Карло

Fig. 8. The correlation functions for the next-next-nearest neighbors versus concentration at $\beta J = 0.10$ (curves 1); $\beta J = 0.20$ (3); $\beta J = 0.40$ (5) and $\beta J = 0.50$ (6). The solid line represents the QChA results, the full circles are the Monte Carlo simulation data

Возникающая в системе глобальная упорядоченность проявляет себя и на локальном уровне. Например, при температурах ниже критической (см. кривые 3, 5 и 6 на рис. 8) вероятность нахождения двух узлов-соседей третьего порядка, занятых частицами, становится очень низкой. Очевидно, что с ростом температуры отличия рассматриваемой системы от случая лентмюровского решеточного газа уменьшаются.

Заключение

Результаты аналитических расчетов и моделирования применительно к химическому потенциалу и термодинамическому фактору находятся в хорошем соответствии во всей области изменения термодинамических параметров, за исключением ближайших окрестностей точек фазовых переходов второго рода, в которых данные КХП обнаруживают резкие скачки на кривых термодинамического фактора.

В то же время при определении корреляционных функций результаты двух подходов удовлетворительно соответствуют друг другу лишь в неупорядоченной фазе. При этом они существенно различаются при средних концентрациях и низких температурах из-за проблем, связанных с описанием упорядоченных состояний в КХП. Наиболее значимые отличия возникают при рассмотрении корреляций в заполнении ближайших решеточных узлов.

Таким образом, разработанный аналитический подход позволяет правильно описать качественные особенности структурных свойств систем с конкурирующими взаимодействиями и может быть использован для количественной оценки термодинамических характеристик этих систем.

Библиографические ссылки

1. Stradner A, Sedgwick H, Cardinaux F, Poon WCK, Egelhaaf SU, Schurtenberger P. Equilibrium cluster formation in concentrated protein solutions and colloids. *Nature*. 2004;432:492–495. DOI: 10.1038/Nature03109.
2. Khaldoun A, Moller P, Fall A, Wegdam G, De Leeuw B, Méheust Y, et al. Quick clay and landslides of clayey soils. *Physical Review Letters*. 2009;103(18):188301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.103.188301.
3. Meyra AG, Zarragoicoechea GJ, Kuz VA. Self-organization of plants in a dryland ecosystem: Symmetry breaking and critical cluster size. *Physical Review E*. 2015;91(5):052810. DOI: 10.1103/PhysRevE.91.052810.
4. Archer AJ, Pini D, Evans R, Reatto L. Model colloidal fluid with competing interactions: Bulk and interfacial properties. *Journal of Chemical Physics*. 2007;126(1):014104. DOI: 10.1063/1.2405355.
5. Pini D, Jialin G, Parola A, Reatto L. Enhanced density fluctuations in fluid systems with competing interactions. *Chemical Physics Letters*. 2000;327(3):209–215. DOI: 10.1016/S0009-2614(00)00763-6.
6. Pekalski J, Ciach A, Almarza NG. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. I. Ground state, mean-field phase diagram and structure of the disordered phases. *Journal of Chemical Physics*. 2014;140:114701. DOI: 10.1063/1.4868001.
7. Almarza NG, Pekalski J, Ciach A. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. II. Results of Monte Carlo simulation. *Journal of Chemical Physics*. 2014;140:164708. DOI: 10.1063/1.4871901.
8. Грода ЯГ, Бильданов ЭЭ, Гапанюк ДВ. Критический параметр решеточного флюида с SALR-потенциалом на плоской квадратной решетке. *Труды БГТУ. Серия 3. Физико-математические науки и информатика* [Интернет]. 2018 [процитировано 27 января 2019 г.];1(206):24–28. Доступно по: elib.belstu.by/handle/123456789/25356.
9. Groda YaG, Vikhrenko VS, di Caprio D. Equilibrium properties of the lattice system with SALR interaction potential on a square lattice: quasi-chemical approximation versus Monte Carlo simulation. *Condensed Matter Physics*. 2018;21(4):43002. DOI: 10.5488/CMP.21.43002.
10. Uebing C, Gomer RA. Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions. III. Repulsive nearest-neighbor and attractive next-nearest-neighbor interactions. *Journal of Chemical Physics*. 1991;95(10):7626–7652. DOI: 10.1063/1.461817.
11. Binder K, Landau DP. Phase diagrams and critical behavior in Ising square lattices with nearest- and next-nearest-neighbor interactions. *Physical Review B*. 1980;21(5):1941–1963. DOI: 10.1103/PhysRevB.21.1941.
12. Groda YaG, Argyrakis P, Bokun GS, Vikhrenko VS. SCDA for 3D lattice gases with repulsive interaction. *The European Physical Journal B*. 2003;32(4):527–535. DOI: 10.1140/epjb/e2003-00118-3.
13. Вихренко ВС, Грода ЯГ, Бокун ГС. Равновесные и диффузионные характеристики интеркаляционных систем на основе решеточных моделей [Интернет]. Минск: БГТУ; 2008 [процитировано 14 сентября 2018 г.]. 326 с. Доступно по: elib.belstu.by/handle/123456789/2716.
14. Groda YaG, Lasovsky RN, Vikhrenko VS. Equilibrium and diffusional properties of two-level lattice systems: quasichemical and diagram approximation versus Monte Carlo simulation results. *Solid State Ionics*. 2005;176(19–22):1675–1680. DOI: 10.1016/j.ssi.2005.04.016.
15. Bokun GS, Groda YaG, Belov VV, Uebing C, Vikhrenko VS. The self-consistent diagram approximation for lattice systems. *European Physical Journal B*. 2000;15(2):297–304. DOI: 10.1007/s100510051128.
16. Bokun GS, Groda YaG, Uebing C, Vikhrenko VS. Statistical-mechanical description of diffusion in interacting lattice gases. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2001;296(1–2):83–105. DOI: 10.1016/S0378-4371(01)00163-7.

References

1. Stradner A, Sedgwick H, Cardinaux F, Poon WCK, Egelhaaf SU, Schurtenberger P. Equilibrium cluster formation in concentrated protein solutions and colloids. *Nature*. 2004;432:492–495. DOI: 10.1038/Nature03109.
2. Khaldoun A, Moller P, Fall A, Wegdam G, De Leeuw B, Méheust Y, et al. Quick clay and landslides of clayey soils. *Physical Review Letters*. 2009;103(18):188301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.103.188301.

3. Meyra AG, Zarragoicochea GJ, Kuz VA. Self-organization of plants in a dryland ecosystem: Symmetry breaking and critical cluster size. *Physical Review E*. 2015;91(5):052810. DOI: 10.1103/PhysRevE.91.052810.
4. Archer AJ, Pini D, Evans R, Reatto L. Model colloidal fluid with competing interactions: Bulk and interfacial properties. *Journal of Chemical Physics*. 2007;126(1):014104. DOI: 10.1063/1.2405355.
5. Pini D, Jialin G, Parola A, Reatto L. Enhanced density fluctuations in fluid systems with competing interactions. *Chemical Physics Letters*. 2000;327(3):209–215. DOI: 10.1016/S0009-2614(00)00763-6.
6. Pekalski J, Ciach A, Almarza NG. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. I. Ground state, mean-field phase diagram and structure of the disordered phases. *Journal of Chemical Physics*. 2014;140:114701. DOI: 10.1063/1.4868001.
7. Almarza NG, Pekalski J, Ciach A. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. II. Results of Monte Carlo simulation. *Journal of Chemical Physics*. 2014;140:164708. DOI: 10.1063/1.4871901.
8. Groda YaG, Bildanau EE, Gapanjuk DV. Critical parameter of the lattice fluid with SALR-potential on the simple square lattice. *Trudy BGTU. Seriya 3. Fiziko-matematicheskie nauki i informatika* [Internet]. 2018 [cited 2019 January 27];1(206):24–28. Available from: elib.belstu.by/handle/123456789/25356. Russian.
9. Groda YaG, Vikhrenko VS, di Caprio D. Equilibrium properties of the lattice system with SALR interaction potential on a square lattice: quasi-chemical approximation versus Monte Carlo simulation. *Condensed Matter Physics*. 2018;21(4):43002. DOI: 10.5488/CMP.21.43002.
10. Uebing C, Gomer RA. Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions. III. Repulsive nearest-neighbor and attractive next-nearest-neighbor interactions. *Journal of Chemical Physics*. 1991;95(10):7626–7652. DOI: 10.1063/1.461817.
11. Binder K, Landau DP. Phase diagrams and critical behavior in Ising square lattices with nearest- and next-nearest-neighbor interactions. *Physical Review B*. 1980;21(5):1941–1963. DOI: 10.1103/PhysRevB.21.1941.
12. Groda YaG, Argyrakis P, Bokun GS, Vikhrenko VS. SCDA for 3D lattice gases with repulsive interaction. *The European Physical Journal B*. 2003;32(4):527–535. DOI: 10.1140/epjb/e2003-00118-3.
13. Vikhrenko VS, Groda YaG, Bokun GS. Ravnovesnye i diffuzionnye kharakteristiki interkalyatsionnykh sistem na osnove reshetochnykh modelei [Internet]. Minsk: Belarusian State Technological University; 2008 [cited 2018 September 14]. 326 p. Available from: elib.belstu.by/handle/123456789/2716. Russian.
14. Groda YaG, Lasovsky RN, Vikhrenko VS. Equilibrium and diffusional properties of two-level lattice systems: quasichemical and diagram approximation versus Monte Carlo simulation results. *Solid State Ionics*. 2005;176(19–22):1675–1680. DOI: 10.1016/j.ssi.2005.04.016.
15. Bokun GS, Groda YaG, Belov VV, Uebing C, Vikhrenko VS. The self-consistent diagram approximation for lattice systems. *European Physical Journal B*. 2000;15(2):297–304. DOI: 10.1007/s100510051128.
16. Bokun GS, Groda YaG, Uebing C, Vikhrenko VS. Statistical-mechanical description of diffusion in interacting lattice gases. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2001;296(1–2):83–105. DOI: 10.1016/S0378-4371(01)00163-7.

Статья поступила в редколлегию 05.03.2019.
Received by editorial board 05.03.2019.

УДК 538.9

ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ЗАЭВТЕКТИЧЕСКОГО СИЛУМИНА ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОМ ЗАТВЕРДЕВАНИИ

**В. Г. ШЕПЕЛЕВИЧ¹⁾, О. В. ГУСАКОВА²⁾,
Д. В. АЛЕКСАНДРОВ³⁾, И. О. СТАРОДУМОВ³⁾**

¹⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

²⁾Международный государственный экологический институт им. А. Д. Сахарова БГУ,
ул. Долгобродская, 23, 220170, г. Минск, Беларусь

³⁾Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,
ул. Мира, 19, 620002, г. Екатеринбург, Россия

Представлены результаты исследования фазового состава заэвтектического силумина Al – 16,0 ат. % Si – 0,2 ат. % Fe. Проведен сравнительный анализ фазового состава образцов, полученных при средней (10^2 K/c) и сверхвысокой (10^5 K/c) скорости охлаждения расплава. При средней скорости образцы затвердевали в графитовой изложнице, сверхвысокая скорость охлаждения расплава обеспечивалась при изготовлении фольг методом сверхбыстрой закалки из расплава. Методом рентгеноструктурного и микрорентгеноспектрального анализа установлено, что быстрозатвердевшие фольги состоят из пересыщенного кремнием твердого раствора на основе алюминия, дисперсных частиц кремния и фазы тройного соединения $AlFeSi_2$. Сравнительный анализ результатов рентгеноструктурных и рентгеноспектральных исследований образцов, полученных при разных скоростях охлаждения расплава, позволил установить, что при высокоскоростном затвердевании пересыщенный твердый раствор на основе алюминия содержит до 2 ат. % Si.

Ключевые слова: заэвтектический силумин; высокоскоростное затвердевание; фазовый состав.

Благодарность. Работа выполнена в рамках проектов № Ф18Р-195 Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований и № 18-58-00034 Бел_а Российского фонда фундаментальных исследований.

Образец цитирования:

Шепелевич ВГ, Гусакова ОВ, Александров ДВ, Стародумов ИО. Фазовый состав заэвтектического силумина при высокоскоростном затвердевании. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2019;2:96–104.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-96-104>

For citation:

Shepelevich VG, Gusakova OV, Alexandrov DV, Starodumov IO. Phase composition of hypereutectic silumin at rapid solidification. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2019; 2:96–104. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-96-104>

Авторы:

Василий Григорьевич Шепелевич – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры физики твердого тела физического факультета.

Ольга Вадимовна Гусакова – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры ядерной и радиационной безопасности факультета мониторинга окружающей среды.

Дмитрий Валерьевич Александров – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры теоретической и математической физики Института естественных наук и математики.

Илья Олегович Стародумов – младший научный сотрудник лаборатории многомасштабного математического моделирования Института естественных наук и математики.

Authors:

Vasily G. Shepelevich, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of solid-state physics, faculty of physics.

shepelevich@bsu.by
<https://orcid.org/0000-0002-5899-1690>

Olga V. Gusakova, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of nuclear and radiation safety, faculty of environmental monitoring.

ol.gusakova@gmail.com
<https://orcid.org/0000-0002-9796-4476>

Dmitry V. Alexandrov, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of theoretical and mathematical physics, Institute of Natural Sciences and Mathematics.

dmitri.alexandrov@urfu.ru
<https://orcid.org/0000-0002-6628-745X>

Ilya O. Starodumov, junior researcher at the laboratory of multiscale mathematical modeling, Institute of Natural Sciences and Mathematics.

ilya.starodumov@urfu.ru
<https://orcid.org/0000-0001-6397-488X>

PHASE COMPOSITION OF HYPEREUTECTIC SILUMIN AT RAPID SOLIDIFICATION

V. G. SHEPELEVICH^a, O. V. GUSAKOVA^b,
D. V. ALEXANDROV^c, I. O. STARODUMOV^c

^aBelarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus

^bInternational Sakharov Environmental Institute, Belarusian State University,
23 Daŭhabrodskaja Street, Minsk 220170, Belarus

^cUral Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin,
19 Mira Street, Ekaterinburg 620002, Russia

Corresponding author: O. V. Gusakova (ol.gusakova@gmail.com)

The paper presents the results of the study of the phase composition of hypereutectic silumin Al – 16.0 at. % Si – 0.2 at. % Fe. A comparative analysis of the phase composition of samples obtained at an average melt cooling rate of 10^2 K/s and at an ultra-high melt cooling rate of 10^5 K/s was carried out. At an average rate, the samples solidified in a graphite mold, and the ultra-high melt cooling rate was provided during the production of foils by the method of ultrafast quenching from the melt. It was established by X-ray diffraction and micro X-ray spectral analysis that the rapidly solidified foils consist of an aluminum-based solid solution supersaturated by silicon, dispersed silicon particles and the AlFeSi_2 ternary compound phase. Comparative analysis of the results of X-ray diffraction and X-ray spectral studies of samples obtained at different melt cooling rates indicate that, during rapid solidification, the aluminum-based supersaturated solid solution contains up to 2 at. % Si.

Keywords: hypereutectic silumin; rapid solidification; phase composition.

Acknowledgements. The work was carried out as part of projects No. Ф18Р-195 of the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research and No. 18-58-00034 Bel_a of the Russian Foundation for Basic Research.

Введение

Силумины обладают уникальными техническими характеристиками: малой плотностью, хорошими механическими свойствами, низким температурным коэффициентом линейного расширения [1; 2], поэтому они наиболее распространены среди алюминиевых сплавов. В связи с широким использованием силуминов в машино-, авиа- и ракетостроении огромное внимание уделяется улучшению их эксплуатационных характеристик. Исследования и технологические разработки, направленные на повышение прочности и пластичности сплавов системы Al – Si за счет уменьшения размеров частиц кремния, ведутся по трем основным направлениям. Во-первых, модифицирование микроструктуры силуминов осуществляется при добавках отдельных химических элементов и их комплексов [3–5]. Во-вторых, разрабатываются технологии микролегирования силуминов микро- и наночастицами различных составов [6–8]. В-третьих, изучается возможность направленного изменения микроструктуры и улучшения механических свойств за счет увеличения скорости затвердевания [9–12]. Последнее является высокоэффективным способом измельчения структурных составляющих силуминов.

Метод сверхбыстрой закалки из расплава – наиболее технологичный и ресурсосберегающий способ, обеспечивающий высокие скорости затвердевания. В данном методе материал в виде фольги получается в результате затвердевания тонкого слоя расплава после его растекания по поверхности вращающегося кристаллизатора. В зависимости от толщины слоя расплава скорость охлаждения составляет 10^5 – 10^7 К/с. При этом затвердевание начинается при глубоком переохлаждении и протекает при большом градиенте температуры [13–14], а, как известно, повышение скорости охлаждения расплава обеспечивает измельчение структурных составляющих. Показано [15], что для силуминов размер включений кремния может быть уменьшен на порядок по сравнению с квазиравновесной кристаллизацией. При высокоскоростном затвердевании наблюдается повышение растворимости компонент сверх равновесной. Предполагается, что в сплавах Al – Si растворимость кремния в алюминии значительно превосходит равновесную [16; 17]. Однако установить растворимость кремния – трудная задача, поскольку, как правило, неизвестно, какая его доля образует включения.

Цель работы – исследование элементного и фазового состава быстрозатвердевшей фольги заэвтектического силумина, синтезированного методом сверхбыстрой закалки из расплава при скорости его охлаждения 10^5 К/с, и массивных образцов, полученных при скорости охлаждения из расплава 10^2 К/с.

Материалы и методы

В качестве исходного использовался эвтектический промышленно выпускаемый силумин особой чистоты АК12оч следующего состава: Al – 12,2 ат. % Si – 0,2 ат. % Fe. Заэвтектический силумин, содержащий 16,0 ат. % Si, получался сплавлением АК12оч и кремния, имевшего чистоту 99,999. Состав контролировался с помощью рентгеноспектрального микроанализа.

Исследованы структуры силуминов, синтезированных при скорости охлаждения расплава 10^2 К/с (массивные образцы) и 10^5 К/с (быстрозатвердевшие фольги). Массивные образцы размером $30 \times 10 \times 2$ мм получались при застывании расплава на воздухе в графитовой изложнице. Для образования фольги использовался медный кристаллизатор в виде полого барабана, вращающийся со скоростью 25 об/с. Линейная скорость движения его боковой поверхности составляла 15 м/с. Фольга получалась после затвердевания тонкого слоя расплава. При его толщине 50–60 мкм скорость охлаждения достигала 10^5 – 10^6 К/с. Фольги имели толщину 50–60 мкм, ширину до 15 мм и длину 8–10 см.

Анализ элементного и фазового состава проводился у прилегающей к кристаллизатору поверхности фольги (сторона А), у противоположенной поверхности, затвердевающей на воздухе (сторона В), а также в сечении фольги. Для приготовления продольного и поперечного сечений фольги использовалась шлифовально-полировальная установка TegraPol-25. Полирование проводилось по технологии и с использованием расходных материалов фирмы *Struers* (Дания).

Микроструктура сплавов исследовалась с помощью растрового электронного микроскопа LEO 1455 VP. Распределение элементов по поверхностям фольги и поперечному сечению изучалось с использованием рентгеноспектрального микроанализатора с энергодисперсионным детектором Aztec Energy Advanced X-Max 80 при ускоряющих напряжениях 10 и 20 кВ. Фазовый состав сплавов определялся путем рентгеноструктурного анализа на дифрактометре Rigaku Ultima IV в медном излучении.

Результаты и их обсуждение

Общий вид микроструктур, полученный в отраженных электронах на растровом электронном микроскопе, в сечении массивного образца (скорость охлаждения расплава 10^2 К/с) и быстрозатвердевшей фольги (скорость охлаждения расплава 10^5 К/с) приведен на рис. 1. В массивном образце четко выделяются серые включения различных размеров, яркие белые включения и темная матрица. В быстрозатвердевшей фольге у стороны, прилегающей к кристаллизатору (верхняя часть рисунка), заметных включений нет. В остальной части фольги наблюдаются мелкие светлые включения и слаборазличимые светлые и темные участки.

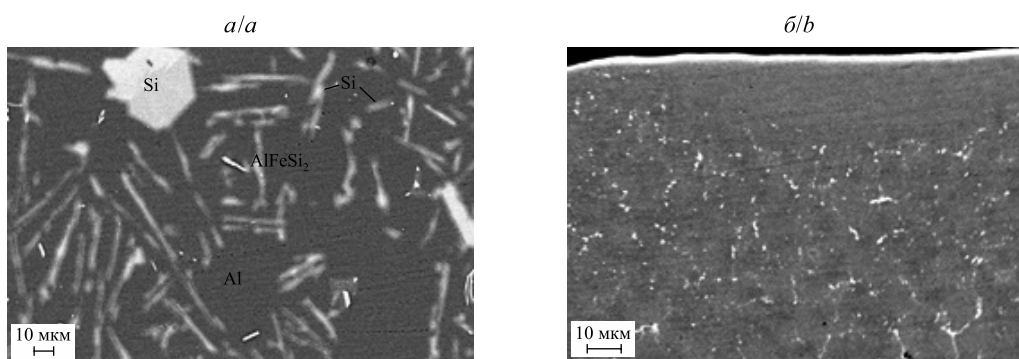


Рис. 1. Микроструктура массивного образца (а) и быстрозатвердевшей фольги (б)

Fig. 1. The microstructure of a massive sample (a) and rapidly solidified foil (b)

Рентгеноспектральный микроанализ массивного образца показал, что серые включения содержат кремний, темное поле – алюминий и кремний, яркие белые включения характеризуются повышенным содержанием железа и кремния. В светлых включениях в быстрозатвердевших фольгах также имеются кремний и железо. Слаборазличимые светлые и темные участки в объеме, прилегающем к свободно затвердевающей стороне фольги, содержат кремний и алюминий различной концентрации.

Для определения фазового состава массивного образца и быстрозатвердевшей фольги проведены рентгеноструктурные исследования в идентичных условиях массивного образца и быстрозатвердевшей фольги сплава Al – 16,0 мас. % Si – 0,2 мас. % Fe, а также положения дифракционных максимумов алюминия и кремния (табл. 1).

Таблица 1

Положения дифракционных максимумов (2θ) на дифрактограммах массивных образцов и быстрозатвердевшей фольги сплава Al – 16,2 мас. % Si – 0,2 мас. % Fe, град

Table 1

The positions of the diffraction lines in the X-ray patterns of massive samples and rapidly solidified Al alloy foil – 16.2 wt. % Si – 0.2 wt. % Fe, deg

Массивный образец	Фольга, сторона А	Al*	Si**	AlFeSi ₂
28,446 5	28,447	–	28,42 (100)	–
35,595	35,597	–	–	35,56
38,473 3	38,473	38,47 (111)	–	–
41,94	41,90	–	–	41,94
44,719 1	44,719 5	44,74 (200)	–	–
47,301	47,30	–	47,31 (220)	–
56,117	56,12	–	56,10 (311)	–
59,858	59,9	–	–	59,9
65,082 3	65,083	65,13 (220)	–	–
69,106	69,11	–	69,17 (400)	–
76,374	76,38	–	76,37 (331)	–
78,215 4	78,216	78,23 (331)	–	–
82,424	82,45	82,44 (222)	–	–
88,008	88,01	–	88,06 (422)	–
94,928	94,94	–	94,97 (511)	–
99,059	99,09	99,0 (400)	–	–
106,68	106,7	–	106,73 (440)	–
111,993	112,11	112,44 (331)	–	–
114,064	114,10	–	114,13 (531)	–
116,540	116,62	116,27 (420)	–	–
127,49	127,5	–	–	–
137,418	137,43	–	–	–

*Согласно данным JCPDS, карточка № 00-004-0787. **Согласно данным JCPDS, карточка № 00-005-0565. В скобках указаны индексы соответствующих плоскостей (HKL).

Анализ показывает, что фазовый состав массивного образца и фольги одинаков. Дифракционные максимумы принадлежат чистому кремнию, алюминию. Также присутствуют слабоинтенсивные дифракционные максимумы, принадлежащие, очевидно, железосодержащей фазе.

По сравнению с массивным образцом на дифрактограммах быстрозатвердевшей фольги наблюдается уменьшение интенсивности и расширение дифракционных максимумов кремния, что обусловлено в основном измельчением его структуры. Размер зерен (ОКР) кремния, определенный по методу Дебая – Шеррера из данных дифракционного максимума Si (331), составляет 38,5 нм. Необходимо отметить, что это значение может быть занижено, поскольку используемый метод не учитывает возможное уширение линий, обусловленное напряжением, наличием линейных дефектов и др.

Количество наблюдаемых слабоинтенсивных пиков недостаточно для уверенного определения фазы включения по результатам рентгеноструктурного анализа. В связи с этим были проведены исследования участков массивного образца, содержащих включения с железом с помощью рентгеноспектрального микроанализа (рис. 2).

Результаты рентгеноспектрального микроанализа показывают, что в исследуемых включениях содержание кремния в 2 раза превышает содержание железа, что позволяет предположить формирование фазы AlFeSi₂, образование которой характерно для заэвтектических силуминов, синтезированных при высоких скоростях охлаждения расплава [18].

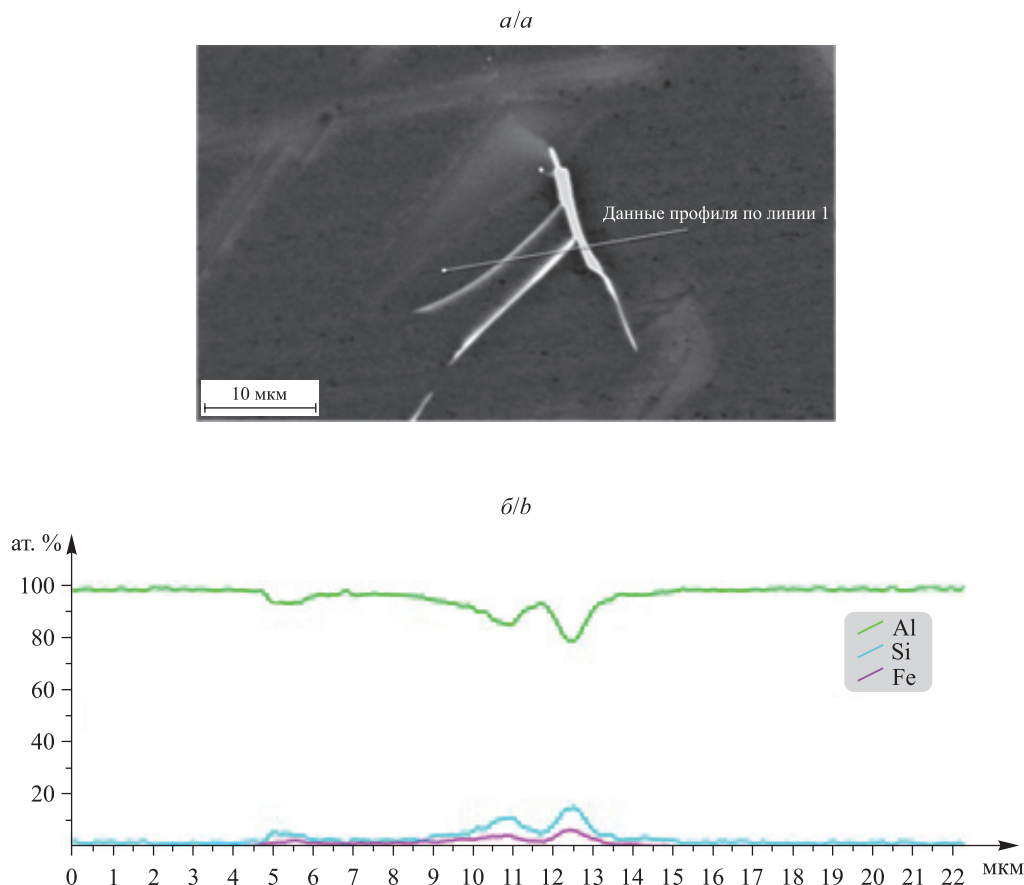


Рис. 2. Микроструктура (а) и распределение элементов вдоль линии сканирования (б) участка поперечного сечения массивного образца

Fig. 2. Microstructure (a) and distribution of elements along the scan line (b) of a cross-section of a massive sample

Согласно полученным рентгеноструктурным данным, существенных смещений положений дифракционных максимумов алюминия ни в массивных образцах, ни в фольгах не наблюдается. Отсутствие смещений дифракционных максимумов может быть обусловлено образованием чистого алюминия. Однако в случае близости радиусов ионов Al и Si, равных 0,053 и 0,054 нм соответственно, при образовании твердого раствора замещения при небольших концентрациях примеси смещения параметра решетки практически не будет. Возможно, именно этот факт приводит к трудности определения растворимости при высоких скоростях охлаждения расплава [17]. Поэтому для нахождения концентрации кремния в твердом растворе на основе алюминия был исследован состав в локальных областях матрицы массивного образца и быстрозатвердевшей фольги, свободных от выделений. Оценка размеров области генерации рентгеновского излучения в алюминии определялась по формуле [19]

$$R_x = \frac{0,033(E_0^{1,7} - E_{кр}^{1,7})A}{z\rho}, \quad (1)$$

где E_0 – энергия пучка электронов; $E_{кр}$ – критический потенциал возбуждения анализируемого элемента ($E_{кр} = 1,559$ кэВ для Al); A – атомный вес (26,98); z – атомный номер (13); ρ – плотность (2,69 г/см³). Область генерации рентгеновского излучения в алюминии при ускоряющем напряжении 20 кВ не превышает 4,1 мкм, а при ускоряющем напряжении 10 кВ она оценивается равной 1,2 мкм. Поэтому при наличии в образце участков алюминия размером более 10 мкм определение содержания кремния в них методом рентгеноспектрального микроанализа правомочно.

На рис. 3 приведены результаты исследования элементного состава в участках массивного образца, не имеющих включений кремния. Рентгеноспектральный микроанализ показывает, что содержание кремния в участках алюминия составляет около 1,7 вес. %.

Для установления среднего значения концентрации Si в твердом растворе на основе Al изучено несколько участков массивного образца без включений кремния (табл. 2). Для исключения попадания в спектр рентгеновских квантов от соседних включений кремния участки выбирались размером не менее 50 мкм.

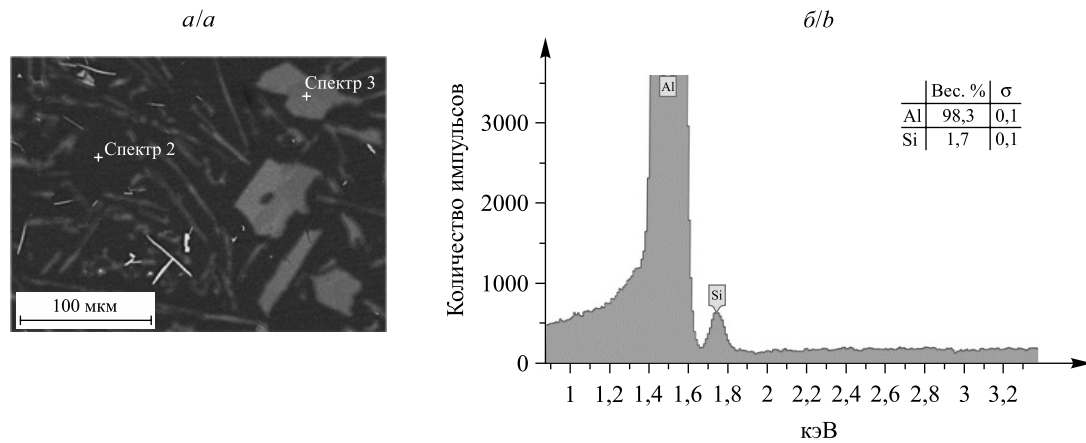


Рис. 3. Микроструктура участка массивного образца (а) и рентгеновский спектр (б), полученный из локального участка, не содержащего включений кремния
Fig. 3. Microstructure of a massive sample (a) and X-ray spectrum (b) obtained from a local area that does not contain silicon inclusions

Таблица 2

Концентрация Al и Si в твердом растворе на основе алюминия в массивном образце

Table 2

The concentration of Al and Si in aluminum based solid solution on in a massive sample

Номер участка	Al		Si	
	вес. %	ат. %	вес. %	ат. %
1	98,19 (0,02)	98,26	1,81 (0,02)	1,74
2	98,28 (0,05)	98,35	1,72 (0,05)	1,65
3	98,31 (0,06)	98,38	1,69 (0,06)	1,62

Примечание. В скобках указано среднее квадратичное отклонение.

При определении концентрации кремния в твердом растворе на основе алюминия в быстрозатвердевших фольгах проведены исследования распределения элементов в поперечном сечении по результатам сканирования поверхности с помощью рентгеноспектрального микроанализа. На рис. 4 представлены результаты такого исследования у свободно затвердевшей стороны фольги. Небольшие (порядка 0,5 мкм) яркие светлые включения на карте распределения кремния соответствуют кристаллам первичного кремния. Темные участки на этой карте соответствуют ветвям дендритов алюминия. Между ними находится смесь алюминия и эвтектического кремния. Размеры таких ветвей достигают 4–5 мкм.

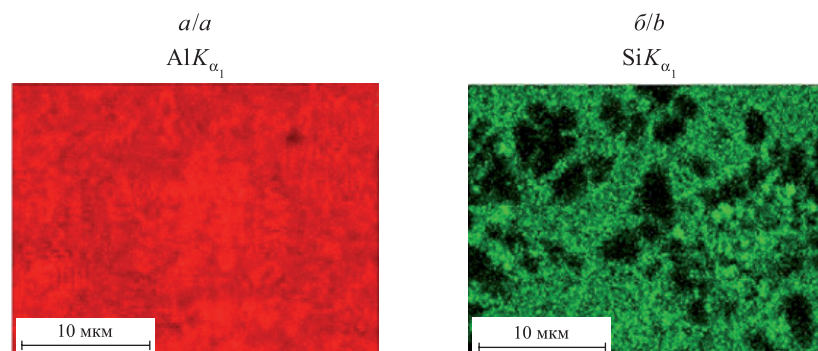


Рис. 4. Распределение Al (а) и Si (б) по поверхности участка поперечного сечения фольги, полученное в характеристическом рентгеновском излучении

Fig. 4. The distribution of Al (a) and Si (b) on the surface of the cross section of the foil, obtained in the characteristic X-rays

Исследование концентрации элементов в дендритах алюминия проводилось при анализе распределений элементов вдоль линии сканирования, а также при локальном (точечном) определении концентрации в ветвях дендритов. Результаты представлены на рис. 5 и в табл. 3.

Распределение кремния вдоль линии сканирования $L - L^1$, а также спектр, полученный из участка с наименьшим содержанием кремния, показывают, что в быстрозатвердевшей фольге заэвтектического силумина в алюминии содержится до 2 ат. % кремния. Для подтверждения этого результата был определен состав в нескольких аналогичных участках (см. табл. 3).

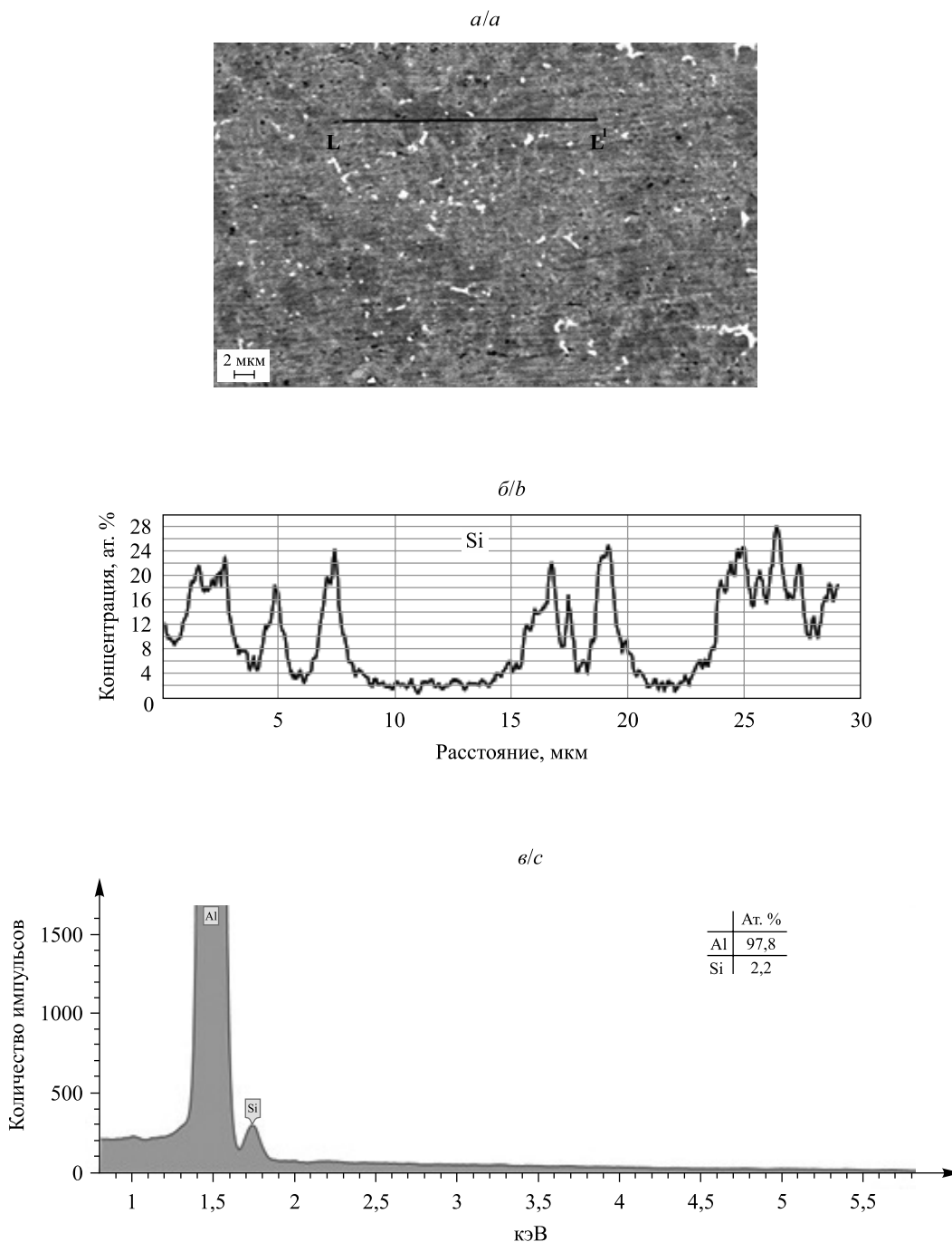


Рис. 5. Микроструктура участка фольги в отраженных электронах (а), распределение кремния вдоль линии сканирования $L - L^1$ (б), спектр рентгеновского излучения и состав в темном участке (в)

Fig. 5. Microstructure of an area of the foil in reflected electrons (a), silicon distribution along the scanning line $L - L^1$ (b), X-ray spectrum and composition in the dark area (c)

Таблица 3

Концентрация кремния и алюминия в различных дендритах алюминия

Table 3

The concentration of silicon and aluminum in various aluminum dendrites

Номер участка	Al		Si	
	вес. %	ат. %	вес. %	ат. %
1	97,7 (0,11)	97,79	2,3 (0,11)	2,21
2	97,44 (0,12)	97,54	2,56 (0,12)	2,46
3	97,46 (0,13)	97,56	2,54 (0,13)	2,44

Примечание. В скобках указано среднее квадратичное отклонение.

Исходя из полученных экспериментальных данных, можно утверждать, что в быстрозатвердевших фольгах концентрация кремния в ветвях дендритов алюминия находится в пределах 2 ат. %. Более высокие ее значения связаны, скорее всего, с выходом рентгеновского излучения из соседних с ветвями дендритов участков, содержащих эвтектический кремний. Необходимо отметить, что полученные результаты не дают основания заключить, что кремний входит в решетку алюминия, образуя твердый раствор замещения. Он может образовывать отдельные кластеры в соединении с алюминием, в том числе со специфической структурой расположения атомов в них [20].

Заключение

Заэвтектические силумины, содержащие 16,0 ат. % кремния, синтезированные при средних (10^2 К/с) и сверхвысоких (10^5 К/с) скоростях охлаждения расплава, формируются с образованием кристаллов первичного кремния, дендритов на основе твердого раствора алюминия и железосодержащей фазы $AlFeSi_2$. Увеличение скорости охлаждения расплава приводит к росту концентрации кремния в ветвях дендритов алюминия сверх равновесного значения.

Библиографические ссылки

- Haizhi Ye. An overview of the development of Al-Si-Alloy Based Material for Engine Applications Haizhi. *Journal of Materials Engineering and Performance*. 2003;12(3):288–297. DOI: 10.1361/105994903770343132.
- Francisco C. Robles-Hernandez, Jose Martin Herrera Ramirez, Mackay R. *Al-Si alloys automotive, aeronautical, and aerospace applications*. [Place unknown]: Springer; 2017. DOI: 10.1007/978-3-319-58380-8.
- Darlapudi A, McDonald SD, Terzi S, Prasad A, Felberbaum M, Stjohn DH. The influence of ternary alloying elements on the Al-Si eutectic microstructure and the Si morphology. *Journal of Crystal Growth*. 2016;433:63–73. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2015.10.002.
- Wenyi L, Wenlong X, Cong X, Maowen L, Chaoli M. Synergistic effects of Gd and Zr on grain refinement and eutectic Si modification of Al-Si cast alloy. *Materials Science and Engineering A*. 2017;693:93–100. DOI: 10.1016/j.msea.2017.03.097.
- Li JH, Wang XD, Ludwig TH, Tsunekawa Y, Arnberg L, Jiang JZ, et al. Modification of eutectic Si in Al-Si alloys with Eu addition. *Acta Materialia*. 2015;84:153–163. DOI: 10.1016/j.actamat.2014.10.064.
- Волочко АТ. Модифицирование эвтектических и первичных частиц кремния в силуминах. Перспективы развития. *Литье и металлургия*. 2015;4(81):38–44.
- Kaiqi H, Xia M, Tong G, Qingfei X, Zhao Q, Yuying W, Xiangfa L, et al. Morphological transformation mechanism of eutectic Si phases in Al-Si alloys by nano-AlNp. *Journal of Alloys and Compounds*. 2018;765:113–120. DOI: 10.1016/j.jallcom.2018.06.223.
- Wang K, Jiang HY, Wang QD, Ye B, Ding WJ. Nanoparticle-induced nucleation of eutectic silicon in hypoeutectic Al-Si alloy. *Materials Characterization*. 2016;117:41–46. DOI: 10.1016/j.matchar.2016.04.016.
- Марукович ЕИ, Стеценко ВЮ. *Модифицирование сплавов*. Минск: Беларуская навука; 2009. 192 с.
- Стеценко ВЮ, Ривкин АИ, Гутев АП, Коновалов РВ. Модифицирование силуминов мелкокристаллическими алюминидными сплавами. *Вестник Гомельского государственного технического университета имени П. О. Сухого*. 2009;1:21–24.
- Roehling JD, Coughlin DR, Gibbs JW, Baldwin JK, Mertens JCE, Campbell GH, et al. Rapid solidification growth mode transitions in Al-Si alloys by dynamic transmission electron microscopy. *Acta Materialia*. 2017;131:22–30. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.03.061.
- Li JH, Zarif MZ, Albu M, McKay BJ, Hofer F, Schumacher P. Nucleation kinetics of entrained eutectic Si in Al-Si alloys. *Acta Materialia*. 2014;72:80–98. DOI: 10.1016/j.actamat.2014.03.030.
- Alexandrov DV, Galenko PK. Selected mode for rapidly growing needle-like dendrite controlled by heat and mass transport. *Acta Materialia*. 2017;137:64–70. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.07.022.
- Шепелевич ВГ, Гусакова ОВ, Щербаченко ЛП. Структура и свойства быстрозатвердевших фольг сплава Sn – 58 ат. % Bi. *Неорганические материалы*. 2013;49(7):709–713. DOI: 10.7868/S0002337X13060122.
- Rios CT, Santos S, Botta WJ, Bolfarini C. Microstructural characterization of As-quenched and heat treated Al-Si-Mg melt-spun ribbons. *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials*. 2004;22:103–108. DOI: 10.4028/www.scientific.net/JMN.22.103.
- Uzun O, Karaaslan T, Keskin M. Production and structure of rapidly solidified Al-Si alloys. *Turkish Journal of Physics*. 2001; 25:455–466.

17. Bendijk A, Delhez R, Katgerman L, De Keijser ThH, Mittemeijer EJ, Van Der Pers NM. Characterization of Al-Si-alloys rapidly quenched from the melt. *Journal of Materials Science*. 1980;15(11):2803–2810. DOI: 10.1007/BF00550549.
18. Белов НА, Савченко СИ, Хван АВ. Фазовый состав и структура силуминов. Москва: МИСиС; 2007.
19. Гулдстейн Дж, Якович Х, редакторы. Практическая растровая электронная микроскопия. Петров ВИ, переводчик. Москва: Мир; 1978. 656 с.
20. Kiv AE, Fuks D, Moiseenko NV, Solovyov VN. Silicon-Aluminum Bonding in Al Alloys. *Computer Modelling and New Technologies*. 2002;6(1):47–50.

References

1. Haizhi Ye. An overview of the development of Al-Si-Alloy Based Material for Engine Applications Haizhi. *Journal of Materials Engineering and Performance*. 2003;12(3):288–297. DOI: 10.1361/105994903770343132.
2. Francisco C. Robles-Hernandez, Jose Martin Herrera Ramirez, Mackay R. *Al-Si alloys automotive, aeronautical, and aerospace applications*. [Place unknown]: Springer; 2017. DOI: 10.1007/978-3-319-58380-8.
3. Darlapudi A, McDonald SD, Terzi S, Prasad A, Felberbaum M, Stjohn DH. The influence of ternary alloying elements on the Al-Si eutectic microstructure and the Si morphology. *Journal of Crystal Growth*. 2016;433:63–73. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2015.10.002.
4. Wenyi L, Wenlong X, Cong X, Maowen L, Chaoli M. Synergistic effects of Gd and Zr on grain refinement and eutectic Si modification of Al-Si cast alloy. *Materials Science and Engineering A*. 2017;693:93–100. DOI: 10.1016/j.msea.2017.03.097.
5. Li JH, Wang XD, Ludwig TH, Tsunekawa Y, Arnberg L, Jiang JZ, et al. Modification of eutectic Si in Al-Si alloys with Eu addition. *Acta Materialia*. 2015;84:153–163. DOI: 10.1016/j.actamat.2014.10.064.
6. Volochko AT. Modification of eutectic and primary particles of silicon in silumins. Development prospects. *Lit'e i metallurgiya*. 2015;4(81):38–44. Russian.
7. Kaiqi H, Xia M, Tong G, Qingfei X, Zhao Q, Yuying W, Xiangfa L, et al. Morphological transformation mechanism of eutectic Si phases in Al-Si alloys by nano-AlNp. *Journal of Alloys and Compounds*. 2018;765:113–120. DOI: 10.1016/j.jallcom.2018.06.223.
8. Wang K, Jiang HY, Wang QD, Ye B, Ding WJ. Nanoparticle-induced nucleation of eutectic silicon in hypoeutectic Al-Si alloy. *Materials Characterization*. 2016;117:41–46. DOI: 10.1016/j.matchar.2016.04.016.
9. Marukovich EI, Stetsenko VYu. *Modifitsirovanie splavov* [Modification of alloys]. Minsk: Belaruskaja navuka; 2009. 192 p. Russian.
10. Stetsenko VYu, Rivkin AI, Gutev AP, Konovalov RV. [Modification of silumin by fine-crystalline aluminum alloys]. *Vestnik Gomel'skogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta imeni P. O. Sukhogo*. 2009;1:21–24. Russian.
11. Roehling JD, Coughlin DR, Gibbs JW, Baldwin JK, Mertens JCE, Campbell GH, et al. Rapid solidification growth mode transitions in Al-Si alloys by dynamic transmission electron microscopy. *Acta Materialia*. 2017;131:22–30. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.03.061.
12. Li JH, Zarif MZ, Albu M, McKay BJ, Hofer F, Schumacher P. Nucleation kinetics of entrained eutectic Si in Al-5Si alloys. *Acta Materialia*. 2014;72:80–98. DOI: 10.1016/j.actamat.2014.03.030.
13. Alexandrov DV, Galenko PK. Selected mode for rapidly growing needle-like dendrite controlled by heat and mass transport. *Acta Materialia*. 2017;137:64–70. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.07.022.
14. Shepelevich VG, Gusakova OV, Shcherbachenko LP. Structure and properties of rapidly solidified Sn – 58 wt. % Bi foils. *Neorganicheskie materialy*. 2013;49(7):709–713. DOI: 10.7868/S0002337X13060122.
15. Rios CT, Santos S, Botta WJ, Bolfarini C. Microstructural characterization of As-quenched and heat treated Al-Si-Mg melt-spun ribbons. *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials*. 2004;22:103–108. DOI: 10.4028/www.scientific.net/JMN.22.103.
16. Uzun O, Karaaslan T, Keskin M. Production and structure of rapidly solidified Al-Si alloys. *Turkish Journal of Physics*. 2001; 25:455–466.
17. Bendijk A, Delhez R, Katgerman L, De Keijser ThH, Mittemeijer EJ, Van Der Pers NM. Characterization of Al-Si-alloys rapidly quenched from the melt. *Journal of Materials Science*. 1980;15(11):2803–2810. DOI: 10.1007/BF00550549.
18. Белов НА, Савченко СИ, Хван АВ. *Fazovyi sostav i struktura siluminov* [Phase composition and structure of silumins]. Moscow: MISiS; 2007. Russian.
19. Goldstein JJ, Yakowitz H, editors. *Practical scanning electron microscopy*. Boston: Springer; 1975. 581 p. DOI: 10.1007/978-1-4613-4422-3.
Russian edition: Goldstein J, Yakowitz H, editors. *Prakticheskaya rastrovaya elektronnaya mikroskopiya*. Petrov VI, translator. Moscow: Mir; 1978. 656 p. Russian.
20. Kiv AE, Fuks D, Moiseenko NV, Solovyov VN. Silicon-Aluminum Bonding in Al Alloys. *Computer Modelling and New Technologies*. 2002;6(1):47–50.

Статья поступила в редколлегию 26.03.2019.
Received by editorial board 26.03.2019.

УДК 539.23;539.216.1

МИКРОСТРУКТУРА И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ МНОГОСЛОЙНЫХ ПОКРЫТИЙ ZrN/SiN_x , СФОРМИРОВАННЫХ МЕТОДОМ РЕАКТИВНОГО МАГНЕТРОННОГО ОСАЖДЕНИЯ

В. В. УГЛОВ¹⁾, С. В. ЗЛОЦКИЙ¹⁾, И. А. СОЛОДУХИН¹⁾, А. А. МАЛАСHEВИЧ¹⁾

¹⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

В работе исследованы микроструктура и фазовый состав многослойных наноразмерных покрытий ZrN/SiN_x с различными толщинами отдельных слоев ZrN и SiN_x . С помощью просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения установлено, что исследуемые покрытия, сформированные методом реактивного магнетронного осаждения, представляют собой чередующиеся слои ZrN и SiN_x . Метод рентгеновской рефлектометрии позволил определить плотность, толщину, а также шероховатость поверхности отдельных слоев ZrN и SiN_x . Рентгеноструктурный анализ показал, что слои ZrN и SiN_x обладают кристаллической и аморфной структурой соответственно. Фазовый состав моонитридных покрытий ZrN характеризуется наличием фазы ZrN с преимущественной ориентацией (111). Результаты исследований фазового состава указывают на изменение преимущественной ориентации от (111), наблюдаемой для моонитридной пленки ZrN , к (200), которая образуется при формировании многослойных покрытий ZrN/SiN_x .

Ключевые слова: многослойные покрытия; микроструктура; фазовый состав; реактивное магнетронное осаждение.

MICROSTRUCTURE AND PHASE COMPOSITION OF ZrN/SiN_x MULTILAYERED COATINGS FORMED BY REACTIVE MAGNETRON DEPOSITION

V. V. UGLOV^a, S. V. ZLOTSKI^a, I. A. SOLODUKHIN^a, A. A. MALASHEVICH^a

^aBelarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus

Corresponding author: A. A. Malashevich (malashevich@bsu.by)

In the present work, the microstructure and phase composition of multilayered nanoscaled ZrN/SiN_x coatings with different thicknesses of individual ZrN and SiN_x layers were investigated. The results of transmission electron microscopy (HRTEM) showed that multilayer ZrN/SiN_x coatings formed by reactive magnetron deposition are alternating layers of

Образец цитирования:

Углов ВВ, Злоцкий СВ, Солодухин ИА, Малашевич АА. Микроструктура и фазовый состав многослойных покрытий ZrN/SiN_x , сформированных методом реактивного магнетронного осаждения. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2019;2:105–111. <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-105-111>

For citation:

Uglov VV, Zlotski SV, Solodukhin IA, Malashevich AA. Microstructure and phase composition of ZrN/SiN_x multilayered coatings formed by reactive magnetron deposition. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2019;2:105–111. Russian. <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-105-111>

Авторы:

Владимир Васильевич Углов – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой физики твердого тела физического факультета.

Сергей Владимирович Злоцкий – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории физики ионно-плазменной модификации твердых тел кафедры физики твердого тела физического факультета.

Игорь Анатольевич Солодухин – кандидат физико-математических наук, доцент; заместитель декана физического факультета.

Александр Анатольевич Малашевич – аспирант кафедры физики твердого тела физического факультета. Научный руководитель – В. В. Углов.

Authors:

Vladimir V. Uglov, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of solid-state physics, faculty of physics.

uglov@bsu.by

Sergey V. Zlotski, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the research laboratory of physics of ion-plasma modification of solids, department of solid-state physics, faculty of physics.

zlotski@bsu.by

Igor A. Solodukhin, PhD (physics and mathematics), docent; deputy dean at the faculty of physics.

solodukhin@bsu.by

Alexander A. Malashevich, postgraduate student at the department of solid-state physics, faculty of physics.

malashevich@bsu.by

ZrN and SiN_x. The X-ray reflectometry (XRR) method made it possible to determine the density, thickness, and surface roughness of individual ZrN and SiN_x layers. X-ray diffraction analysis showed that ZrN and SiN_x layers have a crystalline and amorphous structure, respectively. The phase composition of mononitride ZrN coatings is characterized by the presence ZrN phase with preferential orientation (111). Phase composition results indicate a change in the preferential orientation from (111) observed for the mononitride ZrN films, to (200) forming in the multilayered ZrN/SiN_x coatings.

Keywords: multilayered coatings; microstructure; phase composition; reactive magnetron deposition.

Введение

Тонкие пленки на основе нитридов переходных металлов интенсивно используются в качестве защитных покрытий благодаря их высокой твердости, износостойкости и коррозионной стойкости, химической и термической стабильности, низкому коэффициенту трения [1–5]. Функциональные свойства таких покрытий также востребованы в микроэлектронике и оптике. Изначально в качестве защитных пленок применялись покрытия на основе чистых переходных металлов (чаще всего Ti, Cr, Zr, Al), а также их нитридов (MeN). Однако для дальнейшего улучшения свойств покрытий на основе нитридов были разработаны более сложные системы: многокомпонентные пленки (Ti – Ta – N, Ti – Zr – N, Ti – Nb – N, Ti – Mo – N), нанокмозиты и многослойные наноструктуры.

В настоящее время проводится широкий спектр исследований, связанных с изучением структуры и функциональных свойств многослойных наноразмерных покрытий на основе переходных металлов и их нитридов (Me/Me, Me/MeN, MeN/MeN).

В [6–9] изучены многослойные наноразмерные металлические покрытия, обладающие структурой Me/Me (Au/Ni, Ni/Mo, Ti/Fe, Ti/W). Данные работы посвящены исследованию термической стабильности, а также зависимости напряжений в металлических слоях от глубины их расположения в условиях радиационной и термической обработки. В [7] показано, что в результате отжига многослойного покрытия Au/Ni происходит образование метастабильных фаз Au_{1-x}Ni_x при температурах выше 230 °С, что свидетельствует о невысокой термической стабильности данных структур.

Также существует ряд работ, в которых изучаются многослойные покрытия со структурой Me/MeN, MeN/MeN (Cu/TiN, Cr/CrN, TiN/MoN, ZrN/CrN, TiN/CrN, TiN/NbN, TiN/TaN), представляющие большой научный и практический интерес [10–12]. Результаты исследований [12], посвященные сравнительному анализу стойкости к окислению многослойных нитридных (TiN/CrN) и монослойных (TiN) покрытий, указывают на повышенную стойкость к окислению первых. Образцы с указанными выше покрытиями отжигались в атмосфере кислорода при температуре 850 °С в течение 1 ч, затем измерялся их привес массы. Величина прироста массы образца с многослойным покрытием TiN/CrN была на порядок меньше, чем для образца с монослойным покрытием TiN, что указывает на более высокую стойкость многослойных покрытий к окислению.

Одним из перспективных направлений современного материаловедения является разработка многослойных нитридных покрытий, устойчивых к радиационному воздействию, которые могли бы использоваться в качестве защитных для ответственных узлов ядерных энергетических установок (ЯЭУ). Данное направление имеет важное значение наряду с созданием конструкционных материалов для ЯЭУ 4-го поколения, например дисперсно-упрочненных сталей.

Радиационное воздействие, возникающее в процессе эксплуатации ЯЭУ, приводит к формированию различных видов повреждений (охрупчивание, порообразование, блистеринг, ползучесть и т. д.), которые способствуют разрушению материалов. В связи с этим востребованы технологии улучшения свойств защитных покрытий. Известно, что наличие границ раздела в многослойных покрытиях, действующих как эффективные стоки радиационных точечных дефектов, позволяет существенно улучшить радиационную стойкость материала.

Настоящее исследование посвящено изучению микроструктуры и фазового состава полученных в процессе реактивного магнетронного осаждения многослойных наноразмерных покрытий ZrN/SiN_x, в которых слои ZrN и SiN_x представляют собой кристаллическую и аморфную фазы соответственно. Подобного рода многослойные структуры на основе кристаллических и аморфных слоев, в отличие от упомянутых ранее систем Me/Me, Me/MeN, MeN/MeN, в настоящее время недостаточно изучены и представляют интерес для их практического применения в качестве защитных покрытий в условиях высоких радиационных нагрузок (высокие дозы и энергии).

Методика эксперимента

Многослойные покрытия ZrN/SiN_x с различными толщинами индивидуальных слоев получались методом магнетронного осаждения в вакуумной камере (базовое давление менее 10⁻⁵ Па), оборудованной двумя катодами (Zr, Si₃N₄) и криогенным насосом (максимальная скорость откачки 500 л/с). Пленки

осаждались при температуре 300 °С на подложки монокристаллического Si (100) с термически выращенным слоем SiO₂ толщиной 10 нм. В процессе осаждения к подложке прикладывали постоянное напряжение смещения –60 В. Подложка вращалась со скоростью 15 об/мин в течение всего процесса, чтобы обеспечить равномерную толщину покрытия.

Водоохлаждаемые мишени Zr (чистота 99,92 вес. %) и Si₃N₄ (чистота 99,99 вес. %) диаметром 7,62 см располагались на расстоянии 18 см от держателя подложки. Осаждение покрытий происходило в атмосфере Ar + N₂. Мишень Zr расплывалась в режиме несбалансированной конфигурации магнитного поля с использованием источника постоянного тока, в то время как для мишени Si₃N₄ высокочастотный источник питания имел сбалансированный режим. Особое внимание уделялось контролю состояния поверхности объекта перед началом осаждения с использованием многоэтапной процедуры очистки мишени. Периодический рост многослойных покрытий ZrN/SiN_x контролировался с помощью пневматической заслонки, расположенной на расстоянии 2 см от каждой мишени. Парциальное давление N₂ измерялось и контролировалось во время осаждения с помощью масс-спектрометра MKS Microvision. Последовательное осаждение слоев включало в себя процесс выдержки после окончания осаждения слоя SiN_x, необходимый для откачки избыточного газа N₂ и перехода в режим распыления металлической мишени Zr. Параметры осаждения исследуемых пленок представлены в табл. 1.

Таблица 1

Параметры осаждения и элементный состав монослойных покрытий ZrN и Si₃N₄

Table 1

Deposition parameters and element composition of mononitride ZrN and Si₃N₄ coatings

Образец	Мощность, Вт	Потоки Ar/N ₂ , см ³ /мин	Рабочее давление, Па	Парциальное давление N ₂ , Па	Скорость осаждения, нм/с	Zr, ат. %	Si, ат. %	N, ат. %
ZrN	300	10,0/0,5	0,20	4,6 · 10 ⁻³	0,178	46,6	–	53,4
Si ₃ N ₄	176	10,0/1,0	0,22	2,4 · 10 ⁻²	0,029	–	43,3	56,7

Толщина, массовая плотность, шероховатость индивидуальных слоев ZrN и SiN_x были найдены методом рентгеновской рефлектометрии (XRR) на дифрактометре Seifert XRD 3000 с использованием медного излучения (CuK_{α1}, λ = 0,15406 нм).

Элементный состав монослойных пленок ZrN и Si₃N₄ определялся на рентгеновском волновом спектрометре WDS компании Oxford Instruments (Англия).

Микроструктура осажденных многослойных покрытий исследовалась с применением просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения (HRTEM) с использованием микроскопа JEOL JEM 2100, работающего при ускоряющем напряжении 200 кВ. Образцы для анализа с помощью HRTEM готовили по методике сфокусированного ионного пучка (FIB) на приборе FEI Helios Nanolab 650.

Фазовый состав пленок определялся методом рентгеновской дифракции на дифрактометре Ultima IV Rigaku, работающем в геометрии параллельного луча с использованием медного излучения (CuK_α, λ = 0,15418 нм).

Результаты и их обсуждение

Оптимальные параметры процесса реактивного магнетронного осаждения стехиометрических монослойных ZrN и Si₃N₄ выбирались на основании ранее проводимых исследований [13–14]. Данные параметры, а также результаты элементного состава двух монослойных пленок, полученные с помощью WDS, приведены в табл. 1. Парциальные давления N₂, необходимые для достижения желаемого состава азота в монослойных покрытиях ZrN и Si₃N₄, отличаются на один порядок между собой. Это связано с несколькими факторами, влияющими на процесс реактивного магнетронного осаждения, одним из которых является использование однокомпонентной металлической (Zr) и сложной (Si₃N₄) мишеней. Данные различия в процессе роста слоев ZrN и SiN_x должны быть строго учтены в целях минимизации эффекта «отравления» металлической мишени во время реактивного распыления мишени [15]. Известно, что применение различных источников питания (постоянного и высокочастотного) также обуславливает необходимость использования разных потоков газа N₂ [15]. В связи с этим избыток N₂ откачивался в течение 15 с после каждого последовательного осаждения слоя SiN_x.

Структурные параметры многослойных покрытий ZrN/SiN_x, полученных в процессе реактивного магнетронного осаждения, определялись методом XRR. На рис. 1 представлены экспериментальные XRR-спектры для многослойных покрытий ZrN/SiN_x с различными толщинами индивидуальных слоев, а также соответствующие им оптимальные спектры, рассчитанные в результате компьютерного моделирования на основании теории Парратта [16].

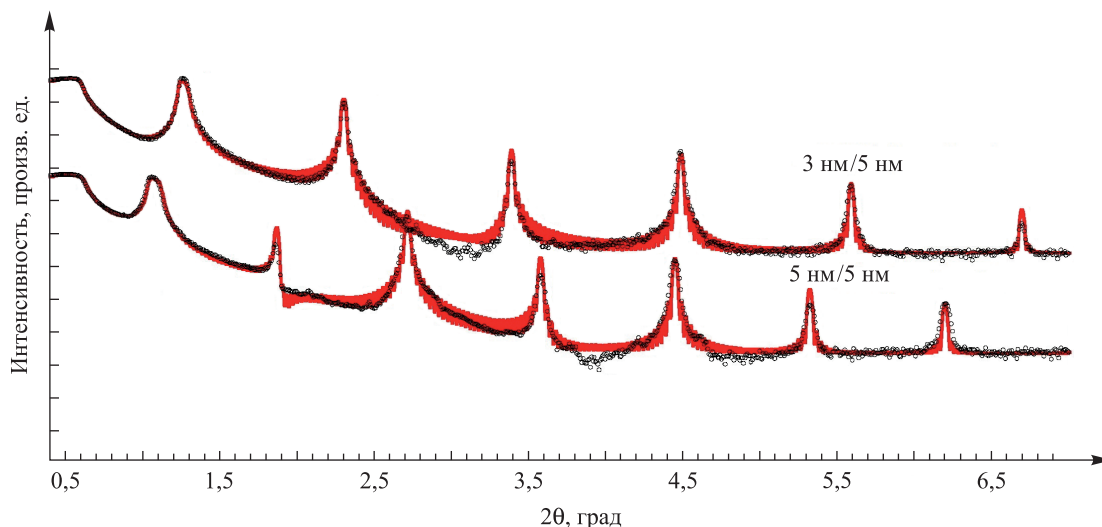


Рис. 1. Экспериментальные XRR-спектры многослойных покрытий ZrN/SiN_x с различным соотношением толщин слоев ZrN и SiN_x (темная линия), а также спектры, полученные в результате моделирования (красная линия) [17]

Fig. 1. Experimental XRR spectra of multilayered ZrN/SiN_x coatings with different thicknesses of ZrN and SiN_x layers (dark line), as well as spectra obtained as a result of modeling (red line) [17]

Анализ XRR-данных с помощью имитационной модели позволяет определить плотность ρ , толщину h , а также шероховатость w поверхности осажденного слоя (табл. 2).

Таблица 2

Параметры многослойных покрытий ZrN/SiN_x, определенные методом XRR

Table 2

Parameters of the multilayered ZrN/SiN_x coatings, defined by the XRR method

ZrN/SiN _x	ZrN			SiN _x			Доля слоя ZrN	Общая толщина пленки, нм
	h , нм	ρ , г/см ³	w , нм	h , нм	ρ , г/см ³	w , нм		
40 нм/5 нм	36,3	7,5	1,2	5,3	3,1	0,6	0,87	248
20 нм/5 нм	17,0	7,5	0,6	5,3	3,1	0,5	0,76	268
10 нм/5 нм	7,9	7,5	–	5,3	3,1	–	0,60	251
5 нм/5 нм	3,7	7,3	0,4	5,3	3,1	0,6	0,41	261
3 нм/5 нм	2,8	7,5	0,4	5,2	3,1	0,6	0,35	304
2 нм/5 нм	1,6	7,4	0,6	5,0	3,0	0,6	0,24	284

Как видно из табл. 2, границы раздела фаз ZrN и SiN_x обладают низкой шероховатостью (~0,4–0,6 нм). Массовая плотность слоев ZrN находится в диапазоне 7,3–7,5 г/см³, что свидетельствует о формировании плотных слоев (плотность объемного ZrN составляет 7,09 г/см³ [1]) даже при самых низких толщинах ZrN. Значения массовой плотности слоев SiN_x варьируются между 3,0 и 3,1 г/см³, что немного ниже значения, соответствующего кристаллической фазе α -Si₃N₄ (3,20 г/см³).

С целью выявить особенности микроструктуры, а также подтвердить результаты XRR выполнено прямое наблюдение поперечных сечений многослойных покрытий ZrN/SiN_x с различными толщинами слоев с помощью HRTEM.

В качестве примера на рис. 2 приведены поперечные сечения покрытий ZrN/SiN_x (2 нм/5 нм и 5 нм/5 нм). Отдельные слои ZrN и SiN_x четко различимы и имеют значительный цветовой контраст из-за большого различия в массовой плотности данных слоев (значения ρ см. в табл. 2). HRTEM-изображения указывают на образование сплошных слоев с плоскими границами раздела. Также подтверждается тот факт, что толщина отдельных слоев ZrN и SiN_x постоянна и не зависит от глубины их расположения. Толщины слоев 1,7 нм/4,9 нм и 3,9 нм/5,2 нм были получены из HRTEM-изображений

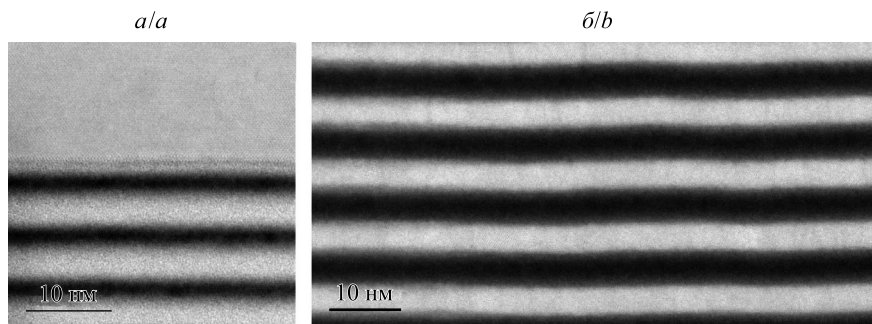


Рис. 2. HRTEM-изображения поперечных сечений многослойных покрытий ZrN/SiN_x: а – 2 нм/5 нм; б – 5 нм/5 нм

Fig. 2. HRTEM-images of cross sections of multilayered coatings ZrN/SiN_x: а – 2 nm/5 nm; б – 5 nm/5 nm

для многослойных покрытий ZrN/SiN_x – 2 нм/5 нм и 5 нм/5 нм соответственно, что достаточно хорошо согласуется со значениями, определенными с помощью XRR-анализа (см. табл. 2).

Результаты рентгеноструктурного анализа монокристаллических ZrN и многослойных покрытий ZrN/SiN_x с различными толщинами индивидуальных слоев представлены на рис. 3. Из дифрактограмм видно, что монокристаллическое покрытие ZrN обладает кристаллической структурой. Присутствующие дифракционные максимумы соответствуют фазе ZrN (ГЦК) с ориентацией (111) и (200). Полученные данные указывают на изменение преимущественной ориентации от (111), наблюдаемой для монокристаллической пленки ZrN, к (200), которая образуется при формировании многослойных покрытий ZrN/SiN_x.

В работе [18] показана зависимость преимущественной ориентации монокристаллического TiN с ГЦК-решеткой (как и ZrN) от соотношения поверхностной энергии S_{hkl} и энергии деформации U_{hkl} . Из расчетов, проведенных в указанной работе, следует, что значения поверхностной энергии и энергии деформации пленок TiN зависят от направления, а именно: $S_{111} > S_{220} > S_{200}$ и $U_{200} > U_{220} > U_{111}$. На основании данного неравенства можно сделать вывод, что направления роста (200) и (111) являются наиболее энергетически выгодными, поскольку обеспечивают минимизацию поверхностной энергии и энергии деформации соответственно. Поверхностная энергия не зависит от толщины пленки, а энергия деформации увеличивается при ее росте. Поэтому при малых толщинах пленки вклад поверхностной энергии является значительным и ориентация (200) с минимальной поверхностной энергией – предпочтительной. При большой толщине пленки разность энергий деформации между различными плоскостями решетки становится доминирующей и, наряду с (200), наблюдается предпочтительная ориентация (111).

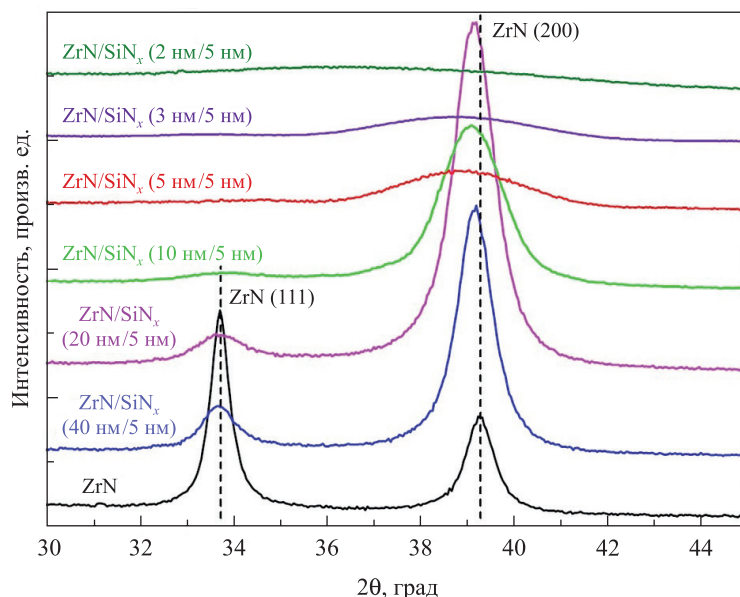


Рис. 3. Дифрактограммы монокристаллического покрытия ZrN и многослойных покрытий ZrN/SiN_x

Fig. 3. XRD patterns of ZrN mononitride and ZrN/SiN_x multilayered coatings

Отсутствие дифракционных максимумов, соответствующих фазе Si_3N_4 на дифрактограммах многослойных покрытий ZrN/SiN_x , говорит о рентгеноаморфной природе слоев SiN_x .

Было обнаружено, что уменьшение толщины индивидуальных слоев ZrN приводит к уширению дифракционного максимума ZrN (200). В целях выяснения причин данного явления оценивались размеры областей когерентного рассеяния (ОКР) кристаллической фазы ZrN по ширине дифракционного максимума ZrN (200) на полувысоте с использованием формулы Шеррера (табл. 3).

Таблица 3

Результаты расчетов размеров ОКР кристаллической фазы ZrN (200) и толщины индивидуальных слоев ZrN

Table 3

The calculation results of ZrN (200) coherent scattering region and the thickness of the individual ZrN layers

ZrN/SiN_x	Размер ОКР, нм	Толщина слоя ZrN , нм	Ширина дифракционного максимума на полувысоте, град
40 нм/5 нм	10,8	36,3	0,86
20 нм/5 нм	9,1	17,0	0,98
10 нм/5 нм	6,1	7,9	1,53
5 нм/5 нм	3,4	3,7	2,76
3 нм/5 нм	2,7	2,8	3,56
2 нм/5 нм	1,5	1,6	6,46

Примечание. Толщины индивидуальных слоев ZrN определены с помощью XRR.

Как следует из табл. 3, наблюдаемое уширение пика сопровождается утоньшением кристаллического слоя ZrN , вероятнее всего связанным с уменьшением размера ОКР фазы ZrN . Стоит отметить, что рассчитанные размеры ОКР фазы ZrN хорошо согласуются со значениями толщины индивидуального слоя ZrN (при толщинах меньше 10 нм), и это свидетельствует о формировании столбчатой структуры, размер зерен в которой равен толщине данного слоя, что также было подтверждено результатами просвечивающей электронной микроскопии.

Заключение

Исследованы микроструктура и фазовый состав многослойных покрытий ZrN/SiN_x с различными толщинами индивидуальных слоев ZrN и SiN_x (40 нм/5 нм, 20 нм/5 нм, 10 нм/5 нм, 5 нм/5 нм, 3 нм/5 нм, 2 нм/5 нм). Установлено, что границы раздела слоев ZrN и SiN_x обладают низкой шероховатостью (~0,4–0,6 нм), формируются плотные слои ZrN плотностью 7,3–7,5 г/см³ (для объемного ZrN $\rho = 7,09$ г/см³), значения массовой плотности слоев SiN_x варьируются между 3,0 и 3,1 г/см³ (для $\alpha\text{-Si}_3\text{N}_4$ $\rho = 3,20$ г/см³). Результаты HRTEM указывают на образование сплошных слоев ZrN и SiN_x с плоскими границами раздела. Толщина формируемых слоев постоянна и не зависит от глубины их расположения. Рентгеноструктурный анализ указывает на изменение преимущественной ориентации от (111) к (200) – первая наблюдается для монослойной пленки ZrN , вторая образуется при формировании многослойных покрытий ZrN/SiN_x .

Библиографические ссылки

1. Arias DF, Arango YC, Devia A. Study of TiN and ZrN thin films grown by cathodic arc technique. *Applied Surface Science*. 2006;253(4):1683–1690. DOI: 10.1016/j.apsusc.2006.03.017.
2. Lin J, Moore JJ, Sproul WD, Brajendra M, Zhili W, Jun W. The structure and properties of chromium nitride coatings deposited using dc, pulsed dc and modulated pulse power magnetron sputtering. *Surface and Coatings Technology*. 2010;204(14):2230–2239. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2009.12.013.
3. Klumdong P, Chaiyakun S, Limsuwan P. Deposition of zirconium nitride thin films produced by reactive DC magnetron sputtering. *Asian Journal on Energy and Environment*. 2010;11(01):60–68.
4. Ramana JV, Kumar S, David C, Ray AK, Raju VS. Characterization of zirconium nitride coatings prepared by DC magnetron sputtering. *Materials Letter*. 2000;43(1–2):73–76.
5. Yang Q, Zhao LR, Patnaik PC, Zeng XT. Wear resistant TiMoN coatings deposited by magnetron sputtering. *Wear*. 2006;261(2):119–125. DOI: 10.1016/j.wear.2005.07.008.
6. Abadias G, Jaouen C, Martin F, Pacaud J, Djemia Ph, Ganot F. Experimental evidence for the role of supersaturated interfacial alloys on the shear elastic softening of Ni/Mo superlattices. *Physical Review B*. 2002;65:45–57. DOI: 10.1103/PhysRevB.65.212105.
7. Bayle-Guillemaud P, Dressler C, Abadias G, Thibault J. Structural evolution of Au(001)/Ni MBE thin films and $\text{Au}_{1-c}\text{Ni}_c$ solid solutions with temperature: a HREM study. *Thin Solid Films*. 1998;318(1–2):209–214. DOI: 10.1016/S0040-6090(97)01167-X.
8. Wan L, Thompson G. Influence of Fe underlayers on stress evolution of Ti in Ti/Fe multilayers. *Journal of Vacuum Science and Technology A*. 2016;34(6):061501-1–061501-7. DOI: 10.1116/1.4962291.

9. Wan L, Yu X, Zhou X, Thompson G. Interrelationship of *in situ* growth stress evolution and phase transformations in Ti/W multilayered thin films. *Journal of Applied Physics*. 2016;119(24):245302. DOI: 10.1063/1.4954687.
10. Maksakova OV, Pogrebnyak AD, Simoës S. Morphology, Structure and Thermal Properties of Multilayer ZrN/CrN Coatings. In: *ELNANO. IEEE 38th International Conference on Electronics and Nanotechnology; 2018 April 24–26; Kiev, Ukraine*. Kiev: IEEE; 2018. p. 106–109. DOI: 10.1109/ELNANO.2018.8477488.
11. Nordin M, Larsson M, Hogmark S. Mechanical and tribological properties of multilayered PVD TiN/CrN, TiN/MoN, TiN/NbN and TiN/TaN coatings on cemented carbide. *Surface and Coatings Technology*. 1998;106(2):234–241. DOI: 10.1016/S0257-8972(98)00544-1.
12. Panjan P, Navinsek B, Cvelbar A, Zalar A, Milošev I. Oxidation of TiN, ZrN, TiZrN, CrN, TiCrN and TiN/CrN multilayered hard coatings reactively sputtered at low temperature. *Thin Solid Films*. 1996;281–282:298–301. DOI: 10.1016/0040-6090(96)08663-4.
13. Abadias G, Koutsokeras LE, Dub SN, Tolmachova GN, Debelle A, Sauvage T, et al. Reactive magnetron sputtering of hard and conductive ternary nitride thin films: Ti – Zr – N and Ti – Ta – N. *Journal of Vacuum Science and Technology*. 2010;28(4):541–551. DOI: 10.1116/1.3426296.
14. Simonot L, Babonneau D, Camelio S, Lantiat D, Guérin P, Lamongie B, et al. In situ optical spectroscopy during deposition of Ag:Si₃N₄ nanocomposite films by magnetron sputtering. *Thin Solid Films*. 2010;518:2637. DOI: 10.1016/j.tsf.2009.08.005.
15. Достанко АП, редактор. *Технологические процессы и системы в микроэлектронике: плазменные, электронно-ионно-лучевые, ультразвуковые*. Минск: Бестпринт; 2009. 199 с. Совместное издание с БГУИР.
16. Parratt LG. Surface studies of solids by total reflection of X-Rays. *Physical Review*. 1954;95(2):359–369. DOI: 10.1103/PhysRev.95.359.
17. Abadias G, Uglov VV, Saladukhin IA, Zlotski SV, Tolmachova G, Dub SN, et al. Growth, structural and mechanical properties of magnetron-sputtered ZrN/SiN_x nanolaminated coatings. *Surface and Coatings Technology*. 2016;308:158–167. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2016.06.099.
18. Zhao JP, Wang X, Chen ZY, Yang SQ, Shi TS, Liu XH. Overall energy model for preferred growth of TiN films during filtered arc deposition. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 1997;30(1):5–12.

References

1. Arias DF, Arango YC, Devia A. Study of TiN and ZrN thin films grown by cathodic arc technique. *Applied Surface Science*. 2006;253(4):1683–1690. DOI: 10.1016/j.apsusc.2006.03.017.
2. Lin J, Moore JJ, Sproul WD, Brajendra M, Zhili W, Jun W. The structure and properties of chromium nitride coatings deposited using dc, pulsed dc and modulated pulse power magnetron sputtering. *Surface and Coatings Technology*. 2010;204(14):2230–2239. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2009.12.013.
3. Klumdoung P, Chaiyakun S, Limsuwan P. Deposition of zirconium nitride thin films produced by reactive DC magnetron sputtering. *Asian Journal on Energy and Environment*. 2010;11(01):60–68.
4. Ramana JV, Kumar S, David C, Ray AK, Raju VS. Characterization of zirconium nitride coatings prepared by DC magnetron sputtering. *Materials Letter*. 2000;43(1–2):73–76.
5. Yang Q, Zhao LR, Patnaik PC, Zeng XT. Wear resistant TiMoN coatings deposited by magnetron sputtering. *Wear*. 2006;261(2):119–125. DOI: 10.1016/j.wear.2005.07.008.
6. Abadias G, Jaouen C, Martin F, Pacaud J, Djemia Ph, Ganot F. Experimental evidence for the role of supersaturated interfacial alloys on the shear elastic softening of Ni/Mo superlattices. *Physical Review B*. 2002;65:45–57. DOI: 10.1103/PhysRevB.65.212105.
7. Bayle-Guillemaud P, Dressler C, Abadias G, Thibault J. Structural evolution of Au(001)/Ni MBE thin films and Au_{1-x}Ni_x solid solutions with temperature: a HREM study. *Thin Solid Films*. 1998;318(1–2):209–214. DOI: 10.1016/S0040-6090(97)01167-X.
8. Wan L, Thompson G. Influence of Fe underlayers on stress evolution of Ti in Ti/Fe multilayers. *Journal of Vacuum Science and Technology A*. 2016;34(6):061501-1–061501-7. DOI: 10.1116/1.4962291.
9. Wan L, Yu X, Zhou X, Thompson G. Interrelationship of *in situ* growth stress evolution and phase transformations in Ti/W multilayered thin films. *Journal of Applied Physics*. 2016;119(24):245302. DOI: 10.1063/1.4954687.
10. Maksakova OV, Pogrebnyak AD, Simoës S. Morphology, Structure and Thermal Properties of Multilayer ZrN/CrN Coatings. In: *ELNANO. IEEE 38th International Conference on Electronics and Nanotechnology; 2018 April 24–26; Kiev, Ukraine*. Kiev: IEEE; 2018. p. 106–109. DOI: 10.1109/ELNANO.2018.8477488.
11. Nordin M, Larsson M, Hogmark S. Mechanical and tribological properties of multilayered PVD TiN/CrN, TiN/MoN, TiN/NbN and TiN/TaN coatings on cemented carbide. *Surface and Coatings Technology*. 1998;106(2):234–241. DOI: 10.1016/S0257-8972(98)00544-1.
12. Panjan P, Navinsek B, Cvelbar A, Zalar A, Milošev I. Oxidation of TiN, ZrN, TiZrN, CrN, TiCrN and TiN/CrN multilayered hard coatings reactively sputtered at low temperature. *Thin Solid Films*. 1996;281–282:298–301. DOI: 10.1016/0040-6090(96)08663-4.
13. Abadias G, Koutsokeras LE, Dub SN, Tolmachova GN, Debelle A, Sauvage T, et al. Reactive magnetron sputtering of hard and conductive ternary nitride thin films: Ti – Zr – N and Ti – Ta – N. *Journal of Vacuum Science and Technology*. 2010;28(4):541–551. DOI: 10.1116/1.3426296.
14. Simonot L, Babonneau D, Camelio S, Lantiat D, Guérin P, Lamongie B, et al. In situ optical spectroscopy during deposition of Ag:Si₃N₄ nanocomposite films by magnetron sputtering. *Thin Solid Films*. 2010;518:2637. DOI: 10.1016/j.tsf.2009.08.005.
15. Достанко АП, редактор. *Технологические процессы и системы в микроэлектронике: плазменные, электронно-ионно-лучевые, ультразвуковые* [Technological systems and processes in microelectronics: plasma, electron-ion-beam, ultrasonic]. Минск: Bestprint; 2009. 199 p. Co-published by the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics. Russian.
16. Parratt LG. Surface studies of solids by total reflection of X-Rays. *Physical Review*. 1954;95(2):359–369. DOI: 10.1103/PhysRev.95.359.
17. Abadias G, Uglov VV, Saladukhin IA, Zlotski SV, Tolmachova G, Dub SN, et al. Growth, structural and mechanical properties of magnetron-sputtered ZrN/SiN_x nanolaminated coatings. *Surface and Coatings Technology*. 2016;308:158–167. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2016.06.099.
18. Zhao JP, Wang X, Chen ZY, Yang SQ, Shi TS, Liu XH. Overall energy model for preferred growth of TiN films during filtered arc deposition. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 1997;30(1):5–12.

ВОЛОКОННАЯ ОПТИКА

FIBER OPTICS

УДК 621.372.8

ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИЙ ВОЛОКОННОГО СВЕТОВОДА НА ПЕРИОД РЕЦИРКУЛЯЦИИ В ОПТОЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ ОХРАНЫ ПЕРИМЕТРА

Д. Г. САХОНЧИК¹⁾, А. В. ПОЛЯКОВ¹⁾

¹⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

Описан алгоритм работы подземной волоконно-оптической системы охраны периметра рециркуляционного типа с использованием WDM-технологии спектрального разделения информационных каналов. Представлены экспериментальные значения поперечных деформаций волоконного световода в зависимости от твердости пенополиуретанового упругого основания, количества точек деформации и массы идущего или ползущего нарушителя. Разработана математическая модель изменения временных интервалов между циркулирующими импульсами в зависимости от величины деформаций волоконного световода. Данная модель позволяет рассчитать величину дополнительных потерь в зависимости от радиуса изгиба, угла изгиба, вероятности туннелирования излучения из сердцевины в оболочку, параметров самого кварцевого волокна, а также от твердости упругой основы чувствительного элемента и количества точек деформации. Показано, что в случае постоянного радиуса деформирующего элемента $R = 4$ мм и одномодового ступенчатого волоконного световода для идущего нарушителя возникающие дополнительные временные задержки периода рециркуляции составляют 1,1–1,7 нс, для ползущего нарушителя данная величина находится в пределах 0,3–0,9 нс.

Ключевые слова: оптоволоконная система; охрана периметра; период рециркуляции; деформация; потери в оптическом волокне; временная задержка.

Образец цитирования:

Сахончик ДГ, Поляков АВ. Влияние деформаций волоконного световода на период рециркуляции в оптоэлектронных системах охраны периметра. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2019;2:112–124. <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-112-124>

For citation:

Sakhonchik DG, Polyakov AV. Influence of the optical fiber deformations for a recirculation period in the optoelectronic perimeter security systems. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2019;2:112–124. Russian. <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-2-112-124>

Авторы:

Дмитрий Георгиевич Сахончик – студент факультета радиофизики и компьютерных технологий. Научный руководитель – А. В. Поляков.

Александр Владимирович Поляков – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры физики и аэрокосмических технологий факультета радиофизики и компьютерных технологий.

Authors:

Dmitrii G. Sakhonchik, student at the faculty of radiophysics and computer technologies.

dmitriium.saxon@yandex.by

Alexander V. Polyakov, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of physics and aerospace technologies, faculty of radiophysics and computer technologies.

polyakov@bsu.by

INFLUENCE OF THE OPTICAL FIBER DEFORMATIONS FOR A RECIRCULATION PERIOD IN THE OPTOELECTRONIC PERIMETER SECURITY SYSTEMS

D. G. SAKHONCHIK^a, A. V. POLYAKOV^a

^aBelarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus

Corresponding author: D. G. Sakhonchik (dmitrium.saxon@yandex.by)

The operation algorithm of the underground recirculation fiber optic system for perimeter protection using WDM-technology of spectral separation of information channels is described. The experimental results of the transverse deformation magnitude of an optical fiber depending on the hardness of the polyurethane foam elastic base, the number of deformation points and the mass of the walking or crawling intruder are presented. A mathematical model of changing time intervals between circulating pulses depending on the magnitude of optical fiber deformations has been developed. This model allows to calculate the value of additional losses depending on the bend radius, bend angle, probability of tunneling radiation from the core into the cladding, parameters of the quartz fiber itself, as well as on the hardness of the elastic base of the sensing element and the number of deformation points. It is shown that in the case of a constant radius of the deforming element $R = 4$ mm and a single-mode stepped optical fiber for a running intruder, additional time delays of the recirculation period occur 1.1–1.7 ns, for a crawling intruder, this value is within 0.3–0.9 ns.

Keywords: fiber optic system; perimeter security; recirculation period; deformation; optical fiber loss; time delays.

Введение

Цели любой охранной системы – раннее обнаружение опасного события, локализация его места, времени и характера, сигнализация о событии, его документирование, инициирование мер, препятствующих развитию события, и представление материалов для профилактики подобных событий в будущем. Система охраны периметра всегда является первым техническим рубежом защиты объекта, надежность и эффективность этого рубежа очень важна для раннего обнаружения нарушителя. Проблема охраны периметра представляет собой комплексную задачу, включающую электронные, оптические и визуальные методы контроля и наблюдения [1].

С развитием волоконной оптики и оптоэлектронных технологий в последнее время все большее внимание разработчиков привлекают волоконно-оптические системы охраны периметра. Предложены структуры, принцип действия которых основан на интерференционных методах, регистрации спекл-структуры, использовании волоконных решеток Брэгга [2–10]. К преимуществам волоконно-оптических систем можно отнести их невосприимчивость к воздействию электромагнитных помех, а также грозовых разрядов, что уменьшает вероятность ложной тревоги. Сенсорные кабели не излучают электромагнитной энергии, и их трудно обнаружить с помощью поисковой техники. Привлекательной особенностью систем является отсутствие на периметре активного электронного оборудования: это позволяет снизить расходы на монтаж и обслуживание охранной системы, а также использовать датчики на взрывоопасных объектах или под водой. К безальтернативным случаям применения волоконно-оптических технологий в сфере средств безопасности относятся варианты защиты объектов с протяженными периметрами, объектов со сложной электромагнитной обстановкой, объектов в зонах с повышенной грозовой активностью. Предложенные охранные системы предназначены в основном для размещения на наземных сетчатых упругих ограждениях. Вместе с тем многие производители проявляют интерес к созданию новых подземных охранных систем на основе волоконно-оптических сигнальных датчиков для защиты подходов к объектам или запретным зонам.

Структура подземной волоконно-оптической охранной системы рециркуляционного типа

При разработке подземных систем охраны периметра следует учитывать тот факт, что амплитуда и частота воздействий на волоконный световод (ВС) будут принципиально иными, чем при размещении оптического волокна на упругом сетчатом ограждении, поэтому требуются специальные методы и средства регистрации вторжения. Существующие волоконно-оптические датчики основаны, как правило, на измерении амплитуды зачастую маломощных оптических сигналов на фоне шумов. Для повышения разрешающей способности предложено перейти к частотному (временному) представлению измеряемой величины, использующему зависимость времени распространения оптических импульсов в замкнутом оптоволоконном контуре от действующих измеряемых физических величин.

Для определения в режиме реального времени места внешнего деформирующего воздействия на контролируемую поверхность и отслеживания перемещения нарушителя по этой поверхности была разработана структура волоконно-оптической подземной системы охраны периметра рециркуляционного типа (рис. 1) [11].

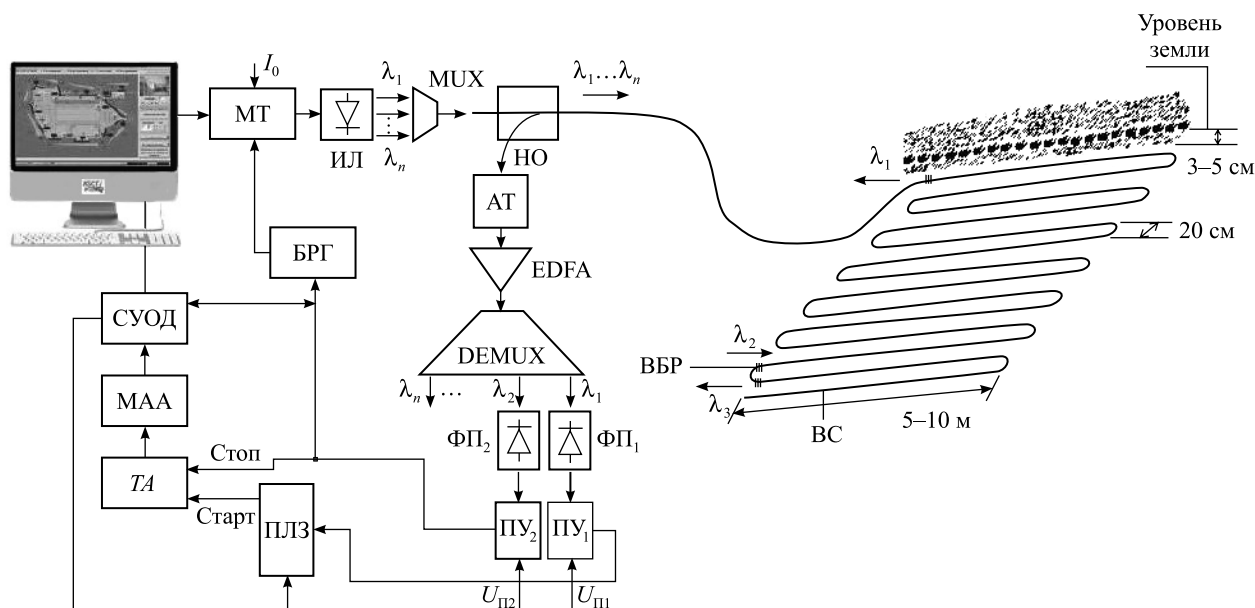


Рис. 1. Структура квазираспределенной системы охраны периметра на основе волоконно-оптического датчика рециркуляционного типа:

- MT – модулятор тока; ИЛ – набор полупроводниковых инжекционных лазеров;
- MUX – мультиплексор; НО – направленный ответвитель; АТ – аттенюатор;
- EDFA – эрбиевый волоконно-оптический усилитель; ВС – волоконный световод;
- ВБР – волоконные брэгговские решетки; DEMUX – демультиплексор; ФП – набор фотоприемников;
- ПУ – пороговое устройство; БРГ – блок регенерации; ПЛЗ – перестраиваемая линия задержки;
- ТА – времяамплитудный преобразователь; МAA – многоканальный амплитудный анализатор;
- СУОД – система управления и обработки данных

Fig. 1. Structure of a quasi-distributed perimeter security system based on a fiber optic recirculation sensor:

- MT – current modulator; ИЛ – a set of semiconductor injection lasers;
- MUX – multiplexer; НО – directional coupler; АТ – attenuator; EDFA – erbium fiber optic amplifier; ВС – optical fiber;
- ВБР – fiber Bragg gratings; DEMUX – demultiplexer; ФП – a set of photodetectors;
- ПУ – threshold device; БРГ – regeneration unit; ПЛЗ – tunable delay line; ТА – time-amplitude converter;
- МAA – multichannel amplitude analyzer; СУОД – data management and processing system

Принцип действия волоконно-оптических систем рециркуляционного типа основан на том, что при пересечении периметра нарушителем возникают дополнительные потери оптического излучения за счет поперечных деформаций ВС, что влечет за собой изменение периода рециркуляции оптических импульсов, которое регистрируется с помощью метода времяамплитудного преобразования [12]. Волоконный кабель разделен на секции с помощью спектрально-селективных отражателей, в качестве которых выступают волоконные брэгговские решетки (ВБР) с различными периодами, способные отражать излучения на разных длинах волн. Оптические импульсы, отражаясь от ВБР, расположенных в начале и конце измерительной секции, формируют старт- и стоп-импульсы для преобразователя время – амплитуда (ТА-преобразователь), а также через блок регенерации запускают новый цикл рециркуляции. Поступающие с ТА-преобразователя сигналы трансформируются в гистограммы распределения амплитуд сигналов с помощью многоканального амплитудного анализатора (МAA). Данные последнего обрабатываются электронным блоком (процессором), который в случае необходимости вырабатывает сигнал тревоги. Отслеживая характер смещения гистограмм распределения амплитуд, формируемых на разных длинах волн и соответствующих отдельным охраняемым секторам, по каналам МAA можно пространственно локализовать место нарушения и классифицировать характер этого нарушения (одиночный нарушитель или группа нарушителей). При параллельном опросе зон охраны такая технология позволяет обнаруживать одновременное вторжение на нескольких участках периметра.

Для волоконно-оптических подземных систем охраны периметра разработана конструкция чувствительных элементов, принцип действия которых основан на возникновении дополнительных потерь оптического излучения при деформации оптического волокна (рис. 2). ВС укладывается в виде параллельных

петель с шагом 20 см под поверхностью земли на глубине 3–5 см вдоль границы охраняемого периметра и маскируется защитным покрытием. Для обеспечения высокой и однородной чувствительности ВС укладывается на упругую основу и сверху накрывается каркасной георешеткой. Равномерная передача внешнего давления достигается за счет того, что данная решетка с крупной квадратной ячеистой структурой помещается посередине между соседними ВС и имеет пространственную частоту, равную пространственной частоте укладки световода. Пенополиуретановые полосы, являющиеся упругой основой, повторяют контур укладки ВС и имеют ширину 1,5 см и толщину 1,0–1,5 см. Ширина контролируемой территории, в зависимости от необходимых требований, может изменяться от 2,5 до 10,0 м с шагом 2,5 м.

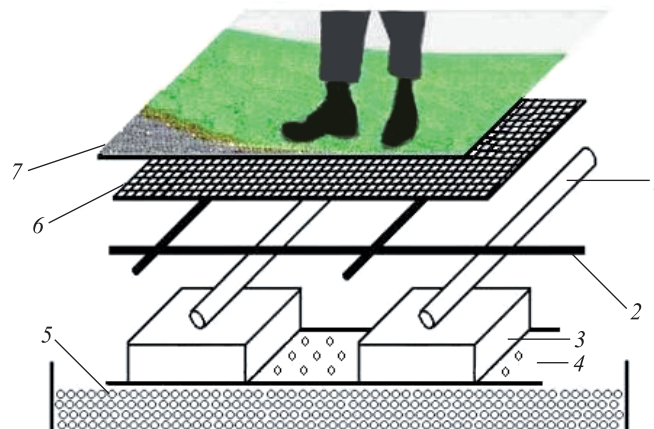


Рис. 2. Конструкция чувствительного элемента волоконно-оптической системы охраны периметра:
1 – волоконный световод; 2 – каркасная двуслойная жесткая экструдированная георешетка из полипропилена с крупной ячеистой структурой 20×20 см и диаметром трубки 8 мм;
3 – упругие пенополиуретановые элементы; 4 – перфорированный стеклопластик в качестве основы;
5 – гравийная подложка; 6 – стеклотканевое полотно с шагом плетения 1 мм; 7 – маскирующее покрытие

Fig. 2. The design of the sensitive element of the fiber optic perimeter security system:
1 – optical fiber; 2 – frame biaxial rigid extruded geogrid of polypropylene with a large cellular structure of 20×20 sm and tube diameter 8 mm;
3 – elastic polyurethane foam elements; 4 – perforated fiberglass as the base;
5 – gravel substrate; 6 – glass cloth with weaving steps 1 mm; 7 – masking coating

Для волоконно-оптических подземных систем охраны периметра на основе метода времяамплитудного преобразования с последующим формированием гистограмм распределения амплитуд сигналов с помощью МАА разработан алгоритм идентификации характера нарушения охраняемой территории [13]:

- пересекающим периметр нарушителем создаются поперечные деформации оптоволоконка;
- при деформации возникают потери мощности оптических импульсов и изменение показателя преломления сердцевины волокна;
- потери оптической мощности циркулирующих импульсов влекут изменение скорости нарастания фронта импульса и, как следствие, задержку времени срабатывания порогового устройства;
- временная задержка трансформируется в набор амплитуд с помощью ТА-преобразователя;
- набор амплитуд поступает в МАА, в котором каждому значению амплитуды соответствует свой канал анализатора;
- на выходе анализатора формируется гистограмма распределения амплитуд по каналам;
- по смещению гистограммы распределения классифицируется характер нарушения охраняемой территории.

В данной работе исследованы изменения периода рециркуляции под воздействием поперечных деформаций ВС при различных параметрах чувствительных элементов. Полученные результаты позволяют оценить эффективность использования метода времяамплитудного преобразования, предлагаемого для обнаружения нарушителей.

Математическая модель

Изменение временных интервалов между циркулирующими импульсами связано с увеличением оптических потерь в ВС из-за возникновения поперечных деформаций при нарушениях охраняемого периметра, что приводит к изменению скорости нарастания фронта импульса на входе порогового

устройства и, как следствие, появлению дополнительной задержки $\delta\tau$ во времени срабатывания при постоянном значении порога срабатывания (рис. 3). Из условия, что пороговый уровень компаратора соответствует линейному участку фронта импульса, следует соотношение

$$\tau = \frac{(U_{п} - 0,1U_{a0})\tau_{\phi}}{0,8U_{a0}}, \quad (1)$$

где τ – время задержки срабатывания порогового устройства, с; $U_{п}$ – значение порога срабатывания, В; τ_{ϕ} – линейный участок фронта импульса, с; U_{a0} – амплитуда импульса в отсутствие деформации ВС, В.

Амплитуда импульса на входе порогового устройства оценивается согласно выражению

$$U_{a0} = P_{ил} S_{лфд} R_{н} K_{п0} M G_{yc0}, \quad (2)$$

где $P_{ил}$ – пиковая оптическая мощность излучения импульсного полупроводникового лазерного источника, Вт; $S_{лфд}$ – спектральная чувствительность лавинного фотодиода, А/Вт; $R_{н}$ – сопротивление нагрузки фотодиода, Ом; $K_{п0}$ – коэффициент потерь в волоконно-оптическом тракте; M – коэффициент лавинного умножения лавинного фотодиода; G_{yc0} – коэффициент усиления волоконно-оптического эрбиевого усилителя.

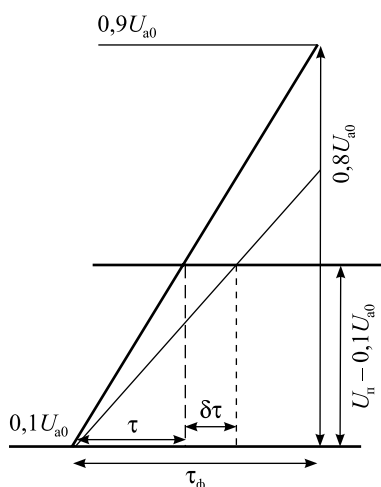


Рис. 3. Временная задержка при срабатывании порогового устройства

Fig. 3. Time delay when threshold device is operation

Величины измеряемых временных интервалов для одного контролируемого сектора в невозмущенном состоянии и при наличии нарушителя с учетом (1), (2) можно оценить исходя из следующих соотношений:

$$\Delta T_{0(1)} = \frac{2Ln_e \cdot 1000}{c} + \frac{(U_{п} - 0,1U_a)\tau_{\phi}}{0,8P_{ил} S_{лфд} R_{н} K_{п0(1)} M G_{yc0(1)}} + T_3, \quad (3)$$

$$K_{п0} = 10^{-0,1(\alpha_1 + \alpha_2 \cdot 2L)}, K_{п1} = 10^{-0,1(\alpha_1 + \alpha_2 \cdot 2L + \alpha_i)}, \quad (4)$$

$$\alpha_i = 2N_{1,2}\alpha_i^0, \quad (5)$$

где $\Delta T_{0(1)}$ – временной интервал для невозмущенного состояния (0) и при возникновении деформации (1) волокна, с; L – длина ВС, перекрывающего данный сектор, км; n_e – групповой эффективный показатель преломления сердцевины волокна; $K_{п0(1)}$ – коэффициент потерь для невозмущенного состояния (0) и при нарушении периметра (1); $G_{yc0(1)}$ – коэффициент усиления волоконно-оптического эрбиевого усилителя для исходной мощности оптических импульсов (0) и при возникновении потерь (1); T_3 – временная задержка в остальных оптоэлектронных компонентах системы, с; α_1 – потери на оптических элементах и соединениях в схеме, дБ; α_2 – потери оптической мощности в оптоволокне, дБ/км; α_i – результирующие потери в ВС за счет деформации, дБ; N_1 – число точек деформаций ВС для идущего человека, N_2 – число точек деформаций ВС для ползущего человека; α_i^0 – потери на одном изгибе, дБ.

Таким образом, возникающая временная задержка распространения оптического импульса на определенной длине волны равна

$$\delta\tau = \Delta T_1 - \Delta T_0. \quad (6)$$

Использовался малошумящий волоконно-оптический эрбиевый усилитель (EDFA) Lucent 1712 с сонаправленной накачкой на длине волны 980 нм, зависимость коэффициента усиления которого от мощности входного сигнала для $\lambda = 1550$ нм представлена на рис. 4 (пунктирными линиями выделен рабочий диапазон входных сигналов EDFA для рассматриваемой системы). Верхняя граница обусловлена мощностью используемых полупроводниковых лазерных источников излучения и потерями в оптоволоконном контуре. Нижняя граница связана с тем, что при усилении слабых сигналов (менее 10 мкВт) наблюдается значительная нелинейность коэффициента усиления в области длин волн 1525–1540 нм. Из рис. 4 следует, что если мощность входного сигнала уменьшается, то коэффициент усиления возрастает. Чтобы учесть данный эффект при последующем численном моделировании, зависимость коэффициента усиления EDFA от мощности входного сигнала была аппроксимирована следующим полиномом (сплошная кривая на рис. 4):

$$G_{yc} [\text{дБ}] = -9,50 \cdot 10^{-9} P_{\text{вх}}^6 - 2,53 \cdot 10^{-7} P_{\text{вх}}^5 + 3,43 \cdot 10^{-5} P_{\text{вх}}^4 + 1,55 \cdot 10^{-3} P_{\text{вх}}^3 - 8,15 \cdot 10^{-4} P_{\text{вх}}^2 - 1,02 P_{\text{вх}} + 14,29 [\text{дБм}], \quad (7)$$

$$P_{\text{вх}} [\text{дБм}] = P_{\text{ил}} [\text{дБм}] - \alpha_1 - \alpha_2 L - \alpha_i.$$

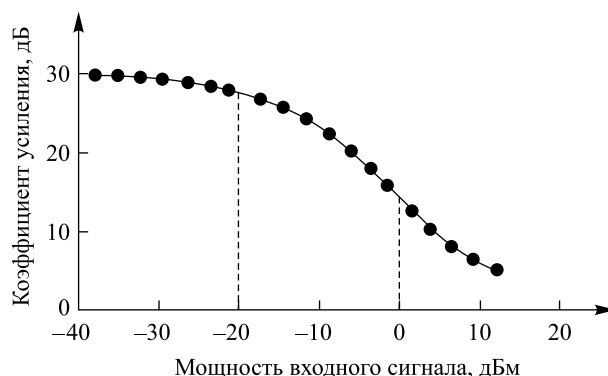


Рис. 4. Зависимость коэффициента усиления EDFA от мощности входного сигнала

Fig. 4. EDFA gain dependence on input power

При изогнутом по радиусу R на угол ϕ волокне внешний слой оказывается упруго растянут, а внутренний сжат. Геометрическое удлинение оптического пути на внешней поверхности изгиба частично компенсируется уменьшением показателя преломления (ПП), связанным с уменьшением плотности вещества при растяжении. Однако даже при изгибе по радиусу $R = 1$ мм удлинение оптического пути составляет 90 % от геометрического удлинения. В изогнутом ВС фрагменты волны, идущие по его внешнему краю, за одно и то же время должны проходить больший путь по сравнению с осевыми фрагментами, т. е. должны двигаться с большими, чем в неизогнутом ВС, скоростями. При малых радиусах R вполне возможна ситуация, когда крылья волны должны двигаться по внешнему краю ВС со скоростью, большей скорости света в оболочке. Это будет означать, что волна непрерывно теряет интенсивность за счет отставания фрагментов крыльев волны [14].

Одним из распространенных методов теоретического решения задачи нахождения величины оптических потерь в деформированном ВС является метод конформного отображения (МКО) изогнутого ВС в прямолинейный с перекошенным профилем ПП [15–19]. Это преобразование превращает изогнутый по радиусу R световод в прямолинейный, а указанную выше разницу в оптических путях переводит в изменение профиля ПП. В используемой модели нет катастрофических отрывов мощности волны вследствие невозможности движения быстрее скорости света. В то же время проявляется возможность туннелирования излучения между сердцевинной и оболочкой, что приводит к перекачке мощности волны, идущей по сердцевине, в оболочечные моды, т. е. к потерям канализируемого излучения. Перекос профиля ПП, связанный с изгибом, приведен на рис. 5. Уменьшение радиуса изгиба R приводит к большему перекоосу профиля ПП, это сокращает толщину барьера, сквозь который туннелирует излучение. Для прямоугольного профиля вертикальные стенки сердцевины остаются вертикальными. Наклон группового эффективного ПП увеличивается с уменьшением радиуса R .

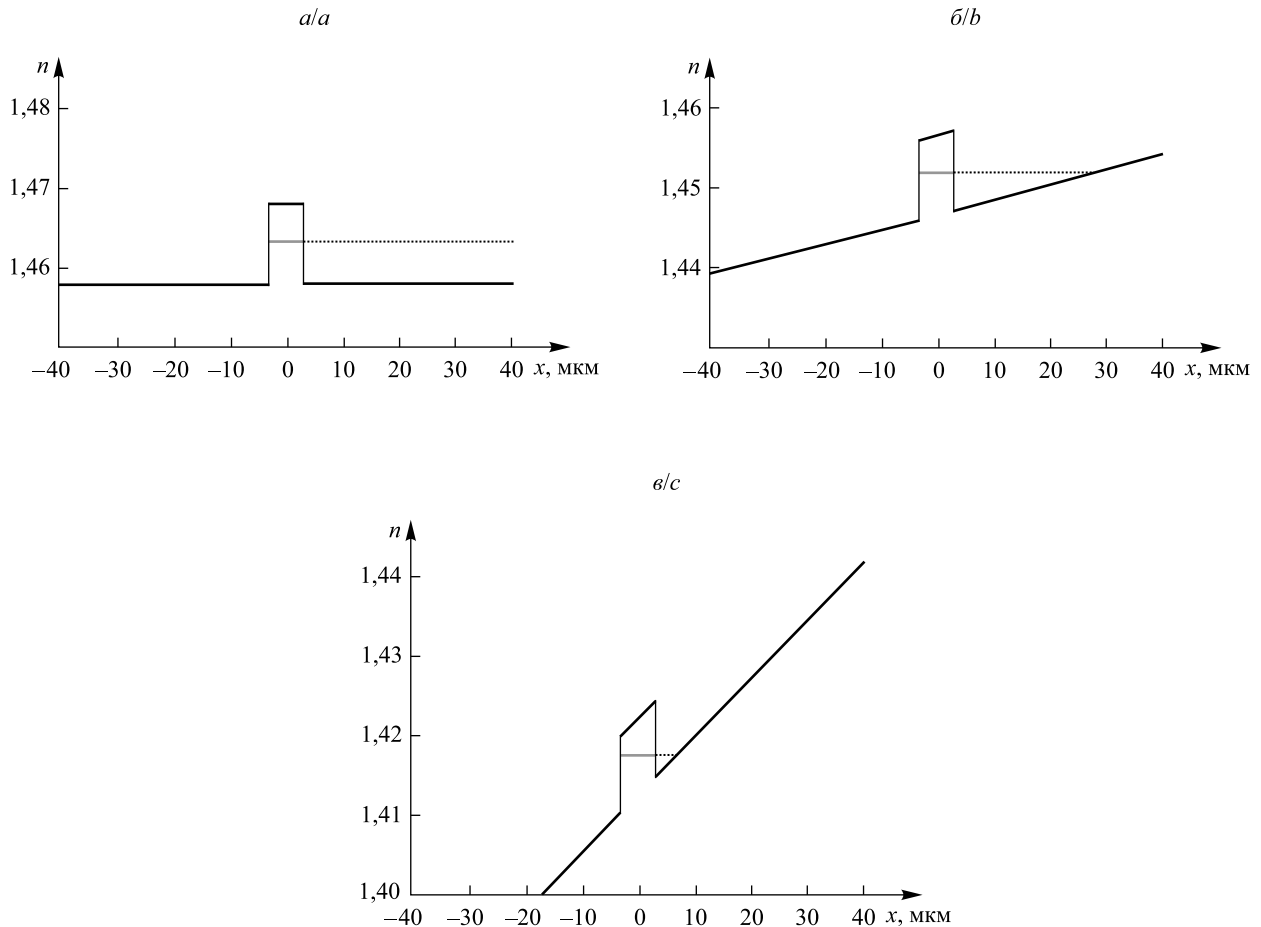


Рис. 5. Профили показателя преломления ВС после МКО в результате изгиба по различным радиусам: 1 м (а); 8 мм (б); 2 мм (в).

Уровень эффективного показателя преломления обозначен серыми сплошными линиями, ширина барьера – пунктирными

Fig. 5. The profiles of the refractive index of the optical fiber after the method of conformal transformation as a result of bending along different radius: 1 m (a); 8 mm (b); 2 mm (c). The gray solid lines are the level of the effective refractive index, the dotted ones are the width of the barrier

При некотором радиусе изгиба в оболочке для распространяющейся по сердцевине моды возникает разрешенное состояние, в которое эта мода может перекачивать мощность в процессе туннелирования. Между разрешенными состояниями в оболочке и состоянием в сердцевине существует барьер, в котором амплитуда волны затухает по экспоненциальному закону. Вероятность туннелирования сквозь этот барьер выражается формулой [14]

$$D = \exp\left(-\frac{k_0 R f_0^2 n_e^2}{n_0 - \eta f_0} \left(\frac{\pi}{2} - \arcsin K - K \sqrt{1 - K^2}\right)\right), \quad (8)$$

где k_0 – волновой вектор в пустоте; n_e – эффективный ПП сердцевины ВС, используемый для МКО; n_0 – групповой ПП оболочки ВС;

$$\eta = \frac{n_0^4 + n_e^2 - 2}{4n_0^3 + 2n_e}; \quad (9)$$

$$f_0 = 1 - \frac{r}{R}; \quad (10)$$

$$K = \left(\left(\frac{n_0 f_r}{f_0} - \frac{\eta \rho}{R}\right) \frac{1}{n_e}\right), \quad (11)$$

$$f_r = 1 - \frac{r}{R} + \frac{\rho}{R}, \quad (12)$$

r – радиус волокна, ρ – радиус сердцевинки ВС.

Потери мощности (дБ) излучения в ВС на одной точке деформации α_i^0 определяются из уравнения [14]

$$\alpha_i^0 = \frac{5\varphi R \lg e}{2(\rho R)^{1/2}} D, \quad (13)$$

где

$$\varphi = \pi - \gamma, \quad \gamma = \pi - 2 \operatorname{arctg} \frac{\Delta h}{R}; \quad (14)$$

R – радиус трубки георешетки, равный 4 мм; Δh – величина поперечной деформации ВС, возникающей под воздействием нарушителя, мм.

Область применимости формул (8) и (13) оценим как $R_{\text{кр}} < R < R_0$. Максимальный радиус изгиба R ограничен радиусом R_0 , при котором становится возможным туннелирование в оболочку в эффективном профиле ПП [14]:

$$R_0 = r \left(\frac{\beta}{k_0} - \eta \right) \left(\frac{\beta}{k_0} - n_0 \right)^{-1}.$$

Минимальный радиус изгиба R ограничен критическим радиусом $R_{\text{кр}}$, при котором практически все излучение вытекает из сердцевинки в оболочку и потери становятся недопустимо большими. Критический радиус изгиба волокна приближенно рассчитывается по формуле [20]

$$R_{\text{кр}} \approx \frac{3n_c^2 \lambda}{4\pi NA^3},$$

где NA – числовая апертура; n_c – групповой ПП сердцевинки ВС.

Для одномодового германо-силикатного волокна с диаметром сердцевинки 9 мкм, диаметром оболочки 125 мкм и ступенчатым профилем показателя преломления на длине волны $\lambda = 1,55$ мкм имеем: $n_c = 1,4693$; $n_0 = 1,4659$; $n_c - n_0 = 0,0034$; $NA \approx 0,12$. Следовательно, минимальный радиус изгиба должен составлять $R_{\text{кр}} = 0,46$ мм. При $\eta = 0,307$ для прямоугольного профиля $\frac{\beta}{k_0} \approx n_0 + \frac{\Delta n}{2}$, тогда $R_0 \approx 42$ мм.

Таким образом, математическую модель, описанную формулами (8)–(14), можно использовать при радиусах изгиба $0,46 \text{ мм} < R < 42 \text{ мм}$. Для радиусов изгибов ВС более 1 мм в волоконной оптике такие деформации называются макродеформациями.

В нашем случае радиус изгиба, обусловленный радиусом трубки георешетки, оставался постоянным, а менялась величина поперечной деформации ВС в зависимости от твердости пенополиуретанового упругого элемента, числа точек деформации и воздействующей массы. На рис. 6 представлена зависимость угла изгиба ВС от величины деформации Δh , полученная с помощью формулы (14). Из рисунка следует, что значительное изменение угла изгиба, а следовательно, и потерь, согласно (13), будет наблюдаться для деформаций от 0 до 5–6 мм.

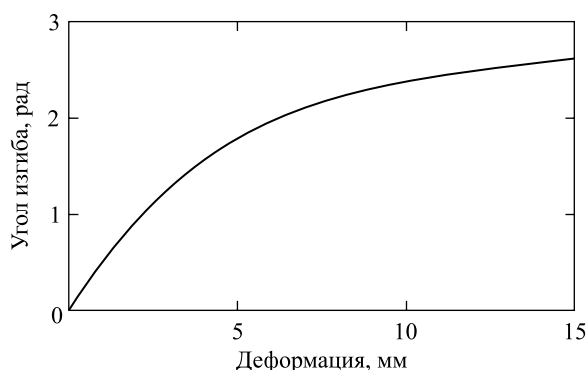


Рис. 6. Зависимость угла изгиба ВС от величины деформации

Fig. 6. The dependence of the OF bending angle on the magnitude of the deformation

Предложенная математическая модель справедлива для ступенчатых ВС, у которых α -профиль имеет вид $\alpha \rightarrow \infty$, и градиентных ВС с $\alpha \geq 3$. Следует отметить, что формула (8) неприменима для параболического ($\alpha = 2$) и треугольного ($\alpha = 1$) профиля ПП. Это связано с искажениями самой формы эффективного профиля ПП при изгибе. Так, в случае параболического профиля ПП смещается максимум ПП сердцевины, меняется «глубина» профиля ПП и эти параметры зависят от радиуса изгиба [14].

Результаты численного моделирования

При расчетах потерь и временных задержек при деформации волокна использовались следующие параметры:

R_n	500 Ом	$S_{\text{лфд}}$	0,85 А/Вт	α_1	10,7 дБ
λ	1,55 мкм	M	10	α_2	0,22 дБ/км
n_o	1,4659	L	20 км	ρ	4,5 мкм
n_c	1,4693	τ_ϕ	15 нс	r	62,5 мкм
$P_{\text{ил}}$	5 мВт	R	4 мм		

Согласно (13), (14) значение потерь мощности излучения зависит от величины Δh . С помощью разработанной в лаборатории физикохимии полимерных материалов и природных органических соединений Научно-исследовательского института прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ смесительно-заливочной установки и технологии по автоматическому нанесению эластичных пенополиуретанов по заданной траектории получены несколько образцов упругой основы с различной твердостью по Шору. Результаты экспериментальных исследований зависимости величины деформации Δh одномодового кварцевого волоконного световода от массы нарушителя и количества точек деформации представлены в табл. 1 и 2. В качестве деформирующего элемента выступала каркасная двуслойная жесткая экструдированная георешетка из полипропилена с диаметром трубки 8 мм. Проведенные эксперименты показали, что для идущего человека величина Δh находилась в области упругих деформаций, однако не соответствовала линейному закону Гука. Для ползущего нарушителя массой 85 кг деформация ВС составляла 0,15–0,4 мм в зависимости от твердости пенополиуретанового элемента и подчинялась закону Гука.

В тех же таблицах приведены рассчитанные по (8)–(13) значения потерь при макродеформации волокна. Результаты расчетов соответствуют экспериментальным данным [14; 21], в которых при $R = 4$ мм величина потерь находилась в интервале 0,4–0,45 дБ. Чтобы избежать самопроизвольного срабатывания компаратора по шумам и находиться в области линейного участка фронта импульса, минимальное начальное значение порога срабатывания решающего устройства должно быть равным $U_{\text{п. min}} = 0,3U_{a0} = 0,3P_{\text{ил}} S_{\text{лфд}} R_n K_{\text{п0}} MG_{\text{yc0}}$, в то время как максимальное значение порога для сигнала с дополнительными потерями из-за макродеформаций не должно превышать $U_{\text{п. max}} = 0,8U_{a1} = 0,8P_{\text{ил}} S_{\text{лфд}} R_n K_{\text{п1}} MG_{\text{yc1}}$. В этом случае динамический диапазон изменения напряжений порогового устройства не должен превосходить $\delta U = 20 \lg \left(\frac{U_{\text{п}}}{0,5U_{a0}} \right) = \pm 4$ (дБ). Это учитывалось при выборе твердости пенополиуретанового элемента.

Таблица 1

Потери в ВС при макродеформации при различных значениях твердости материала для идущего нарушителя и двух точек деформации

Table 1

OF losses during macrodeformation at different values of the material hardness for the walking intruder and two points of deformation

Твердость по Шору	Масса нарушителя, кг	Деформация, мм	Потери для одной точки, дБ
50	60	4,7	0,423 1
50	72	5,4	0,456 1
50	85	5,7	0,468 6
60	60	4,4	0,407 1
60	72	4,8	0,428 1
60	85	5,1	0,442 6

Окончание табл. 1
Ending table 1

Твердость по Шору	Масса нарушителя, кг	Деформация, мм	Потери для одной точки, дБ
70	60	4,2	0,395 7
70	72	4,6	0,4179
70	85	4,9	0,433 1

Таблица 2

Потери в ВС при макродеформации при различном числе точек деформации для идущего нарушителя массой 85 кг

Table 2

OF losses during macrodeformation with a different number of deformation points for a walking intruder weighing 85 kg

Твердость по Шору	Количество точек деформации	Деформация, мм	Потери для одной точки, дБ
50	1	7,5	0,528 2
60	1	6,9	0,5109
70	1	6,5	0,498 0
80	1	6,0	0,480 3
50	2	5,7	0,468 6
60	2	5,1	0,442 6
70	2	4,9	0,433 1
80	2	4,8	0,428 1
50	3	4,5	0,412 5
60	3	4,3	0,401 5
70	3	4,2	0,395 7
80	3	4,1	0,389 8

По формулам (3)–(7) были рассчитаны временные задержки при макродеформации волокна для разных значений твердости пенополиуретановой упругой основы (рис. 7) и различного количества точек деформации (рис. 8).

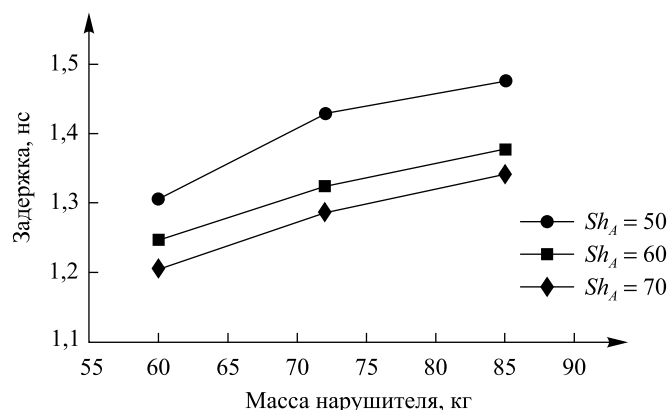


Рис. 7. Временная задержка циркулирующих импульсов в ВС под воздействием макродеформаций при различных значениях твердости по Шору Sh_A упругой основы чувствительного элемента для идущего нарушителя при двух точках деформации

Fig. 7. The time delay of circulating pulses in the OF under the influence of macrostrains at various values of Shore Sh_A hardness elastic basis of the sensing element for the walking intruder when the number of two deformation points

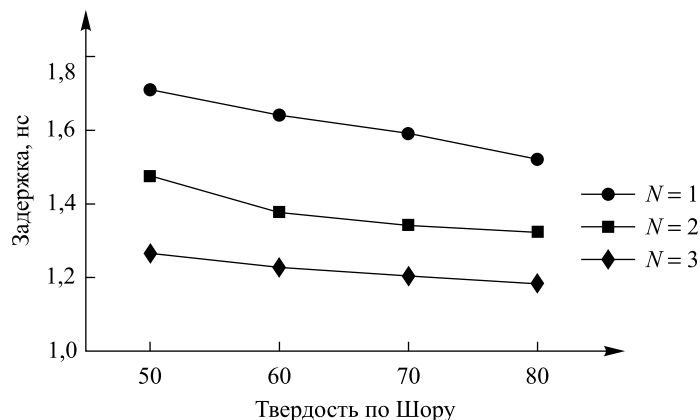


Рис. 8. Временная задержка циркулирующих импульсов в ВС под воздействием макродеформаций при различном количестве N точек деформации для идущего нарушителя массой 85 кг

Fig. 8. The time delay of the circulating pulses in the optical fiber under the influence of macrostrains with a different number N of deformation points for the walking intruder with a mass of 85 kg

Также рассчитаны потери и временные задержки при макродеформации волокна при различных значениях твердости пенополиуретановой упругой основы для ползущего нарушителя массой 85 кг (табл. 3).

Таблица 3

Потери и временная задержка в ВС при макродеформации при ползущем нарушителе

Table 3

Losses and time delay in the OF under macrodeformation with a crawling intrud

Твердость по Шору Sh_A	Потери, дБ	Временная задержка, нс
50	0,048 7	0,966 2
60	0,038 6	0,742 1
70	0,028 5	0,530 4
80	0,018 3	0,330 7

Заключение

Для структуры подземной волоконно-оптической системы охраны периметра рециркуляционного типа с использованием WDM-технологии спектрального разделения информационных каналов разработана математическая модель изменения временных интервалов между циркулирующими импульсами в зависимости от величины поперечных деформаций ВС. Данная модель позволяет рассчитать дополнительные потери в зависимости от радиуса изгиба, угла изгиба, вероятности туннелирования излучения из сердцевины в оболочку, параметров самого кварцевого волокна, а также от твердости упругой основы чувствительного элемента и количества точек деформации для идущего и ползущего нарушителя. Оценка вероятности туннелирования оптического излучения для ВС с прямоугольным профилем ПП осуществлялась при помощи МКО изогнутого ВС в прямолинейный с перекошенным профилем показателя преломления. Представлены экспериментальные данные величины поперечных деформаций ВС в зависимости от твердости пенополиуретанового упругого основания, количества точек деформации и массы идущего или ползущего нарушителя. Проведены расчеты потерь в ВС при макродеформации для случая постоянного радиуса деформирующего элемента $R = 4$ мм. Показано, что для идущего нарушителя возникающие дополнительные временные задержки периода рециркуляции составили 1,1–1,7 нс, для ползущего нарушителя они находятся в пределах 0,3–0,9 нс. Полученные результаты подтверждают возможность эффективного использования метода времяамплитудного преобразования, предлагаемого для обнаружения нарушителей с помощью подземной волоконно-оптической системы охраны периметра, а также позволяют определить конструктивные параметры датчика, обеспечивающие наилучшую чувствительность измерительной системы.

Библиографические ссылки

1. Поляков АВ, Альгина ЕГ. Нейрокомпьютерные и волоконно-оптические технологии, применяемые для охраны периметра. *Военно-промышленный комплекс. Беларусь*. 2016;1:60–66.
2. Juarez JC, Maier EW, Choi KN, Taylor HF. Distributed fiber-optic intrusion sensor system. *Journal of Lightwave Technology*. 2005;23(6):2081–2087.
3. Juarez JC, Taylor HF. Field test of a distributed fiber-optic intrusion sensor system for long perimeters. *Applied Optics*. 2007;46(11):1968–1971. DOI: 10.1364/AO.46.001968.
4. Peng F, Wu H, Jia X-H, Rao Y-J, Wang Z-N, Peng Z-P. Ultra-long high-sensitivity Ф-OTDR for high spatial resolution intrusion detection of pipelines. *Optics Express*. 2014;22(11):13804–13810. DOI: 10.1364/OE.22.013804.
5. Mahmoud SS, Visagathilagar Y, Katsifolis J. Real-time distributed fiber optic sensor for security systems: performance, event classification and nuisance mitigation. *Photonic sensors*. 2012;2(3):225–236. DOI: 10.1007/s13320-012-0071-6.
6. Ye W, Zhu Q, You T. Developments in distributed optical fiber detection technology. In: Czarske J, Zhang S, Sampson D, Wang W, Liao Y, editors. *International Symposium on Optoelectronic Technology and Application: Laser and Optical Measurement Technology; and Fiber Optic Sensors. Proceedings of SPIE. Volume 9297*. Beijing: SPIE; 2014. Article ID: 92972T. DOI: 10.1117/12.2071380.
7. Yuan L, Dong Y. Loop topology based white light interferometric fiber optic sensor network for application of perimeter security. *Photonic Sensors*. 2011;1(3):260–267. DOI: 10.1007/s13320-010-0009-9.
8. Wu H, Rao Y, Tang C, Wu Y, Gong Y. A novel FBG-based security fence enabling to detect extremely weak intrusion signals from nonequivalent sensor nodes. *Sensors and Actuators A: Physical*. 2011;167(2):548–555. DOI: 10.1016/j.sna.2011.02.046.
9. Li S, Vf J, Hu J. Rockfall hazard alarm strategy based on FBG smart passive net structure. *Photonic sensors*. 2015;5(1):19–23. DOI: 10.1007/s13320-014-0203-2.
10. Wu H, Qian Y, Zhang W, Li H, Xie X. Intelligent detection and identification in fiber-optical perimeter intrusion monitoring system based on the FBG sensor network. *Photonic Sensors*. 2015;5(4):365–375. DOI: 10.1007/s13320-015-0274-8.
11. Поляков АВ. *Рециркуляционные оптоволоконные измерительные системы*. Минск: БГУ; 2014. 208 с.
12. Polyakov AV. Fiber-optic perimeter security system based on WDM technology. In: Huckridge DA, Ebert R, Bürsing H, editors. *Electro-Optical and Infrared Systems: Technology and Applications XIV. Proceedings of SPIE. Volume 10433*. Warsaw: SPIE; 2017. Article ID: 104330C. DOI: 10.1117/12.2278131.
13. Поляков АВ, Ксенофонтов МА, Сахончик ДГ. Волоконно-оптическая рециркуляционная сигнальная система на основе WDM-технологии. В: *Опто-, микро- и СВЧ-электроника – 2018. Сборник научных статей I Международной научно-технической конференции; 22–26 октября 2018 г.; Минск, Беларусь*. Минск: Институт физики им. Б. И. Степанова НАНБ; 2018. с. 262–265.
14. Аксенов ВА, Волошин ВВ, Воробьев ИЛ, Иванов ГА, Исаев ВА, Колосовский АО и др. Потери в одномодовых волоконных световодах на однократных изгибах по малому радиусу. Прямоугольный профиль показателя преломления. *Радиотехника и электроника*. 2004;49(6):734–742.
15. Heiblum M, Harris JH. Analysis of curved optical waveguides by conformal transformation. *IEEE Journal Quantum Electronics*. 1975;11(2):75–83. DOI: 10.1109/JQE.1975.1068563.
16. Sakai J, Kimura T. Analytical bending loss formula of optical fibers with field deformation. *Radio Science*. 1982;17(1):21–29. DOI: 10.1029/RS017i001p00021.
17. Danielsen P, Yevick D. Propagation beam analysis of bent optical waveguides. *Journal of Optical Communications*. 1983;4(3):94–98. DOI: 10.1515/JOC.1983.4.3.94.
18. Baets R, Lagasse IE. Loss calculation design of arbitrary curved integrated optic waveguides. *Journal of the Optical Society of America*. 1983;73(2):177–182.
19. Schermer RT, Cole JH. Improved bend loss formula verified for optical fiber by simulation and experiment. *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 2007;43(10):899–909. DOI: 10.1109/JQE.2007.903364.
20. Zendeenam A, Mirzaei M, Farashiani A, Horabadi L. Investigation of bending loss in a single-mode optical fibre. *Pramana Journal of Physics*. 2010;74(4):591–603. DOI: 10.1007/s12043-010-0052-5.
21. Salleh MFM, Zakaria Z. Effect of bending optical fibre on bend loss over a long period of time. *ARPN Journal of Engineering and Applied Sciences*. 2015;10(16):6732–6736.

References

1. Polyakov AV, Algina EG. Neurocomputers and fiber-optic technologies, implemented in perimeter security. *Military-Industrial Complex. Belarus*. 2016;1:60–66. Russian.
2. Juarez JC, Maier EW, Choi KN, Taylor HF. Distributed fiber-optic intrusion sensor system. *Journal of Lightwave Technology*. 2005;23(6):2081–2087.
3. Juarez JC, Taylor HF. Field test of a distributed fiber-optic intrusion sensor system for long perimeters. *Applied Optics*. 2007;46(11):1968–1971. DOI: 10.1364/AO.46.001968.
4. Peng F, Wu H, Jia X-H, Rao Y-J, Wang Z-N, Peng Z-P. Ultra-long high-sensitivity Ф-OTDR for high spatial resolution intrusion detection of pipelines. *Optics Express*. 2014;22(11):13804–13810. DOI: 10.1364/OE.22.013804.
5. Mahmoud SS, Visagathilagar Y, Katsifolis J. Real-time distributed fiber optic sensor for security systems: performance, event classification and nuisance mitigation. *Photonic sensors*. 2012;2(3):225–236. DOI: 10.1007/s13320-012-0071-6.
6. Ye W, Zhu Q, You T. Developments in distributed optical fiber detection technology. In: Czarske J, Zhang S, Sampson D, Wang W, Liao Y, editors. *International Symposium on Optoelectronic Technology and Application: Laser and Optical Measurement Technology; and Fiber Optic Sensors. Proceedings of SPIE. Volume 9297*. Beijing: SPIE; 2014. Article ID: 92972T. DOI: 10.1117/12.2071380.
7. Yuan L, Dong Y. Loop topology based white light interferometric fiber optic sensor network for application of perimeter security. *Photonic Sensors*. 2011;1(3):260–267. DOI: 10.1007/s13320-010-0009-9.
8. Wu H, Rao Y, Tang C, Wu Y, Gong Y. A novel FBG-based security fence enabling to detect extremely weak intrusion signals from nonequivalent sensor nodes. *Sensors and Actuators A: Physical*. 2011;167(2):548–555. DOI: 10.1016/j.sna.2011.02.046.

9. Li S, Vf J, Hu J. Rockfall hazard alarm strategy based on FBG smart passive net structure. *Photonic sensors*. 2015;5(1):19–23. DOI: 10.1007/s13320-014-0203-2.
10. Wu H, Qian Y, Zhang W, Li H, Xie X. Intelligent detection and identification in fiber-optical perimeter intrusion monitoring system based on the FBG sensor network. *Photonic Sensors*. 2015;5(4):365–375. DOI: 10.1007/s13320-015-0274-8.
11. Polyakov AV. *Retsirkulyatsionnye optovolokonnye izmeritel'nye sistemy* [Recirculation fiber optic measuring systems]. Minsk: Belarusian State University; 2014. 208 p. Russian.
12. Polyakov AV. Fiber-optic perimeter security system based on WDM technology. In: Huckridge DA, Ebert R, Bürsing H, editors. *Electro-Optical and Infrared Systems: Technology and Applications XIV. Proceedings of SPIE. Volume 10433*. Warsaw: SPIE; 2017. Article ID: 104330C. DOI: 10.1117/12.2278131.
13. Polyakov AV, Ksenofontov MA, Sakhonchik DG. [Fiber optic recirculation alarm system based on WDM technology]. In: *Opto-, mikro- i SVCh-elektronika – 2018. Sbornik nauchnykh statei I Mezhdunarodnoi nauchno-tekhnicheskoi konferentsii; 22–26 oktyabrya 2018 g.; Minsk, Belarus* [Opto-, microwave and SHF-electronics. Proceedings of the I International scientific and technology conference; 2018 October 22–26; Minsk, Belarus]. Minsk: B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus; 2018. p. 262–265. Russian.
14. Aksenov VA, Voloshin VV, Vorob'ev IL, Ivanov GA, Isaev VA, Kolosovskii AO, et al. Losses in single-mode optical fibers occurring in isolated bends of small radius: rectangular profile of refractive index. *Radiotekhnika i elektronika*. 2004;49(6):734–742. Russian.
15. Heiblum M, Harris JH. Analysis of curved optical waveguides by conformal transformation. *IEEE Journal Quantum Electronics*. 1975;11(2):75–83. DOI: 10.1109/JQE.1975.1068563.
16. Sakai J, Kimura T. Analytical bending loss formula of optical fibers with field deformation. *Radio Science*. 1982;17(1):21–29. DOI: 10.1029/RS017i001p00021.
17. Danielsen P, Yevick D. Propagation beam analysis of bent optical waveguides. *Journal of Optical Communications*. 1983;4(3):94–98. DOI: 10.1515/JOC.1983.4.3.94.
18. Baets R, Lagasse IE. Loss calculation design of arbitrary curved integrated optic waveguides. *Journal of the Optical Society of America*. 1983;73(2):177–182.
19. Schermer RT, Cole JH. Improved bend loss formula verified for optical fiber by simulation and experiment. *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 2007;43(10):899–909. DOI: 10.1109/JQE.2007.903364.
20. Zendehtnam A, Mirzaei M, Farashiani A, Horabadi L. Investigation of bending loss in a single-mode optical fibre. *Pramana Journal of Physics*. 2010;74(4):591–603. DOI: 10.1007/s12043-010-0052-5.
21. Salleh MFM, Zakaria Z. Effect of bending optical fibre on bend loss over a long period of time. *ARPN Journal of Engineering and Applied Sciences*. 2015;10(16):6732–6736.

Статья поступила в редакцию 28.02.2019.
Received by editorial board 28.02.2019.

ЮБИЛЕИ

JUBILEES

Анатолий Павлович
ЗАЖОГИН

Anatolij Pavlovich
ZAZHOGIN



Анатолию Павловичу Зажогину, доктору физико-математических наук, профессору, заслуженному работнику БГУ, исполнилось 80 лет.

А. П. Зажогин родился 28 февраля 1939 г. в д. Сергиева Слобода Великолукского района Великолукской области Российской Федерации. В 1956 г. окончил среднюю школу № 46 в г. Минске. С 1961 по 1967 г. учился на физико-математическом факультете БГУ (вечернее отделение). С 1967 г. начал работу на кафедре лазерной физики и спектроскопии (в то время она называлась кафедрой спектрального анализа) указанного факультета в должности старшего инженера.

Первый опыт научной деятельности Анатолия Павловича связан главным образом с изучением спектроскопических свойств ураниловых соединений и созданием лазеров. В середине 1970-х гг. он сконструировал азотный лазер с накачкой бегущей волной, а в 1974–1979 гг. – лазер на красителях с ламповой накачкой и длительностью импульса менее 100 нс для исследования спектральных свойств ураниловых соединений, причем для такого лазера была разработана коаксиальная лам-

па – кювета и источник накачки соответствующей длительности. В 1975–1976 гг. в этих же целях А. П. Зажогин разработал практически первый в Беларуси струйный квазинепрерывный лазер на красителях, в котором он не просто реализовал известные оптические решения, но и создал оригинальную систему формирования ламинарной струи красителя.

В 1980 г. Анатолий Павлович защитил кандидатскую диссертацию «Исследование природы центров свечения в кристаллах ураниловых соединений», посвященную выяснению природы дефектов в кристаллах и твердых растворах ураниловых соединений и влиянию дефектов на спектральные характеристики данного класса веществ. В 1981 г. А. П. Зажогин перешел на должность доцента кафедры и продолжал научные исследования в области спектроскопии и люминесценции растворов ураниловых соединений. Им были установлены неизвестные ранее аналитические закономерности между положением полос в электронно-колебательных спектрах люминесценции и электронного поглощения и донорными

свойствами лигандов, присоединяемых к иону уранила в экваториальной плоскости. Указанные закономерности позволили создать модельные представления процессов формирования внутренней координационной сферы ион-комплексобразователя. Эти исследования перспективны в области аналитической спектроскопии комплексов тяжелых металлов с достраиваемой внутренней электронной оболочкой, важных при разработке новых материалов и расширении их применения. Результатом исследований явилась его докторская диссертация «Спектрально-структурные закономерности формирования комплексов уранила в конденсированной фазе», защищенная в 2000 г.

В настоящее время А. П. Зажогин продолжает развивать новые приборы и методы для спектроскопии атомов и молекул. Эти приборы успешно применяются в атомной спектроскопии, как в научных исследованиях, так и в учебном процессе кафедры лазерной физики и спектроскопии. Вместе со своими учениками Анатолий Павлович исследует процессы влияния сопутствующих (третьих) элементов на результаты количественного спектрального анализа природных и синтетических объектов при возбуждении спектров излучения атомов электрическими и лазерными импульсами. Активная научно-исследовательская работа в этой области под руководством профессора А. П. Зажогина позволила обнаружить преимущество использования сдвоенных лазерных импульсов, разделенных микросекундными интервалами, по сравнению со стандартными источниками возбуждения спектров для атомно-эмиссионного анализа. На основе полученного опыта и положительных результатов созданы методики элементного микроанализа с субмикронным разрешением промышленных изделий сложной формы из специальных латуней, оловянистых и бериллиевых бронз, дюралюминия, углеродистых сталей и чугунов. Исследовано влияние параметров лазерного излучения одиночных и сдвоенных импульсов на деструкцию поверхности образца при анализе. На основании экспериментальных данных и численных расчетов предложен метод управления толщиной испаряемого слоя путем изменения плотности потока излучения при расфокусировке лазерного луча.

Анатолий Павлович совместно с учениками разработал уникальный комплекс методик лазерного микроанализа биологических субстратов и жидкостей, позволяющий обнаружить отклонения в содержании микроэлементов в организме пациентов с различными заболеваниями.

В 2000–2008 гг. А. П. Зажогин осуществлял научное руководство разработкой и серийным выпуском лазерных атомно-эмиссионных спектрометров и светодиодного ретинального стимулятора

на белорусско-японском совместном предприятии *LOTIS III*. Благодаря работам Анатолия Павловича сложилось тесное сотрудничество кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета БГУ с крупнейшими предприятиями Республики Беларусь, такими как Белорусский металлургический завод, Минский тракторный завод, Минский автомобильный завод, Белорусский автомобильный завод. Целый цикл научных исследований, посвященных диагностике патологий человека с помощью лазерного элементного микроанализа биологических субстратов, А. П. Зажогиным выполнен совместно с Республиканским научно-практическим центром неврологии и нейрохирургии.

А. П. Зажогин опубликовал более 300 научных работ в отечественных и зарубежных журналах, подготовил и издал 12 учебно-методических разработок для студентов. Он участвовал в написании 4 совместных монографий, имеет авторские свидетельства на изобретения, руководит дипломными работами студентов, подготовил и опубликовал курс лекций «Атомный спектральный анализ» (Минск, 2005). Отдает много сил и внимания подготовке аспирантов как из Беларуси, так и из других стран, таких как Вьетнам, Иран, Ирак, Китай. Разработал и читает студентам и аспирантам следующие дисциплины по лазерной физике и спектроскопии: «Современные лазерные системы», «Техника лазеров», «Полупроводниковые лазеры», «Газовые лазеры» и «Атомный спектральный анализ».

За успешную научно-педагогическую работу А. П. Зажогин неоднократно награждался почетными грамотами факультета и университета. В 2009 г. награжден Почетной грамотой Министерства образования Республики Беларусь, в 2011 г. получил благодарность ректора БГУ, в 2013 г. ему присвоено звание «Заслуженный работник Белорусского государственного университета», в 2014 г. награжден нагрудным знаком Министерства образования «Выдатнік адукацыі», в 2018 г. – Почетной грамотой Высшей аттестационной комиссии Республики Беларусь, в 2019 г. – грамотами физического факультета БГУ и Белорусского государственного университета.

Талант физика-экспериментатора, доброжелательность, отзывчивость, умение работать с молодежью в сочетании с активной жизненной позицией и большими педагогическими способностями снискали Анатолию Павловичу глубокое уважение, признание и авторитет.

Коллеги, ученики и друзья горячо и сердечно поздравляют Анатолия Павловича Зажогина с юбилеем и от всей души желают ему долгих лет жизни, крепкого здоровья, счастья, благополучия, новых творческих успехов в науке на благо Республики Беларусь.

**Виктор Константинович
ГОНЧАРОВ****Viktor Konstantinovich
GONCHAROV**

Исполнилось 80 лет лауреату Государственной премии Республики Беларусь, доктору физико-математических наук, профессору, заслуженному работнику БГУ, лауреату премии имени А. Н. Севченко Виктору Константиновичу Гончарову.

В. К. Гончаров родился 14 марта 1939 г. Детство и юность провел в с. Новая Чигла Воронежской области (Россия). После учебы в средней школе в 1957 г. поступил в Воронежский государственный университет на физический факультет, по окончании которого в 1962 г. был направлен на работу в специальное конструкторское технологическое бюро (СКТБ) Минского приборостроительного завода им. В. И. Ленина. В качестве инженера-конструктора СКТБ принимал активное участие в разработке и создании измерителей шумов сверхвысококачественных приборов. Созданная на основе корреляционных методов аппаратура позволяла измерять шумы клистронов на два порядка меньше, чем собственные шумы контролирующей аппаратуры. Такая аппаратура была необходима для получения малошумящих клистронов, которые использовались для доплеровских систем обнаружения объектов, движущихся с небольшими скоростями (автомобили, вертолеты и т. п.).

В 1965 г. приглашен на работу в Институт физики Академии наук БССР, в котором первоначально разрабатывал инфракрасные спектрометры для аэрокосмических целей. Один из таких спектрометров был выпущен малой серией и размещался на спутниках. Этот прибор на основе зарегистрированного спектра плазменного факела ракеты позволял обнаруживать взлеты ракет с территории США и идентифицировать по спектру тип ракеты.

Начиная с 1968 г. интересы Виктора Константиновича переключились на исследования взаимодействия высокоэнергетичного лазерного излучения с различными материалами и разработку и создание высокоэнергетичных лазеров (до 1 кДж).

В 1972 г. он защитил кандидатскую диссертацию, посвященную взаимодействию с материалами лазерного излучения умеренной интенсивности (технологической).

В 1979 г. В. К. Гончаров был избран на должность заведующего лабораторией физики и техники плазмы, впоследствии переименованной в лабораторию лазерной плазмодинамики, которую возглавляет до настоящего времени в Институте прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко Белорусского государственного университета. В лаборатории основное внимание было уделено разработке и созданию высокоэнергетических лазерных систем для изучения физики взаимодействия лазерного излучения плотностью мощности 10^5 – 10^8 Вт/см² с различными материалами. Такие плотности необходимы для лазерных технологий по закалке, сверлению и резке твердых материалов. Для этих целей была разработана уникальная лазерная система энергией в импульсе до 1 кДж с различной пространственно-временной структурой лазерного пучка (от стопроцентной модуляции интенсивности пучка до квазистационарного с неравномерностью не хуже 2,5 %).

В результате исследований воздействия указанного лазерного излучения на металлы комплексно обоснована новая физическая модель разрушения металлов под действием лазерного излучения умеренной интенсивности. Проведены фундаментальные исследования состава эрозионных лазерных факелов с учетом наличия в них мелкодисперсной конденсированной фазы материала мишени, возникающей за счет объемного парообразования, и ее влияния на физические процессы, протекающие в сложных плазменных образованиях. Установлена связь физических явлений в факеле с процессами на поверхности мишени. Для большой группы металлов экспериментально определены энергетические пределы примени-

мости модели, что имеет принципиально важное значение для прогнозирования и оптимизации технологий лазерной обработки металлов.

Для изучения импульсных двухфазных потоков (плазма и жидкокапельная фаза материала мишени) В. К. Гончаров разработал методику контроля размеров и концентрации частиц жидкокапельной фазы материала мишени в эрозионных плазменных факелах в реальном времени с разрешением ~10 нс. Эта методика позволила обнаружить, исследовать и объяснить новое физическое явление – эффект низкого порога плазменной вспышки с резким увеличением температуры и концентрации заряженных частиц (электронов и ионов) за счет роста плотности вещества в эрозионном лазерном факеле из-за доиспарения жидкокапельной фазы материала мишени, формирующейся за счет объемного парообразования. Этот эффект приводит к полной экранировке лазерного излучения плазмой, и оно не достигает поверхности мишени.

В 1980-х гг. США поставили перед собой задачу разработки стратегической оборонной инициативы (СОИ), которая предусматривала создание лазерных систем для уничтожения аэрокосмических целей. СОИ позволяла не только проводить оборонительные операции, но и использовать лазеры как средства нападения. В Советском Союзе в ответ на это была разработана программа, которую кратко можно назвать антиСОИ. В рамках этой программы под руководством В. К. Гончарова были проведены исследования по воздействию высокоэнергетического лазерного излучения на различные элементы электронной техники: фотоприемники, солнечные батареи, микросхемы и некоторые другие. В результате определены энергетические пороги выхода из строя под действием лазерного излучения различных электронных компонент, найдены пороги функционального и физи-

ческого выхода из строя. Обнаружены несколько физических механизмов выхода из строя элементов электронной техники: тепловой, плазменный, ударно-волновой и с помощью генерации электромагнитного импульса.

Как итог указанных выше исследований удалось выработать рекомендации по технологиям изготовления изделий электронной техники в СССР, стойкость которой к воздействию лазерного излучения повышается на один-два порядка.

В 1993 г. Виктор Константинович защитил докторскую диссертацию, в 2006 г. ему было присвоено звание профессора.

В. К. Гончарову в 1992 г. присуждена Государственная премия Республики Беларусь. В 2009 г. он стал лауреатом премии имени А. Н. Севченко, в 2019 г. ему присвоено звание «Заслуженный работник Белорусского государственного университета».

В настоящее время Виктор Константинович является научным руководителем ряда заданий, выполняемых в рамках государственных научно-технических программ, членом редколлегии журнала «Электроника-инфо», экспертом в Белорусском республиканском фонде фундаментальных исследований, участвует в работе двух советов по защите докторских диссертаций: Д 01.05.01, Д 02.01.10.

В. К. Гончаров – автор более 400 научных трудов и изобретений. Под его руководством защищено 8 кандидатских и 1 докторская диссертация.

Коллеги, ученики и друзья от всего сердца поздравляют Виктора Константиновича с юбилеем и желают долгих лет жизни, плодотворной работы, творческого вдохновения и новых талантливых учеников.

М. В. Пузырев,

кандидат физико-математических наук, доцент

АННОТАЦИИ ДЕПОНИРОВАННЫХ В БГУ РАБОТ INDICATIVE ABSTRACTS OF THE PAPERS DEPOSITED IN BSU

УДК 536.94(075.8)+577.3(075.8)

Шапочкина И. В. **Моделирование транспорта наночастиц** [Электронный ресурс] : электрон. учеб.-метод. комплекс для спец. 1-31 04 08 «Компьютерная физика» : в 2 ч. / И. В. Шапочкина ; БГУ. Электрон. текстовые дан. Минск : БГУ, 2018. 266 с. : ил. Библиогр.: с. 203–205. Режим доступа: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/213269>. Загл. с экрана. Деп. 24.01.2019, № 000924012019.

Электронный учебно-методический комплекс по учебной дисциплине специализации «Моделирование транспорта наночастиц» разработан в соответствии с учебной программой «Моделирование транспорта наночастиц» (от 05.07.2018 г., регистрационный № УД-5755/уч.) высшего образования первой ступени. Содержит используемые в учебном процессе: лекционный материал, скомпонованный по темам соответственно учебной программе, дополненный углубленным изложением сложных вопросов и разделов для самостоятельного изучения; примерные задания для самостоятельной работы; темы для написания рефератов; вопросы для подготовки к коллоквиуму; подборку научных статей с переводами аннотаций; англо-русский словарь терминов; примеры кодов программ; список рекомендуемой литературы.

УДК 536.94(075.8)+577.3(075.8)

Шапочкина И. В. **Моделирование управляемого транспорта на наноуровне** [Электронный ресурс] : электрон. учеб.-метод. комплекс для спец. 1-31 81 01 «Физика конденсированного состояния» : в 2 ч. / И. В. Шапочкина ; БГУ. Электрон. текстовые дан. Минск : БГУ, 2018. 274 с. : ил. Библиогр.: с. 207–210. Режим доступа: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/213274>. Загл. с экрана. Деп. 24.01.2019, № 001024012019.

Электронный учебно-методический комплекс по учебной дисциплине специализации «Моделирование транспорта наночастиц» разработан в соответствии с учебной программой «Моделирование транспорта наночастиц» (от 05.07.2018 г., регистрационный № УД-5755/уч.) высшего образования первой ступени. Содержит используемые в учебном процессе: лекционный материал, скомпонованный по темам соответственно учебной программе, дополненный углубленным изложением сложных вопросов и разделов для самостоятельного изучения; примерные задания для самостоятельной работы; темы для написания рефератов; вопросы для подготовки к коллоквиуму; подборку научных статей с переводами аннотаций; англо-русский словарь терминов; примеры кодов программ; список рекомендуемой литературы.

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

<i>Кожевникова М. Е., Оганесян А. Г., Теряев О. В.</i> Непертурбативная квантовая хромодинамика и короткие струны в аннигиляции электрон-позитронной пары в адроны.....	4
<i>Горбунов И. Н., Ланёв А. В., Шалаев В. В., Шматов С. В.</i> Изучение процессов Дрелла – Яна в эксперименте «Компактный мюонный соленоид» на Большом адронном коллайдере.....	16
<i>Козлов Д. Ю., Коржик М. В., Лобко А. С., Федоров А. А., Мечинский В. А., Богомолов В. В., Илюдин А. Ф., Свертилов С. И., Яшин И. В.</i> Спектрометрические характеристики перспективных детекторов на основе кристаллов галлий-гадолиниевого граната Ce: GAGG.....	26
<i>Енковский Л. Л., Сани И., Туровци И.</i> Оддерон: мифы и реальность.....	36

ФИЗИКА КОЛЕБАНИЙ

<i>Дусматов О. М., Ходжабеков М. У.</i> Нелинейная задача устойчивости виброзащищаемой пластины при случайных воздействиях.....	41
---	----

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

<i>Анищик В. М., Горушко В. А., Пилипенко В. А., Понарядов В. В., Солодуха В. А.</i> Перераспределение примеси в ионно-легированных слоях при быстрой термообработке подзатворного диэлектрика.....	48
<i>Шепелевич В. Г., Кухаренко Е. Л.</i> Структура тройного сплава системы висмут – индий – олово.....	54
<i>Колесов Е. А., Пашинский А. Д., Тиванов М. С., Королик О. В., Капитанова О. О., Панин Г. Н.</i> Структурные свойства графена на медных подложках.....	58
<i>Магонь Н. С., Зеленьяк Т. Ю., Королик О. В., Гладышев П. П., Мазаник А. В.</i> Влияние обработки пиридином на оптические свойства пленок органо-неорганических перовскитов.....	66
<i>Бокун Г. С., ди Каприо Д., Головкин М. Ф.</i> Распределение электропотенциала в приэлектродной области твердотельного ионного электролита.....	73
<i>Грода Я. Г., Вихренко В. С., ди Каприо Д.</i> Решеточный флюид с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на простой кубической решетке.....	84
<i>Шепелевич В. Г., Гусакова О. В., Александров Д. В., Стародумов И. О.</i> Фазовый состав заэвтектического силумина при высокоскоростном затвердевании.....	96
<i>Углов В. В., Злоцкий С. В., Солодухин И. А., Малашевич А. А.</i> Микроструктура и фазовый состав многослойных покрытий ZrN/SiN_x , сформированных методом реактивного магнетронного осаждения.....	105

ВОЛОКОННАЯ ОПТИКА

<i>Сахончик Д. Г., Поляков А. В.</i> Влияние деформаций волоконного световода на период рециркуляции в оптоэлектронных системах охраны периметра.....	112
---	-----

ЮБИЛЕИ

Анатолий Павлович Зажогин.....	125
Виктор Константинович Гончаров.....	127
Аннотации депонированных в БГУ работ.....	129

CONTENTS

ATOMIC NUCLEUS AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS

<i>Kozhevnikova M. E., Oganessian A. G., Teryaev O. V.</i> Non-perturbative quantum chromodynamics and short strings in electron-positron pair annihilation to hadrons.....	4
<i>Gorbunov I. N., Lanyov A. V., Shalaev V. V., Shmatov S. V.</i> Study of Drell – Yan processes with the compact muon solenoid experiment at Large Hadron Collider	16
<i>Kozlov D. Yu., Korjik M. V., Lobko A. S., Fedorov A. A., Mechinsky V. A., Bogomolov V. V., Iyudin A. F., Svertilov S. I., Yashin I. V.</i> Spectroscopic parameters of advanced detectors based on gallium germanium garnet Ce:GAGG	26
<i>Jenkovszky L. L., Szanyi I., Turóci J.</i> The odderon: myths and reality	36

PHYSICS OF OSCILLATIONS

<i>Dusmatov O. M., Khodjabekov M. U.</i> The nonlinear problems of stability of the vibration proof plate under random influences	41
---	----

CONDENSED STATE PHYSICS

<i>Anishchik V. M., Harushka V. A., Pilipenka U. A., Ponariadov V. V., Saladukha V. A.</i> Redistribution of impurity in ion-doped layers during fast heat treatment of gate dielectric.....	48
<i>Shepelevich V. G., Koukharenko E. L.</i> The ternary alloy structure of the bismuth – indium – tin system.....	54
<i>Kolesov E. A., Pashinskiy A. D., Tivanov M. S., Korolik O. V., Kapitanova O. O., Panin G. N.</i> Structural properties of graphene on copper substrates.....	58
<i>Mahon N. S., Zelenyak T. Y., Korolik O. V., Gladyshev P. P., Mazanik A. V.</i> Influence of pyridine treatment on the optical properties of organic-inorganic perovskite films	66
<i>Bokun H. S., di Caprio D., Holovko M. F.</i> Distribution of electropotential in the electrode area of a solid state ion electrolyte.....	73
<i>Groda Ya. G., Vikhrenko V. S., di Caprio D.</i> Lattice fluid with attractive interaction between nearest neighbors and repulsive interaction between next-next-nearest neighbors on simple cubic lattice	84
<i>Shepelevich V. G., Guskova O. V., Alexandrov D. V., Starodumov I. O.</i> Phase composition of hypereutectic silumin at rapid solidification	96
<i>Uglov V. V., Zlotski S. V., Solodukhin I. A., Malashevich A. A.</i> Microstructure and phase composition of ZrN/SiN _x multilayered coatings formed by reactive magnetron deposition	105

FIBER OPTICS

<i>Sakhonchik D. G., Polyakov A. V.</i> Influence of the optical fiber deformations for a recirculation period in the optoelectronic perimeter security systems.....	112
--	-----

JUBILEES

Anatolij Pavlovich Zazhogin	125
Viktor Konstantinovich Goncharov	127
Indicative abstracts of the papers deposited in BSU.....	129

Журнал включен Высшей аттестационной комиссией Республики Беларусь в Перечень научных изданий для опубликования результатов диссертационных исследований по физико-математическим наукам (в области теоретической, экспериментальной и прикладной физики).

Журнал включен в библиографическую базу данных научных публикаций «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

**Журнал Белорусского
государственного университета. Физика.
№ 2. 2019**

Учредитель:
Белорусский государственный университет

Юридический адрес: пр. Независимости, 4,
220030, г. Минск.

Почтовый адрес: пр. Независимости, 4,
220030, г. Минск.

Тел. (017) 259-70-74, (017) 259-70-75.

E-mail: jphys@bsu.by

URL: <https://journals.bsu.by/index.php/physics>

«Журнал Белорусского государственного университета. Физика» издается с января 1969 г. До 2017 г. выходил под названием «Вестник БГУ. Серия 1, Физика. Математика. Информатика» (ISSN 1561-834X).

Редактор *Т. Р. Джум*
Технический редактор *В. В. Пижкова*
Корректор *Л. А. Меркуль*

Подписано в печать 24.05.2019.
Тираж 130 экз. Заказ 183.

Республиканское унитарное предприятие
«Информационно-вычислительный центр
Министерства финансов Республики Беларусь».
ЛП № 02330/89 от 03.03.2014.
Ул. Кальварийская, 17, 220004, г. Минск.

© БГУ, 2019

**Journal
of the Belarusian State University. Physics.
No. 2. 2019**

Founder:
Belarusian State University

Registered address: 4 Niezaliežnasci Ave.,
Minsk 220030.

Correspondence address: 4 Niezaliežnasci Ave.,
Minsk 220030.

Tel. (017) 259-70-74, (017) 259-70-75.

E-mail: jphys@bsu.by

URL: <https://journals.bsu.by/index.php/physics>

«Journal of the Belarusian State University. Physics» published since January, 1969. Until 2017 named «Vestnik BGU. Seriya 1, Fizika. Matematika. Informatika» (ISSN 1561-834X).

Editor *T. R. Dzhum*
Technical editor *V. V. Pishkova*
Proofreader *L. A. Merkul'*

Signed print 24.05.2019.
Edition 130 copies. Order number 183.

Republican Unitary Enterprise
«Informatsionno-vychislitel'nyi tsentr
Ministerstva finansov Respubliki Belarus'».
License for publishing No. 02330/89, 3 March, 2014.
17 Kal'varyjskaja Str., Minsk 220004.

© BSU, 2019