

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

ИЗВЕСТИЯ

ВОЛГОГРАДСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
ТЕХНИЧЕСКОГО
УНИВЕРСИТЕТА

Серия

ЭЛЕКТРОНИКА, ИЗМЕРИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА,
РАДИОТЕХНИКА И СВЯЗЬ

Выпуск 3

№ 3(51)

Межвузовский сборник научных статей
Издается с января 2004 г.

2009



Волгоград
2009

УДК 519.284+541.183+621.3+539.2

Учредитель: ГОУ высшего профессионального образования
"Волгоградский государственный технический университет"

Сборник зарегистрирован в Управлении регистрации и лицензионной работы в сфере массовых коммуникаций федеральной службы по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия ПИ № ФС77–25660 от 13 сентября 2006 г.

Главный редактор сборника "Известия ВолгГТУ"

д-р хим. наук, проф., член-корр. РАН *И. А. Новаков*

Редакционная коллегия серии: д-р физ.-мат. наук, проф. А. Г. Шеин (научный редактор),
д-р техн. наук, проф. Ю. П. Муха (зам. научного редактора),

д-р физ.-мат. наук, проф., акад. РАЕН О. В. Бецкий,
д-р биол. наук, проф., акад. РАЕН Н. Н. Лебедева,
д-р хим. наук, проф., член-корр. РАЕН А. О. Литинский,
д-р физ.-мат. наук, проф. В. А. Смоляр,
д-р техн. наук, проф. В. П. Шевчук,
д-р техн. наук, проф. А. Н. Шилин,
канд. физ.-мат. наук, доц. А. В. Ермолаев,
канд. техн. наук, доц. И. Ю. Королева,
канд. физ.-мат. наук, доц. Е. Н. Свежинцев,
Т. В. Авчарова (секретарь редколлегии)

Печатается по решению редакционно-издательского совета
Волгоградского государственного технического университета

Известия Волгоградского государственного технического университета : межвуз. сб. науч. ст.
№ 3(51) / ВолгГТУ. – Волгоград, 2009. – 100 с. (Сер. Электроника, измерительная техника, радиотех-
ника и связь. Вып. 3).

ISSN 1990–5297

Представлены работы: по общим вопросам электроники; полупроводниковой, вакуумной электронике и
молекулярной электронике; информационно-измерительным системам в промышленности и медицине; тео-
рии измерений; радиотехнике.

Ил. 62. Табл. 5. Библиогр.: 137 назв.

ISSN 1990–5297

© Волгоградский государственный
технический университет, 2009

СОДЕРЖАНИЕ

I. ЭЛЕКТРОНИКА

ОБЩИЕ ВОПРОСЫ ЭЛЕКТРОНИКИ

- Давидян А. П., Смоляр В. А.*
Решение кинетического уравнения переноса заряженных частиц методом двойного разложения плотности потока по полиномам Лежандра..... 7
- Смоляр В. А., Нгуен Чыонг Тхань Хиеу*
Аналитический подход к вычислению сечения упругого рассеяния электрона на атоме..... 15
- Воронин П. В.*
Стационарные состояния бинарной системы электрически заряженных частиц во внешнем ортогональном магнитном поле..... 19

ПОЛУПРОВОДНИКОВАЯ ЭЛЕКТРОНИКА И НАНОЭЛЕКТРОНИКА

- Заярный В. П.*
Влияние концентрации ловушек в слое полупроводника твердотельных структур на свойства микроприборов, выполненных на их основе..... 24
- Литинский А. О., Васильева Г. Е.*
Квантово-химический расчет энергетического спектра электронов в ионных щелочно-галогидных и LiH кристаллах с дефектами на поверхности..... 26
- Петров М. В., Перминов В. Н., Новиков С. И.*
Энергетический спектр электронов поверхности триоксида молибдена с фторполимерным покрытием..... 32
- Крючков С. В., Кухарь Е. И., Яковенко В. А.*
Осцилляции проводимости графена в поперечном магнитном поле..... 37
- Завьялов Д. В., Конченков В. И., Крючков С. В.*
Постоянный ток в графене, индуцированный двумя взаимно перпендикулярными электромагнитными волнами..... 41

ВАКУУМНАЯ ЭЛЕКТРОНИКА

- Шеин А. Г., Буланцев С. С.*
Вычисление распределения электростатического поля в плоской гребенчатой системе..... 44
- Шеин А. Г., Шамов Е. А.*
Стохастическая модель динамики плоского электронного потока в скрещенных статических электрическом и магнитном полях..... 48

АКУСТОЭЛЕКТРОНИКА И МОЛЕКУЛЯРНАЯ ЭЛЕКТРОНИКА

- Порхун В. И., Поляков И. В.*
Радиоизлучение в спин-спиновых переходах с инверсной населенностью ядер водорода..... 53

II. ИЗМЕРИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА

———— ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ВОПРОСЫ МЕТРОЛОГИИ ————

<i>Муха Ю. П., Секачёв В. А.</i>	
Алгоритм для преобразования программного кода на языке высокого уровня в граф-схему.....	58
<i>Шилин А. Н., Коптелова И. А., Гиркин М. В.</i>	
Использование уравнений совместимости элементов в методике морфологического синтеза оптико-электронных приборов.....	64
<i>Воплов Д. Ю., Литовкин Р. В., Русаков С. А., Жалнина В. С.</i>	
Автоматизация морфологического анализа электрокардиографического сигнала на основе вейвлет-преобразования.....	69

— ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЕ УСТРОЙСТВА В НАУКЕ, ПРОМЫШЛЕННОСТИ, МЕДИЦИНЕ —

<i>Пастухов Ю. В., Сидельникова О. П.</i>	
Метрологические характеристики первичных измерительных преобразователей, содержащих радионуклидную метку.....	73
<i>Шилин А. Н., Макартичян С. В.</i>	
Инструментальная погрешность цифрового диэлькометрического влажномера древесины.....	79
<i>Богатырёв Р. С., Лавеева К. С.</i>	
Оценка функциональности системы управления электромеханическим протезом.....	83
<i>Личков Г. Г., Паринский А. Я.</i>	
Информационно-измерительная система пространственной структуры и свойств диэлькометрических объектов на интеллектуальных радиолокационных датчиках.....	88

———— РАДИОТЕХНИКА ————

<i>Грецов М. В., Грецова Н. В.</i>	
Расчет волновых чисел сегментного волновода с двухслойным заполнением методом конечных разностей.....	91
<i>Стерлигов Н. В., Кальников В. В., Малов В. В., Максимов А. П.</i>	
Высокоскоростная волоконно-оптическая линия передачи с компенсацией внутриканальных нелинейных эффектов.....	95

CONTENS

I. ELECTRONICS

THE GENERAL QUESTIONS OF ELECTRONICS

- Davidyan A. P., Smolyar V. A.*
Solution of the kinetic equation of transport of the charged particles by a method of double decomposition of the flux density on legendre polynomials..... 7
- Smolar V. A., Nguyen Truong Thanh Hieu*
Analytical approach to calculation of elastic scattering cross section for electron atom..... 15
- Voronin P. V.*
Stationary condition of binary system of the charged particles in an external orthogonal magnetic field..... 19

SEMICONDUCTOR AND NANOELECTRONICS

- Zaiarniy V. P.*
The Influence of the Charge Carrier Trapping Centers Concentration at the Semiconductor into the Solid-State Structures on their Properties..... 24
- Litinski A. O., Vasiljeva G. Y.*
Quantum chemical calculation the electronic energy spectra of the ionic alkaline-haloid and lih crystals with the surface defects..... 26
- Petrov M. V., Perminov V. N., Novikov S. I.*
Energy spectrum of electrons molibden trioxide surface with fluoropolymer covering..... 32
- Kruchkov S. V., Kuhar E. I., Yakovenko V. A.*
Graphene conductivity oscillations under the transversal magnetic field..... 37
- Zavyalov D. V., Kontchenkov V. I., Kruchkov S. V.*
Direct current induced by two orthogonally related electromagnetic waves in graphene..... 41

VACUUM ELECTRONICS

- Shein A. G., Bulancev S. S.*
Calculation of distribution of the electrostatic field in flat edge system..... 44
- Shein A. G., Shamov E. A.*
Stochastic model of dynamics flat electronic stream in the crossed static electric and magnetic fields..... 48

ACOUSTOELECTRONICS AND MOLECULAR ELECTRONICS

- Porkhun V. I., Polykov I. V.*
Radiation in flip-flop spins transitions with inversion population nuclear of hydrogen..... 53

II. MEASURING TECHNIC S

———— THEORY OF MEASURING ————

<i>Mucha Y. P., Sekashev V. A.</i>	
Algorithm for transformation of the programme code on language high level in column-scheme.....	58
<i>Shilin A. N., Koptelova I. A., Girkin M. V.</i>	
The use of equations of compatibility in the morphological synthesis technique of optoelectronic devices.....	64
<i>Vopilov D. U., Litovkin R. V., Rusakov S. A., Jhalnina V. S.</i>	
Automatization of morphological analysis of electrocardiographic signal based on wavelet analysis.....	69

———— MEASURING DEVICES IN THE SCIENCE, THE INDUSTRIES, MEDICINE ————

<i>Pastukhov U. V., Sidelnikova O. P.</i>	
Metrology descriptions of primary measurings transformers, containing a radionuklidnuyu mark.....	73
<i>Shilin A. N., Makartichyan S. V.</i>	
The instrumental error of a digital wood hydrometer.....	79
<i>Bogatyryov R. S., Laveeva K. A.</i>	
The estimation of electromechanical artificial limb control system functionality.....	83
<i>Lichkov G. G., Parinsky A. Y.</i>	
Informative instrumentation system of spatial structure and properties of dielectric objects on intellectual radiolocation sensors.....	88

———— RADIOTECHNICS ————

<i>Gretsov M. V., Gretsova N. V.</i>	
Calculation of wave numbers of the segment waveguide with two-layer filling by a method of finite differences.....	91
<i>Sterligov N. V., Kal`nikov V. V., Malov V. V., Maksimov A. P.</i>	
High-speed fibre-optical line of transfer with indemnity of intra-channel nonlinear effects.....	95

ЭЛЕКТРОНИКА

ОБЩИЕ ВОПРОСЫ ЭЛЕКТРОНИКИ

УДК 537.533.7

*А. П. Давидян, В. А. Смоляр***РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ МЕТОДОМ ДВОЙНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ПОТОКА ПО ПОЛИНОМАМ ЛЕЖАНДРА****Волгоградский государственный технический университет**

Получено аналитическое решение кинетического уравнения переноса заряженных частиц в однородной, изотропной, бесконечной среде в приближении непрерывного замедления двойным пространственно-угловым разложением плотности потока в ряды по полиномам Лежандра. Показано, что данный метод решения допускает произвольный вид функции объемной плотности источников заряженных частиц. Решены две стандартные задачи теории переноса с моноэнергетическим мононаправленным и изотропным источником электронов в бесконечной среде и вычислено распределение плотности выделенной энергии в алюминии и олове.

The analytical solution of the kinetic equation for transport of the charged particles in a homogeneous, isotropic, infinite medium in an approximation of continuous deceleration is obtained by a double spatial-angular decomposition of the flux density in series of Legendre polynomials. It is shown, that the given method of a solution supposes an arbitrary volumetric denseness function of sources of the charged particles. Two standard problems of transport theory with a monoenergetic monodirected and isotropic source of electrons in infinite medium are solved, and distributions densenesses at a chosen energy are calculated for aluminium and tin.

Введение. Подавляющее большинство подходов к вычислению характеристик переноса заряженных частиц в твердых телах при теоретическом рассмотрении основано на интегро-дифференциальном кинетическом уравнении Больцмана. Одним из методов на пути отыскания решений кинетического уравнения является метод моментов, где уравнение Больцмана относительно искомой функции сводится к уравнению относительно моментов этой функции, которое, как правило, значительно проще исходного.

В работе [1] с помощью двойного преобразования кинетическое уравнение относительно плотности потока частиц было сведено к дифференциальным уравнениям относительно ее двойных пространственно-угловых моментов и получено решение этих уравнений. Однако обратное восстановление искомой функции по моментам оказывалось невозможным, для этого использовались специальные приближенные методы.

В настоящей работе показано, что кинетическое уравнение в приближении непрерывного замедления допускает аналитическое решение методом моментов; при этом функция плотности потока представляется в виде двойного бесконечного сходящегося ряда.

Метод двойного разложения кинетического уравнения по полиномам Лежандра

Пусть в бесконечной, однородной, изотропной среде имеются объемные источники заряженных частиц, плотность распределения которых произвольна. Необходимо вычислить плотность потока частиц, испущенных объемными источниками, на основе кинетического уравнения Больцмана в приближении непрерывного замедления.

Рассмотрим одномерный случай, при котором плотность объемных источников задана произвольной функцией $Q(z, \theta, E)$ координаты частиц z , угла θ между направлением скоро-

сти и осью z , и энергии E . Приближение непрерывного замедления основано на модели непрерывных потерь энергии, которая приводит к однозначной связи между энергией E и остаточным пробегом R , выражаемой формулой [2]

$$R(E) = \int_0^E \frac{dE}{\beta(E)}, \quad (1)$$

где $\beta(E) = dE/dR$ – тормозная способность вещества. Полный пробег частиц в веществе определяется как $R_0 = R(E_0)$.

В основу вычислений положим кинетическое уравнение Больцмана в приближении непрерывного замедления [1]

$$\begin{aligned} -\frac{\partial F}{\partial R} + \cos \theta \frac{\partial F}{\partial z} = \\ = \int_{4\pi} d\Omega' n_0 \sigma(R, \Theta) [F(z, \theta', R) - F(z, \theta, R)] + \\ + Q(z, \theta, R), \quad (2) \end{aligned}$$

где $2\pi F(z, \theta, R) \sin \theta d\theta dR$ – число частиц, направления движения которых заключены между θ и $\theta + d\theta$ с остаточным пробегом в интервале от R до $R + dR$, пересекающих поверхность сферы единичного радиуса, расположенной на глубине z ; $2\pi \sigma(R, \Theta) \sin \Theta d\Theta$ – эффективное сечение рассеяния, приходящееся на один атом вещества, при котором частицы с остаточным пробегом R рассеиваются на угол между Θ и $\Theta + d\Theta$ в результате столкновения с атомами; n_0 – концентрация атомов вещества.

Приведем уравнение (2) к безразмерному виду, выбрав в качестве масштаба длины величину R_0 , тогда

$$\begin{aligned} -\frac{\partial F}{\partial r} + \cos \theta \frac{\partial F}{\partial x} = \\ = \int_{4\pi} d\Omega' S(r, \Theta) [F(x, \theta', r) - F(x, \theta, r)] + \\ + Q(x, \theta, r), \quad (3) \end{aligned}$$

где $r = R/R_0$, $x = z/R_0$, $S(r, \Theta) = R_0 n_0 \sigma(R, \Theta)$, $F(x, \theta, r) dr = F(z, \theta, R) dR$, $r \in [0; 1]$, $x \in (-\infty; \infty)$.

Для решения кинетического уравнения (3) используем разложение угловой зависимости функций, входящих в данное уравнение, в ряд по ортогональным полиномам Лежандра, в результате чего оно трансформируется в систему связанных между собой дифференциальных уравнений [1]:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial F_l}{\partial r} + \frac{1}{2l+1} \left[(l+1) \frac{\partial F_{l+1}}{\partial x} + l \frac{\partial F_{l-1}}{\partial x} \right] + \\ + S_l(r) F_l(x, r) = Q_l(x, r), \quad (4) \end{aligned}$$

где

$$F_l(x, r) = 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) P_l(\cos \theta) F(x, \theta, r), \quad (5)$$

$$S_l(r) = 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \Theta) [1 - P_l(\cos \Theta)] S(r, \Theta),$$

$$Q_l(x, r) = 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) P_l(\cos \theta) Q(x, \theta, r),$$

$l = 0, 1, 2, \dots$

Коэффициенты разложения $F(x, \theta, r)$, определенные в виде (5), позволяют представить искомую плотность потока в виде ряда

$$F(x, \theta, r) = \frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1/2) F_l(x, r) P_l(\cos \theta). \quad (6)$$

Решение системы уравнений (4) в аналитическом виде не представляется возможным, поэтому Спенсер в работе [1] выполнил переход к пространственно-угловым моментам искомой плотности потока умножением каждого уравнения на x^n и интегрированием по этой переменной:

$$\tilde{F}_{l,n}(r) = \int_{-1}^{+1} dx x^n F_l(x, r). \quad (7)$$

Некоторые моменты $\tilde{F}_{l,n}(r)$ имеют непосредственный физический смысл, например, $\tilde{F}_{0,1}(r)$ – среднее по глубине смещение частиц с остаточным пробегом r ; $\tilde{F}_{0,1}(r)$ – средний косинус рассеяния. Однако по двойным моментам (7) не может быть восстановлена искомая функция $F(x, \theta, r)$, с этой целью Спенсером были предложены специальные приближенные методы восстановления функции по нескольким первым ее моментам [1, 3].

Мы также выполним переход к пространственно-угловым моментам в уравнениях (4), однако пространственную зависимость функций $F_l(x, r)$ и $Q_l(x, r)$ разложим в ряд по ортогональным полиномам Лежандра для последующего восстановления искомой функции

$$F_l(x, r) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1/2) F_{l,n}(r) P_n(x), \quad (8)$$

$$Q_l(x, r) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1/2) Q_{l,n}(r) P_n(x),$$

где $F_{l,n}(r) = \int_{-1}^{+1} F_l(x,r) P_n(x) dx, \quad (9)$

$$Q_{l,n}(r) = \int_{-1}^{+1} Q_l(x,r) P_n(x) dx. \quad (10)$$

Поскольку в качестве масштаба длины мы приняли R_0 , а область определения полиномов $P_n(x)$ является интервал $[-1,1]$, источник частиц должен быть сосредоточен в плоскости $x = 0$, следовательно,

$$Q(x, \theta, r) = \delta(x) q(\theta, r), \quad (11)$$

где $q(\theta, r)$ – угловая и энергетическая зависимости объемной плотности источника. В этом случае ни одна частица, даже если она будет удаляться от места рождения по прямой, не сможет выйти за пределы области определения полиномов Лежандра вследствие потерь энергии.

Заметим, что если источник по пространственной координате не является сингулярным, в качестве масштаба длины достаточно принять половину ширины области распространения частиц.

Моменты (10) функции источника (11) с четными и нечетными индексами n удобно представить одной формулой

$$Q_{l,n}(r) = \delta_{[n/2], n/2} \frac{(-1)^{n/2} n!}{2^n [(n/2)!]^2} q_l(r), \quad (12)$$

где $\delta_{[n/2], n/2}$ – символ Кронекера; $[n/2]$ – целая часть числа $n/2$. Поскольку $\delta_{[n/2], n/2}$ при четном n равен единице, а при нечетном – нулю, то нечетные по n моменты $Q_{l,n}(r)$ будут нулевыми; таким образом, факториал $(n/2)!$ вычисляется только при четных n (число $n/2$ всегда будет целым).

Очевидно также, что при учете рассеяния частиц по направлениям и потерь энергии плотность потока частиц, испущенных плоским источником, на границах области $x \in [-1, 1]$ будет равна нулю:

$$F(-1, \theta, r) = F(1, \theta, r) = 0. \quad (13)$$

Уравнения для двойных пространственно-угловых моментов $F_{l,n}(r)$ получим умножением каждого из уравнений системы (4) на полином $P_n(x)$ и интегрированием, согласно определению (9). В результате имеем

$$-\frac{\partial F_{l,n}}{\partial r} + \frac{1}{2l+1} [(l+1)F_{l+1,n}^*(r) + lF_{l-1,n}^*(r)] + S_l(r)F_{l,n}(r) = Q_{l,n}(r), \quad (14)$$

где введено обозначение

$$F_{l,n}^*(r) = \int_{-1}^{+1} \left(\frac{\partial F_l}{\partial x} \right) P_n(x) dx \quad (15)$$

– коэффициент разложения $\partial F_l / \partial x$ по полиному $P_n(x)$; моменты $Q_{l,n}(r)$ определяются по формуле (12).

Выполнив интегрирование по частям в выражении (15) с учетом условий (13), получаем

$$F_{l,n}^*(r) = - \int_{-1}^{+1} F_l(x,r) P_n'(x) dx. \quad (16)$$

Полиномы Лежандра подчиняются рекуррентному соотношению [4]

$$P_{n+1}'(x) - P_{n-1}'(x) = (2n+1)P_n(x), \quad n = 1, 2, \dots,$$

следовательно, можно написать

$$P_n'(x) = (2n-1)P_{n-1}(x) + P_{n-2}'(x), \quad n = 2, 3, \dots \quad (17)$$

Подставляя $P_n'(x)$ в выражение (16), получаем с учетом определения (9)

$$F_{l,n}^*(r) = -(2n-1)F_{l,n-1}(r) - \int_{-1}^{+1} F_l(x,r) P_{n-2}'(x) dx.$$

Продолжая применять рекуррентное соотношение (17), окончательно получаем выражение для коэффициента разложения $\partial F_l / \partial x$ по полиному $P_n(x)$:

$$F_{l,n}^*(r) = - \left[(2n-1)F_{l,n-1}(r) + (2n-5)F_{l,n-3}(r) + \dots \right] \quad (18)$$

$$F_{l,n} = 0, \quad n < 0.$$

Здесь мы формально положили двойные моменты с отрицательным вторым индексом равными нулю для придания формуле общности. При интегрировании в исходном выражении (15) $F_{l,n}$ с отрицательным вторым индексом не появляются.

Система уравнений (14) с учетом формулы (18) принимает вид:

$$-\frac{\partial F_{l,n}}{\partial r} + S_l(r)F_{l,n}(r) = \frac{l+1}{2l+1} \times \left[(2n-1)F_{l+1,n-1}(r) + (2n-5)F_{l+1,n-3}(r) + \dots \right] + \frac{l}{2l+1} \left[(2n-1)F_{l-1,n-1}(r) + (2n-5)F_{l-1,n-3}(r) + \dots \right] + Q_{l,n}(r). \quad (19)$$

Формальное решение дифференциальных уравнений (19) для пространственно-угловых моментов имеет вид:

$$F_{l,n}(r) = \int_r^1 dr' \exp \left[- \int_r^{r'} dr'' S_l(r'') \right] \left\{ \frac{l+1}{2l+1} \left[(2n-1)F_{l+1,n-1}(r') + (2n-5)F_{l+1,n-3}(r') + \dots \right] + \frac{l}{2l+1} \left[(2n-1)F_{l-1,n-1}(r') + (2n-5)F_{l-1,n-3}(r') + \dots \right] + Q_{l,n}(r') \right\}. \quad (20)$$

В результате, искомая плотность потока может быть выражена через моменты $F_{l,n}(r)$ с помощью формул (6), (8):

$$F(x, \theta, r) = \frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} (l+1/2)(n+1/2) \times F_{l,n}(r) P_n(x) P_l(\cos \theta). \quad (21)$$

Совокупность вычисляемых моментов удобно представить в виде матрицы $[F_{l,n}(r)]$, расположив элементы так, что значение l соответствует индексу строки, а значение n – индексу столбца. Из рекуррентной формулы (20) следует, что для вычисления очередного момента плотности потока $F_{l,n}(r)$ достаточно знать моменты $F_{l\pm 1, n-1}(r)$, $F_{l\pm 1, n-3}(r)$ и т. д., поскольку моменты $S_l(r)$ и $Q_{l,n}(r)$ известны. Очевидно, что для вычисления всей совокупности $F_{l,n}(r)$ сначала необходимо определить моменты нулевого столбца. Из формулы (20) получаем

$$F_{l,0}(r) = \int_r^1 dr' \exp \left[- \int_r^{r'} dr'' S_l(r'') \right] Q_{l,0}(r'),$$

следовательно, данные моменты могут быть вычислены, поскольку определяются известными функциями $S_l(r)$ и $Q_{l,0}(r)$.

Затем вычисляются моменты первого столбца, второго и т. д.

$P_L P_N$ -приближение

В практических расчетах количество вычисляемых моментов не может быть бесконечным, поэтому искомую плотность потока (21) представим приближенным выражением

$$F(x, \theta, r) \approx \frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^L \sum_{n=0}^N (l+1/2)(n+1/2) \times F_{l,n}(r) P_n(x) P_l(\cos \theta), \quad (22)$$

где L, N – целые числа, и назовем это $P_L P_N$ -приближением. Заметим, что процедура вычисления $F_{L,n}(r)$ потребует знания моментов $F_{L+1,n}(r)$, поэтому необходимо принять, что $F_{L+1,n}(r) \approx 0$.

Выясним связь между моментами $F_{l,n}(r)$ и $\tilde{F}_{l,n}(r)$. Поскольку $P_0(x)=1$, $P_1(x)=x$, то сравнивая выражения (7) и (9), получаем совпадение моментов $\tilde{F}_{l,0}(r) \equiv F_{l,0}(r)$, $\tilde{F}_{l,1}(r) \equiv F_{l,1}(r)$. Более того, каждый из моментов $\tilde{F}_{l,n}(r)$ можно выразить через $F_{l,n}(r)$, и наоборот. Например, из равенства

$$P_2(x) = (3x^2 - 1)/2$$

следует, что

$$x^2 = (2P_2(x) + P_0(x))/3.$$

Умножая это выражение на $F_l(x, r)$ и интегрируя по x , получим

$$\tilde{F}_{l,2}(r) = (2F_{l,2}(r) + F_{l,0}(r))/3.$$

Таким образом, решение в $P_L P_N$ -приближении можно рассматривать как обобщение метода моментов, использованного Спенсером, поскольку позволяет, в частности, определить моменты $\tilde{F}_{l,n}(r)$.

Моноэнергетические плоские мононаправленный и изотропный источники в бесконечной среде

Рассмотрим две частные задачи теории переноса на основе общей задачи(3), решение которой получено в виде(20), (21).

Пусть в плоскости $x=0$ расположен моноэнергетический мононаправленный источник, испускающий частицы в направлении $\cos \theta = 1$; тогда выражение для плотности источника в уравнении (3) примет вид:

$$Q(x, \theta, r) = \delta(x)(1/2\pi)\delta(\cos \theta - 1)\delta(r-1). \quad (23)$$

Сравнивая выражения (11) и (23), получаем, что $q(\theta, r) = (1/2\pi)\delta(\cos \theta - 1)\delta(r-1)$, следовательно, коэффициенты $q_l(r)$ в выражении (12) имеют вид:

$$q_l(r) = \delta(r-1).$$

В результате определяем моменты $Q_{l,n}(r)$, входящие в решение (20):

$$Q_{l,n}(r) = \delta_{[n/2], n/2} \frac{(-1)^{n/2} n!}{2^n [(n/2)!]^2} \delta(r-1),$$

которые не зависят от индекса l ; кроме того, $Q_{l,n}(r) = 0$ при нечетном n . Таким образом, решение (20) принимает вид:

$$F_{l,n}(r) = \delta_{[n/2],n/2} \frac{(-1)^{n/2} n!}{2^n [(n/2)!]^2} \exp \left[-\int_r^1 dr' S_l(r') \right] + \int_r^1 dr' \exp \left[-\int_r^{r'} dr'' S_l(r'') \right] \left\{ \frac{l+1}{2l+1} [(2n-1)F_{l+1,n-1}(r') + (2n-5)F_{l+1,n-3}(r') + \dots] + \frac{l}{2l+1} [(2n-1)F_{l-1,n-1}(r') + (2n-5)F_{l-1,n-3}(r') + \dots] \right\}.$$

В рамках второй задачи рассмотрим моноэнергетический изотропный источник, расположенный в плоскости $x = 0$, плотность которого описывается выражением

$$Q(x, \theta, r) = (1/4\pi) \delta(x) \delta(r-1).$$

В этом случае пространственно-угловые мо-

$$F_{l,n}(r) = \delta_{l,0} \delta_{[n/2],n/2} \frac{(-1)^{n/2} n!}{2^n [(n/2)!]^2} \exp \left[-\int_r^1 dr' S_l(r') \right] + \int_r^1 dr' \exp \left[-\int_r^{r'} dr'' S_l(r'') \right] \left\{ \frac{l+1}{2l+1} [(2n-1)F_{l+1,n-1}(r') + (2n-5)F_{l+1,n-3}(r') + \dots] + \frac{l}{2l+1} [(2n-1)F_{l-1,n-1}(r') + (2n-5)F_{l-1,n-3}(r') + \dots] \right\}.$$

Анализ полученного выражения показал, что в $P_L P_N$ -приближении решаемой задачи $F_{l,n}(r) = 0$, если $(l+n)$ – нечетное, а также, если $l > n$. Иначе говоря, оказываются нулевыми все моменты, лежащие под главной диагональю матрицы $[F_{l,n}(r)]$, и моменты с нечетной суммой индексов над главной диагональю (если матрица не квадратная, то вместо главной диагонали имеется в виду линия, на которой лежат элементы с равными индексами), что существенно ускоряет вычисления.

Распределения плотности частиц и плотности выделенной энергии

Получим выражения для наиболее важных в практическом отношении характеристик переноса заряженных частиц: распределения плотности частиц и плотности выделенной в мишени энергии.

Выполнив интегрирование плотности потока $F(x, \theta, r)$ по всем направлениям, получим плотность частиц (плотность потока в единич-

менты функции источника имеют вид:

$$Q_{l,n}(r) = \delta_{l,0} \delta_{[n/2],n/2} \frac{(-1)^{n/2} n!}{2^n [(n/2)!]^2} \delta(r-1).$$

Заметим, что $Q_{l,n}(r) = 0$, если $l > 0$, либо если n – нечетное. Решение (20) для данной задачи принимает вид:

ном интервале пробегов безотносительно к направлению движения)

$$F(x, r) = 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) F(x, \theta, r).$$

Подставляя в эту формулу выражение (22) для плотности потока, получим

$$F(x, r) \approx \sum_{n=0}^N (n+1/2) F_{0,n}(r) P_n(x). \quad (24)$$

Плотность выделенной в мишени потоком заряженных частиц энергии определяется выражением

$$W(x) = \int_0^1 F(x, r) \beta(r) dr;$$

подставляя сюда $F(x, r)$ в виде (24), получим

$$W(x) \approx \sum_{n=0}^N (n+1/2) P_n(x) \int_0^1 F_{0,n}(r) \beta(r) dr. \quad (25)$$

Параметры вещества мишени и частиц пучка

Изложенный выше метод моментов применим для исследования взаимодействия потока заряженных частиц с веществом в том случае,

если кинетическое уравнение (2), на котором базируется $P_L P_N$ -приближение, адекватно описывает их перенос. Следовательно, виды заряженных частиц и интервалы их начальных энергий должны допускать возможность применения модели непрерывных потерь энергии, чтобы установилось однозначное соответствие между пробегом и энергией (1), а взаимодействие с атомами вещества сопровождалось только актами упругого и неупругого рассеяния.

Большое количество работ, в том числе последнего времени, показывает, что кинетическое уравнение (2) применимо для ионов, позитронов и электронов. В настоящей работе объектом исследования являются характеристики переноса электронов.

Параметры вещества мишени и частиц пучка входят в расчетные формулы через тормозную способность вещества $\beta(E)$ и коэффициенты разложения обратной длины упругого рассеяния частиц пучка $S_l(E)$ в ряд по полиномам Лежандра.

Тормозная способность вещества при движении электронов энергией E определяется формулой [1]

$$\beta(E) = 4\pi r_e^2 n Z m_e c^2 \frac{(T+1)^2}{T(T+2)} \ln \left(\frac{1,166T}{J(Z)} \right), \quad (26)$$

где r_e – классический радиус электрона; n – концентрация атомов вещества мишени; Z – атомный номер вещества; m_e – масса электрона; c – скорость света в вакууме; $T = E/m_e c^2$ – энергия электрона в единицах $m_e c^2$, $J(Z) =$

$$= \begin{cases} 13,6 Z, & Z < 10; \\ (9,76 + 58,8 Z^{-1,19}) Z, & Z \geq 10 \end{cases} \text{ – средний потен-}$$

циал ионизации атома, выраженный в единицах эВ.

При вычислении остаточного пробега с помощью формулы (1) в качестве нижнего предела интегрирования выбирается такое значение, чтобы логарифм в выражении (26) не принимал отрицательного значения.

Коэффициенты разложения обратной длины упругого рассеяния $S_l(r)$ нерелятивистских электронов вычисляются по формуле [1]

$$S_l(E) = R_0 2\pi r_e^2 n Z (Z+1) \frac{(T+1)^2}{T^2 (T+2)^2} C_l,$$

где коэффициенты C_l рассчитываются по рекуррентным формулам:

$$C_0 = 0; \quad C_1 = \ln(1 + \eta^{-1}) - 1/(1 + \eta);$$

$$C_{l+1} = (2 + 1/l)(1 + 2\eta)C_l - (1 + 1/l)C_{l-1} - \frac{2 + 1/l}{1 + \eta},$$

η – параметр экранирования, определяемый выражением

$$\eta = \frac{1}{4} \left(\frac{\alpha Z^3}{0,885} \right)^2 \left(1,13 + 3,76(\alpha Z)^2 \frac{(T+1)^2}{T(T+2)} \right) \frac{1}{T(T+2)};$$

$$\alpha = 1/137.$$

Результаты вычислений и их обсуждение

Исследуем результаты решения первой из двух рассмотренных выше задач: вычисление распределения плотности частиц и плотности выделенной энергии плоским, моноэнергетическим, мононаправленным источником электронов в мишенях из алюминия и олова. Источник электронов единичной интенсивности расположен в плоскости $x=0$ и испускает частицы вправо, в область $x > 0$.

Реализация решения в $P_L P_N$ -приближении требует вычисления $(L+1) \times (N+1)$ моментов $F_{l,n}(r)$, поэтому процесс расчета на современном ПК является весьма трудоемким и занимает длительное время. Все приведенные ниже результаты получены в приближении $P_{10} P_{10}$.

На рис. 1, 2 представлены графики плотности остановившихся в соответствующих мишенях электронов при различных значениях начальной энергии, представляющие собой функ-

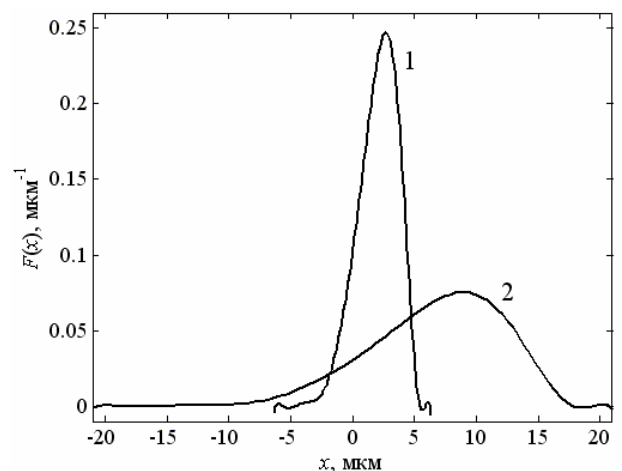


Рис. 1. Распределение плотности остановившихся электронов в алюминии с начальными энергиями $E_0 = 25$ кэВ (кривая 1), $E_0 = 50$ кэВ (кривая 2), рассчитанной по формуле (24)

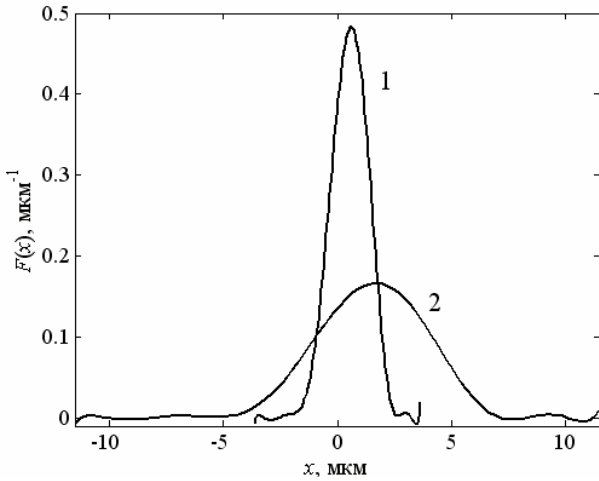


Рис. 2. Распределение плотности остановившихся электронов в олове с начальными энергиями $E_0 = 25$ кэВ (кривая 1), $E_0 = 50$ кэВ (кривая 2), рассчитанной по формуле (24)

ции $F(x, r = 0)$, вычисленные по формуле (24) и обозначенные для краткости как $F(x)$.

Площадь под кривой $F(x)$ есть количество электронов, остановившихся в мишени. Поскольку должно соблюдаться условие баланса частиц (т. е. количество инжектированных в мишень электронов равно количеству электронов, испущенных источником), то значение площади должно быть равно единице (источник имеет единичную интенсивность). В приближении $P_{10}P_{10}$ значение площади под графиками функций $F(x)$ отличалось от единицы, как правило, в четвертом знаке после запятой.

Наличие осцилляций на краях функции распределения плотности электронов является результатом использования $P_L P_N$ -приближения. Физически таких осцилляций при данной постановке задачи быть не может, функция плотности электронов должна плавно спадать до нуля на краях области распространения частиц. Расчет в $P_L P_N$ -приближении более высшего порядка не приводит к заметному изменению характера кривой $F(x)$, происходит лишь уменьшение осцилляций функции на краях. При увеличении N на несколько единиц, амплитуда осцилляций существенно уменьшается, быстро приближаясь к нулю.

Таким образом, для получения функции распределения плотности в подавляющей области распространения частиц использование $P_{10}P_{10}$ -приближения оказывается достаточно эффективным.

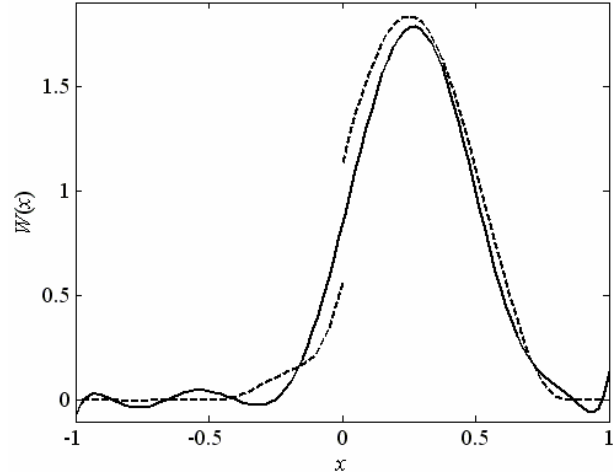


Рис. 3. Распределение плотности выделенной электронами энергии в алюминии с начальной энергией $E_0 = 50$ кэВ: сплошная кривая – расчет по формуле (25); пунктирная кривая – работа [5]; x выражен в единицах $R_0 = 21,06$ мкм, $W(x)$ – в единицах E_0 / R_0

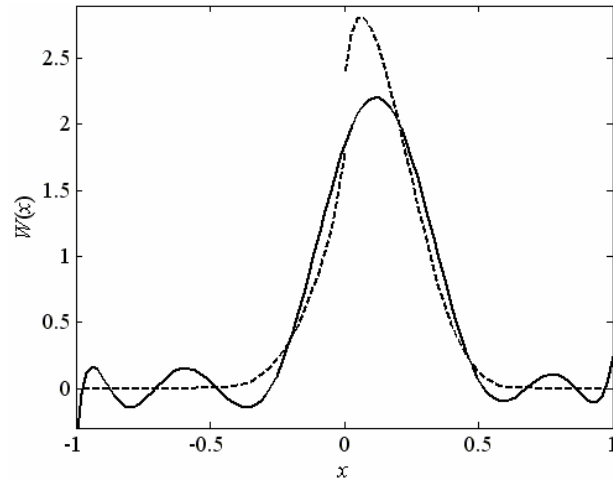


Рис. 4. Распределение плотности выделенной электронами энергии в олове с начальной энергией $E_0 = 50$ кэВ: сплошная кривая – расчет по формуле (25); пунктирная кривая – работа [5]; x выражен в единицах $R_0 = 11,49$ мкм, $W(x)$ – в единицах E_0 / R_0

На рис. 3, 4 представлены графики плотности выделенной потоком электронов энергии в тех же мишенях, вычисленные по формуле (25), а также результаты, полученные Спенсером в работе [5] использованием специальных приближенных процедур и аналитических аппроксимаций тормозной способности вещества и обратной длины упругого рассеяния. Применение данных процедур является возможным тогда, когда заранее известны характерные особенности графика восстанавливаемой функции (поэтому область использования таких методов ограничена). В случае плоского, моноэнергетического, мононаправленного источника в одно-

родной, изотропной, бесконечной среде специальные методы восстановления функции, предложенные Спенсером для нахождения плотности выделенной энергии, позволили достичь согласия с экспериментальными данными, поэтому результаты работы [5] используются нами для сопоставления с результатами $P_L P_N$ -приближения.

Сопоставление результатов показывает, что $P_{10} P_{10}$ -приближение правильно описывает положение пика плотности энерговыделения и полуширину этого распределения; однако имеется ряд особенностей: в плоскости расположения источника $x=0$ отсутствует скачок функции $F(x)$, а на краях данного распределения амплитуда осцилляций больше, чем у плотности частиц $F(x)$, вычисленной при том же порядке точности.

При энергиях, близких к E_0 , электроны, не успевая испытать большое число столкновений с атомами среды, двигаются практически по прямым линиям в области $x > 0$, т. е. длина пути таких электронов характеризует толщину слоя, который они преодолевают; при этом энергия, выделяемая в мишени, равна энергии, теряемой электронами. Поскольку $\beta(E)$ – потерянная на единице пути энергия, а функция $W(x)$ есть количество энергии, выделенной в слое единичной толщины, величина скачка равна тормозной способности вещества при начальной энергии $\beta(E_0)$.

При использовании $P_L P_N$ -приближения любого порядка точности вместо скачка будет наблюдаться плавное возрастание функции $W(x)$ в окрестности $x=0$, и чем выше порядок точности $P_L P_N$, тем более резким оно будет. Причина заключается том, что плотность выделенной энергии определяется не положением частиц при данной энергии, а видом траекторий, на которых и происходит выделение энергии, т. е. $W(x)$ зависит от предыстории, в отличие, например, от плотности частиц $F(x, r)$. Поэтому рассмотрим, как $P_L P_N$ -приближение описывает плотность электронов в мишени в процессе проникновения, от начального этапа до их остановки.

На рис. 5 представлена серия графиков плотности электронов $F(x, r)$ при трех значе-

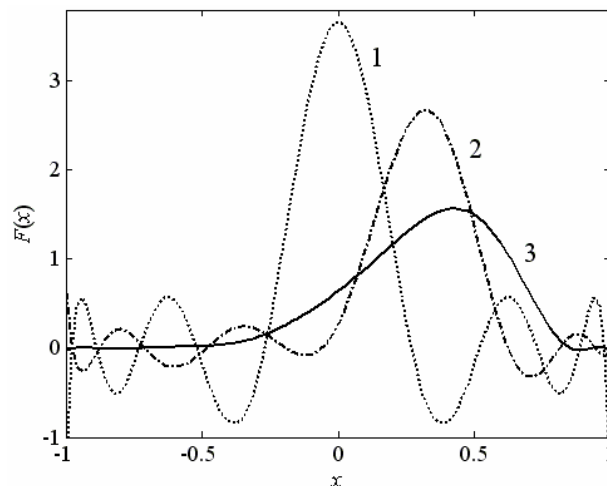


Рис. 5. Распределение плотности электронов в алюминии с начальной энергией $E_0 = 25$ кэВ при различных значениях остаточного пробега, рассчитанное по формуле (24): $r = 1$ (кривая 1); $r = 0,5$ (кривая 2); $r = 0$ (кривая 3); x выражен в единицах $R_0 = 6,35$ мкм, $F(x)$ – в единицах R_0^{-1}

ниях остаточного пробега, соответствующих начальной энергии ($r=1$), половине пройденного электронами пути в мишени ($r=0,5$) и остановке ($r=0$).

Согласно физическому смыслу задачи, электроны с энергией E_0 сосредоточены в плоскости $x=0$; следовательно, $F(x, r=1) = \delta(x)$. Таким образом, кривая 1 на рис. 5 – это дельта-функция, разложенная в ряд по полиномам Лежандра $P_n(x)$, в котором удержано $N+1=11$ слагаемых; фактически, так выглядит плотность дельта-источника в $P_{10} P_{10}$ -приближении. Поскольку реальная дельта-функция заменяется плавной кривой 1, источник оказывается «размазанным» по области $x \in [-1; 1]$, что и приводит к отсутствию скачка функции $W(x)$.

Вид кривой 2 на рис. 5 свидетельствует, что амплитуда осцилляций на краях функции плотности электронов по мере движения в глубину мишени уменьшается и становится минимальной при остановке электронов (кривая 3). Значительная амплитуда осцилляций плотности частиц на начальных этапах переноса обуславливает более выраженный волнообразный характер функции $W(x)$ на краях, чем $F(x)$ в том же $P_L P_N$ -приближении, так как $W(x)$ определяется предысторией процесса переноса.

Площадь под кривой $W(x)$ есть количество энергии, выделенной электронами до остановки в мишени. Условие баланса энергии требует,

чтобы выделенная в мишени энергия была равна суммарной энергии частиц, испускаемых источником. Поскольку источник электронов моноэнергетический, имеет единичную интенсивность, и энергия на графиках рис. 3, 4 выражена в единицах E_0 , площадь должна быть равна единице. В приближении $P_{10}P_{10}$ значения площади лежали в пределах 0,93...0,96.

Отметим, что эффективность $P_L P_N$ -приближения повышается в случае, когда объемная плотность источников частиц не является сингулярной по пространственной и угловой переменным, поскольку в этом случае ряд (21) сходится быстрее.

Выводы. Кинетическое уравнение переноса заряженных частиц в однородной, изотропной, бесконечной среде, в приближении непрерывного замедления допускает аналитическое решение методом моментов; при этом искомая плотность потока представляется в виде двойного, бесконечного, сходящегося ряда. Данный метод решения является универсальным по отношению к виду источников заряженных частиц в мишени, так как допускает

произвольный вид функции объемной плотности источников: периодические и разрывные по пространственной и угловой переменным (и т. п.), распределенные в конечной области пространства. $P_L P_N$ -приближение может эффективно использоваться для вычисления характеристик переноса заряженных частиц и тестирования численных методов решения кинетического уравнения.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Spencer, L. V.* Theory of electron penetration / L. V. Spencer // Physical Review. – 1955. – Vol. 98, N 6. – P. 1597–1615.
2. *Калашников, Н. П.* Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах / Н. П. Калашников, В. С. Ремизович, М. И. Рязанов. – М.: Атомиздат, 1980. – 272 с.
3. *Spencer, L. V.* Penetration and diffusion of x-rays / L. V. Spencer // Physical Review. – 1952. – Vol. 88, N 4. – P. 793–803.
4. *Лебедев, Н. Н.* Специальные функции и их приложения / Н. Н. Лебедев. – М.: Государственное изд-во технико-теоретической литературы, 1953. – 382 с.
5. *Spencer, L. V.* Energy dissipation by fast electrons / L. V. Spencer // Washington: National Bureau of Standards. Monograph 1. – 1959.

УДК 537.533.74

В. А. Смоляр, Нгуен Чьонг Тхань Хиеу

АНАЛИТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ВЫЧИСЛЕНИЮ СЕЧЕНИЯ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА НА АТОМЕ

Волгоградский государственный технический университет

Дифференциальное сечение упругого рассеяния пучка электронов на отдельном атоме вычислено аналитически методом фазовых сдвигов рассеянных сферических волн на основе решения уравнения Дирака. Полученные результаты сравниваются с дифференциальными сечениями упругого рассеяния на атомах золота, полученными численным методом Баньяна и Шонфельдера.

Differential cross sections of elastic scattering of an electron beam on a single atom are calculated analytically using phase shifts of scattered spherical wave based on the solutions of the Dirac equation. The results are compared with the differential cross sections of elastic scattering on the atoms of gold, obtained by numerical method of Bunyan and Schonfelder.

Введение. В ряду наиболее важных проблем транспорта электронных пучков задача описания сечений упругого рассеяния представляется весьма актуальной. В настоящее время для вычисления дифференциальных сечений упругого рассеяния электронов широко используется метод, предложенный Баньяном и Шонфельдером (BS). Этот метод позволяет вычислить дифференциальные сечения упругого рассеяния пучка электронов, энергия которых лежит в интервале энергий от нескольких эВ до нескольких кэВ [1, 2, 3].

Вычислительная схема BS сводится к решению обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка для функции, определяющей фазовые сдвиги рассеянных сферических волн, с начальным условием, в котором роль времени играет расстояние от ядра атома. В области $r \in [0, r_0]$, где r_0 – некоторая произвольно выбранная малая величина это уравнение решается аналитически при замене потенциала атома разложением в степенной ряд по r с удержанием первых четырех членов в разложении. Это позволяет решить задачу аналитически.

чески. Затем это же уравнение, но с потенциалом атома, вычисленным в приближении Томса – Ферми – Дирака [4], решается численно в области $r \in [r_0, \infty)$ с начальным условием, которое представляет собой ранее полученное аналитическое решение для величины $r = r_0$. И хотя выбор величины r_0 не сильно влияет на конечный результат, такой подход приводит к накоплению ошибок приближенного аналитического и последующего численного решения.

В настоящей работе предложен аналитический подход к вычислению фазовых сдвигов рассеянных сферических волн, который исходит из решения уравнений Дирака для электрона в сферически симметричном скалярном потенциальном поле, вычисленном в [5] в приближении Дирака – Хартри – Фока – Слейтера. Решение задачи сводится к непосредственному вычислению фазовых сдвигов по квадратурной формуле Лобатто [7].

За редким исключением используется релятивистская система единиц (РСЕ), в которой масса покоя электрона m_e , постоянная Планка \hbar и скорость света в вакууме c равняются единице. Потенциал атома будем считать скалярным и сферически симметричным. Скалярный потенциал на расстоянии r от ядра атома имеет вид суперпозиции потенциалов Юкавы [5]

$$\phi = \frac{Ze}{r} \sum_{\mu=1}^3 A_{\mu} \exp(-a_{\mu} \alpha_c r),$$

где Z – атомный номер; e – элементарный заряд; α_c – постоянная тонкой структуры, а коэффициенты A_{μ} и a_{μ} для элементов от $Z=1$ до $Z=92$ приводятся в [5]. Потенциальная энергия электрона в этом поле будет даваться выражением

$$\Phi = -\frac{Z\alpha_c}{r} \sum_{\mu=1}^3 A_{\mu} \exp(-a_{\mu} \alpha_c r). \quad (1)$$

Отметим, что в РСЕ $\alpha_c = e^2$.

Релятивистское волновое уравнение Дирака для электрона в операторной форме имеет вид

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \Phi + \alpha_1 \hat{p}_x + \alpha_2 \hat{p}_y + \alpha_3 \hat{p}_z + \alpha_4 \right) \psi = 0, \quad (2)$$

где α_{μ} ($\mu=1; 2; 3; 4$) – матрицы Дирака, а волновая функция ψ является матрицей с одним столбцом и четырьмя элементами в этом столбце

$$\psi = \begin{bmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \\ \psi_3(\vec{r}, t) \\ \psi_4(\vec{r}, t) \end{bmatrix}. \quad (3)$$

В дальнейшем мы будем искать компоненты $\psi_{\mu}(\vec{r}, t)$ в виде

$$\psi_{\mu}(\vec{r}, t) = \psi_{\mu}(\vec{r}) e^{-iWt}, \quad (\mu=1; 2; 3; 4),$$

здесь W есть полная энергия электрона. Очевидно, что

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\mu}(\vec{r}, t) = W \psi_{\mu}(\vec{r}, t). \quad (4)$$

Подставляя в левую часть уравнения (2) волновую функцию (3) и учитывая (4), получаем следующую систему уравнений

$$\begin{cases} (W - \Phi + 1) \psi_1 + \hat{p}_- \psi_4 + \hat{p}_z \psi_3 = 0, \\ (W - \Phi + 1) \psi_2 + \hat{p}_+ \psi_3 - \hat{p}_z \psi_4 = 0, \\ (W - \Phi - 1) \psi_3 + \hat{p}_- \psi_2 + \hat{p}_z \psi_1 = 0, \\ (W - \Phi - 1) \psi_4 + \hat{p}_+ \psi_1 - \hat{p}_z \psi_2 = 0, \end{cases} \quad (5)$$

где $\psi_{\mu} = \psi_{\mu}(\vec{r})$ и $\hat{p}_{\pm} = \hat{p}_x \pm i \hat{p}_y$.

Для свободного электрона, то есть в случае отсутствия внешнего силового поля ($\Phi = 0$), из двух первых уравнений системы (5) следует

$$\begin{cases} \psi_1 = -\frac{\hat{p}_- \psi_4 + \hat{p}_z \psi_3}{W + 1}, \\ \psi_2 = -\frac{\hat{p}_+ \psi_3 - \hat{p}_z \psi_4}{W + 1}. \end{cases} \quad (6)$$

Компоненты ψ_3 и ψ_4 волновой функции, описывающей свободный электрон, есть плоские волны и имеют вид

$$\psi_3 = A e^{i\vec{p}\vec{r}}, \quad \psi_4 = B e^{i\vec{p}\vec{r}}, \quad (7)$$

причем A и B – произвольные постоянные. Подставляя (7) в (6), получаем

$$\begin{cases} \psi_1 = -\frac{p_- B + p_z A}{W + 1} e^{i\vec{p}\vec{r}}, \\ \psi_2 = -\frac{p_+ A - p_z B}{W + 1} e^{i\vec{p}\vec{r}}, \end{cases} \quad (8)$$

где $p_{\pm} = p_x \pm i p_y$. Из уравнений (7) и (8) следует, что величины $|\psi_1|$ и $|\psi_2|$ значительно меньше, чем $|\psi_3|$ и $|\psi_4|$, так как для нерелятивистских электронов $W \sim 1$ и $|\vec{p}| \ll 1$. Поэтому в формуле для плотности вероятности нахождения электрона $\sum_{\mu=1}^4 |\psi_{\mu}|^2$ можно пренебречь компонентам $|\psi_1|$ и $|\psi_2|$. Итак, в дальнейшем нас будут интересовать только компоненты ψ_3 и ψ_4 .

Далее мы предположим, что свободный электрон движется вдоль оси Oz в положительном направлении, а в начальной точке системы координат находится некоторый атом, который является центром рассеяния. С точки зрения квантовой механики, движение свободного электрона связано с распространением плоской волны e^{ikz} , причем

$$k = \sqrt{W^2 - 1} \quad (9)$$

есть волновое число. При больших расстояниях r от ядра атома его разложение по полиному Лежандра в сферической системе координат имеет вид [6]:

$$e^{ikz} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos\theta), \quad (10)$$

где $P_l(\cos\theta)$ – полином Лежандра. В действительности падающий электронный пучок обычно не поляризован. Такой пучок можно рассматривать состоящим из одинакового количества электронов, спины которых соответственно параллельны и антипараллельны направлению распространения пучка.

В результате столкновения с атомом электрон рассеивается по всем направлениям, поэтому рассеянную волну на больших расстояниях от атома можно считать сферической волной $\frac{f}{r} e^{ikr}$ с амплитудой рассеяния f .

Волновая функция ψ , описывающая рассеяние, представляет собой суперпозицию падающей и рассеянной волн. Это значит, что при больших расстояниях r от ядра атома компоненты ψ_3 и ψ_4 имеют асимптотический вид:

$$\psi_{\mu} = e^{ikz} + \frac{f_{\mu}}{r} e^{ikr}, \quad (\mu = 3; 4).$$

С другой стороны, эти компоненты должны удовлетворять волновому уравнению Дирака. В [6] приводятся следующие решения при направлении спинов, антипараллельном направлению движения пучка:

$$\begin{aligned} \psi_3 &= e^{ikz} + \frac{f_a}{r} e^{ikr} = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \left[(l+1) A^a G_l + l B^a G_{-l-1} \right] P_l(\cos\theta), \\ \psi_4 &= \frac{g_a}{r} e^{ikr} = \\ &= \sum_{l=1}^{\infty} \left[-C^a G_l + D^a G_{-l-1} \right] P_l^1(\cos\theta) e^{i\varphi}, \quad (11) \end{aligned}$$

и при направлении спинов, параллельном направлению движения пучка

$$\begin{aligned} \psi_3 &= \frac{g_p}{r} e^{ikr} = \sum_{l=1}^{\infty} \left[A^p G_l - B^p G_{-l-1} \right] P_l^1(\cos\theta) e^{-i\varphi}, \\ \psi_4 &= e^{ikz} + \frac{f_p}{r} e^{ikr} = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \left[(l+1) C^p G_l + l D^p G_{-l-1} \right] P_l(\cos\theta). \quad (12) \end{aligned}$$

Здесь $A^a, A^p, B^a, B^p, C^a, C^p, D^a, D^p$ – неизвестные коэффициенты, G_l является решением следующей системы уравнений:

$$\begin{cases} (W + \Phi + 1)F_l + \frac{dG_l}{dr} - \frac{l}{r}G_l = 0, \\ -(W + \Phi - 1)G_l + \frac{dF_l}{dr} + \frac{l+2}{r}F_l = 0, \end{cases} \quad (13)$$

а G_{-l-1} в уравнениях (11) и (12) – это решение аналогичной пары уравнений, получаемой в результате замены в уравнениях (13) l на $(-l-1)$.

Исключая функцию F_l , находим

$$\begin{aligned} \frac{d^2 G_l}{dr^2} + \left(\frac{2}{r} - \frac{\alpha'}{\alpha} \right) \frac{dG_l}{dr} + \\ + \left[\alpha\beta - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{l}{r} \frac{\alpha'}{\alpha} \right] G_l = 0, \end{aligned}$$

где $\alpha = W + \Phi + 1, \beta = W + \Phi - 1.$ (14)

Подстановка

$$G_l = \frac{\sqrt{\alpha}}{r} Q_l$$

приводит к уравнению

$$\frac{d^2 Q_l}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U_l(r) \right] Q_l = 0, \quad (15)$$

где

$$U_l(r) = 2W\Phi + \Phi^2 + \frac{l+1}{r} \frac{\alpha'}{\alpha} - \frac{3}{4} \frac{\alpha'^2}{\alpha^2} + \frac{1}{2} \frac{\alpha''}{\alpha}, \quad (16)$$

причем α' и α'' есть производные по r функции α , определенной в (14). Аналогичный результат получается также и для функции Q_{-l-1} при замене l на $(-l-1)$.

Асимптотическая форма функций G_l и G_{-l-1} на больших расстояниях r от ядра атома имеет вид [6]:

$$\begin{aligned} G_l &= \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \eta_l\right), \\ G_{-l-1} &= \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \eta_{-l-1}\right). \end{aligned}$$

Величина η_l называется фазовым сдвигом и определяется следующим интегралом:

$$\eta_l = -\frac{\pi}{2} \int_0^{\infty} U_l J_{l+\frac{1}{2}}^2(kr) r dr. \quad (17)$$

Для нахождения неизвестных коэффициентов $A^a, A^p, B^a, B^p, C^a, C^p, D^a, D^p$ в формулах (11) и (12) мы используем равенство

$$\sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}.$$

Отметим, что обе части выражений (11) и (12) не содержат члены с e^{-ikr} , потому что при рассеянии отраженная волна не возникает.

Легко показать, что

$$A^a = C^a = i^l e^{i\eta_l}, \quad B^a = D^a = i^l e^{i\eta_{l-1}}. \quad (18)$$

Подставляя (18) в правую часть выражений (11) и учитывая равенство (10), путем несложных преобразований получим амплитуды рассеяния

$$f_a = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} [(l+1)(e^{2i\eta_l} - 1) + l(e^{2i\eta_{l-1}} - 1)] P_l^1(\cos \theta)$$

$$g_a = \frac{1}{2ik} \sum_{l=1}^{\infty} [-e^{2i\eta_l} + e^{2i\eta_{l-1}}] P_l^1(\cos \theta) e^{i\varphi}.$$

Аналогичным способом для параллельного направления спинов получим

$$f_p = f, \quad g_p = -g e^{-i\varphi},$$

где

$$f = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} [(l+1)(e^{2i\eta_l} - 1) + l(e^{2i\eta_{l-1}} - 1)] P_l(\cos \theta),$$

$$g = \frac{1}{2ik} \sum_{l=1}^{\infty} [-e^{2i\eta_l} + e^{2i\eta_{l-1}}] P_l^1(\cos \theta). \quad (19)$$

Дифференциальное сечение определяется формулой

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 + |g|^2. \quad (20)$$

Полное сечение получим интегрированием дифференциального сечения

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \theta d\theta. \quad (21)$$

Результаты и обсуждение

Ниже приведен рисунок, на котором показаны зависимости дифференциальных сечений упругого рассеяния электрона на атоме золота (Au , $Z = 79$) при различных энергиях электрона, а также для сравнения приведены данные, взятые из электронного архива сечений рассеяния электронов, помещенного в базу данных Физико-технического института РАН им. А. Ф. Иоффе [2].

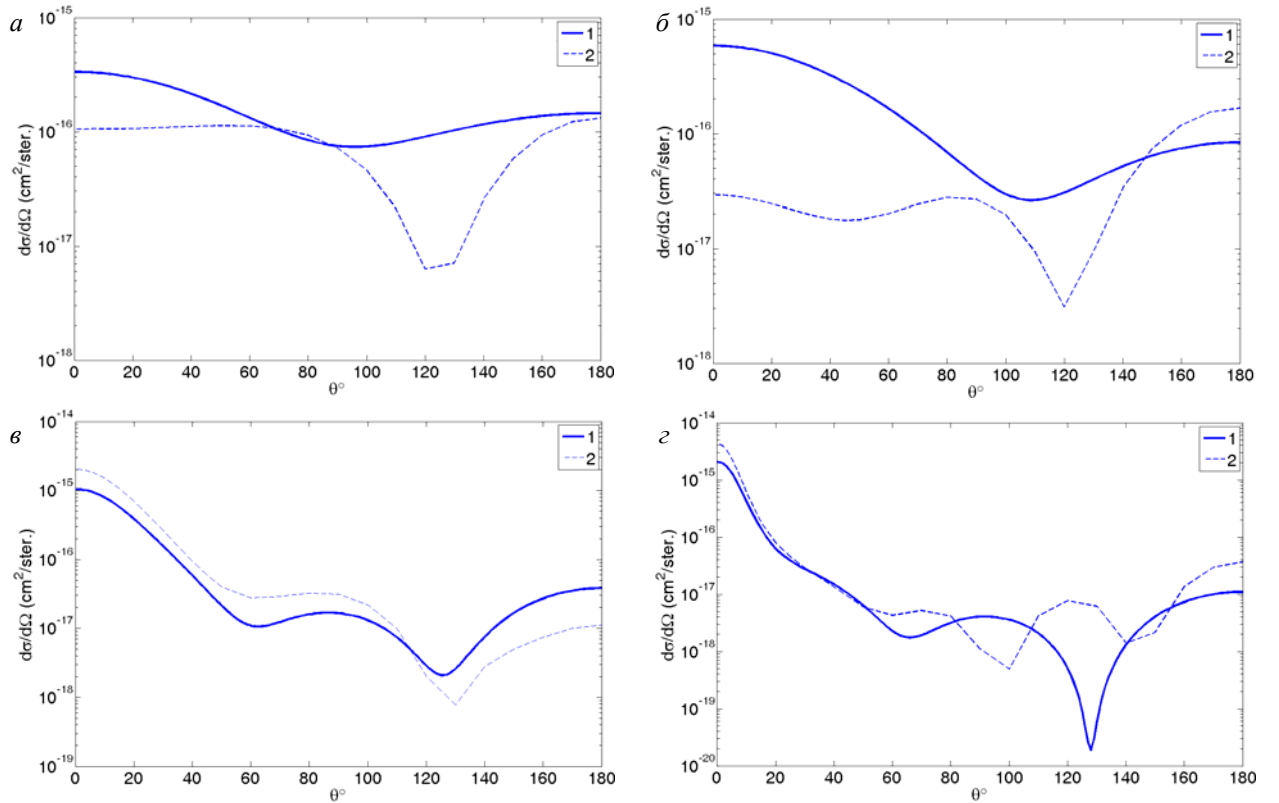


Рис. 1. Дифференциальное сечение упругого рассеяния электрона с энергией 5 эВ (а), 10 эВ (б), 100 эВ (в), 1 кэВ (г) на атоме золота:

1 – вычисления, выполненные в настоящей работе; 2 – данные, взятые из электронного архива Физико-технического института им. А. Ф. Иоффе [2]

Из данного рисунка видно, что существенное различие между нашими результатами и данными, полученными в [2], имеет место при малых (5–100 эВ) энергиях электронов. Причина этого может быть связана с тем, что в настоящей работе применялся более точный атомный потенциал, вычисленный в приближении Дирака – Хартри – Фока – Слейтера [5], а не в приближении Томса – Ферми – Дирака [4], как в [2]. Для электронов с энергиями 100 эВ–1 кэВ зависимости дифференциальных сечений от угла рассеяния имеют весьма сходный вид и различаются лишь по величине, что может быть связано скорее с систематической ошибкой при численных вычислениях, чем с тем, что в настоящей работе применялся иной атомный потенциал. В пользу этого соображения говорит также тот факт, что при больших энергиях дифференциальные сечения практически совпадают.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Bunyan, P. J. Polarization by mercury of 100 to 2000 eV electrons / P. J. Bunyan, J. L. Schonfelder // PROC. PHYS. SOC. – 1965. – Vol. 85. – P. 455–462.
2. Differential and total elastic cross section [Электронный ресурс] / L. Bakaleinikov. – 1998. – Режим доступа: <http://www.ioffe.ru/ES/Elastic/data/e79.dat>.
3. Dapor, M. Elastic scattering calculations for electrons and positrons in solid targets / M. Dapor // J. Appl. Phys. – 1996. – Vol. 79, N 11. – P. 1–6.
4. Bonham R. A., Strand T. G. // J. Chem. Phys. – 1963. – Vol. 39. – P. 2200–2204.
5. Analytical Dirac-Hartree-Fock-Slater screening function for atoms (Z=1–92) / F. Salvat, J. D. Martinez, R. Mayol, J. Parellada // PHYSICAL REVIEW A. – 1987. – Vol. 36, N 2. – P. 467–474.
6. Мотт, Н. Теория атомных столкновений / Н. Мотт, Г. Месси ; под ред. Я. И. Френкеля. – М.: И*Л, 1951. – 446 с.
7. Adaptive Quadrature – Revisited / W. Gander, W. Gautschi // BIT. – 2000 – Vol. 40, N 1. – P. 84–101.

УДК 530 + 531

П. В. Воронин

СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ БИНАРНОЙ СИСТЕМЫ ЭЛЕКТРИЧЕСКИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ВО ВНЕШНЕМ ОРТОГОНАЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

МОУ «Дворец творчества детей и молодежи Красноармейского района г. Волгограда»

Рассматриваются стационарные состояния бинарных систем, образованных электрически заряженными частицами; осуществляется поиск частот обращения частиц по круговым орбитам при наличии внешнего магнитного поля, ортогонального плоскости орбит.

The stationary conditions of the binary systems, which are generated by charged particles, are considered; the search of frequencies of rotation of particles on circular orbits at presence of an external magnetic field, orthogonal plane of orbits, is carried out.

Введение. При отсутствии внешнего магнитного поля две разноименно заряженные частицы могут обращаться по круговым концентрическим орбитам вокруг общего центра масс. Решение этой задачи, являющейся задачей двух тел, хорошо известно.

Однако интерес представляет изменение параметров движения частиц при наличии внешнего магнитного поля, в простейшем случае с вектором магнитной индукции, ортогональным плоскости вращения частиц. Подобные ситуации могут, в принципе, наблюдаться в системах при наличии частиц различного сорта (ионов и электронов).

При этом модифицированная задача двух тел может быть сформулирована следующим образом: *определить частоты орбитального*

обращения пары частиц, движущихся по концентрическим орбитам во внешнем ортогональном магнитном поле таким образом, что расстояние между частицами остается неизменным в процессе их движения. С описанной выше бинарной системой частиц [1] можно связать вращающуюся (синодическую) систему координат, в которой координаты частиц будут неизменными. В этом смысле состояние бинарной системы может быть названо *стационарным*.

Поиск частот, соответствующих стационарным состояниям бинарной системы

Рассмотрим бинарную систему, образованную парой взаимодействующих друг с другом электрически заряженных частиц, обращаю-

щихся по круговым орбитам во внешнем магнитном поле, вектор магнитной индукции которого \mathbf{B} ортогонален орбитам частиц. Будем называть такую систему *стабилизированной во внешнем ортогональном магнитном поле (ВОМП)*.

Расстояния между частицами положим равным d . Пусть первая частица имеет массу M_1 , заряд Q_1 , а масса и заряд второй частицы равны соответственно M_2 и Q_2 . Будем для определенности считать, что $M_2 > M_1$.

Свяжем с рассматриваемой бинарной системой синодическую систему координат, начало O которой находится в центре орбит частиц; ось X проходит через центры частиц, будучи направленной от более массивной частицы к менее массивной; ось Z направлена по вектору угловой скорости вращения системы ω ; ось Y дополняет систему координат до правой (рис. 1).

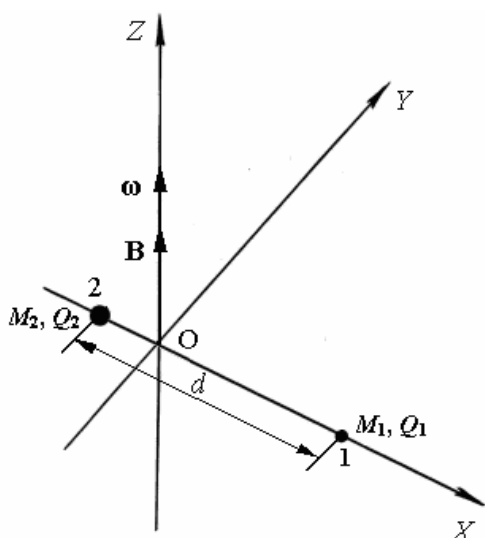


Рис. 1. Бинарная система во внешнем ортогональном магнитном поле

Частицы, двигаясь ускоренно, создают поля Лиенара – Вихерта, которые в нерелятивистском случае можно считать электростатическими. Взаимодействие частиц при этом можно полагать кулоновским.

Найдем координаты частиц во введенной системе координат.

Уравнение, описывающее орбитальное движение первой частицы, локализованной в точке $(x_1, 0, 0)$ вращающейся системы координат, имеет вид:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_1 Q_2}{d^2} + \omega^2 x_1 M_1 + Q_1 B_z \omega x_1 = 0, \quad (1)$$

где B_z – z -компонента вектора магнитной индукции \mathbf{B} внешнего магнитного поля, который, в силу ортогональности, может быть представлен в виде $\mathbf{B} = \{0, 0, B_z\}$.

Уравнение, описывающее орбитальное движение второй частицы, локализованной в точке $(x_2, 0, 0)$ вращающейся системы координат, в свою очередь имеет вид:

$$-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_1 Q_2}{d^2} + \omega^2 x_2 M_2 + Q_2 B_z \omega x_2 = 0, \quad (2)$$

причем $x_2 = x_1 - d$. (3)

Сложив почленно уравнения (1) и (2), получим

$$\omega^2 (x_1 M_1 + x_2 M_2) + B_z \omega (x_1 Q_1 + x_2 Q_2) = 0. \quad (4)$$

Уравнение (4) с учетом (3) может быть представлено в виде

$$\left[\omega (M_1 + M_2) + B_z (Q_1 + Q_2) \right] x_1 - (\omega M_2 + B_z Q_2) d = 0. \quad (5)$$

Отсюда следует, что выражение для абсциссы первой частицы может записано в виде

$$x_1 = \frac{\omega \mu + q \omega_\chi}{\omega + \omega_\chi} d, \quad (6)$$

где $\mu = \frac{M_2}{M_1 + M_2}$ – (7)

массовый параметр бинарной системы;

$$q = \frac{Q_2}{Q_1 + Q_2} -$$

зарядовый параметр бинарной системы, а

$$\omega_\chi = \frac{Q_1 + Q_2}{M_1 + M_2} B_z - \quad (8)$$

z -компонента вектора обобщенной циклотронной частоты системы

$$\omega_\chi = \frac{Q_1 + Q_2}{M_1 + M_2} \mathbf{B}. \quad (9)$$

При этом выражение для абсциссы второй частицы записывается в виде

$$x_2 = -\frac{\omega(1-\mu) + (1-q)\omega_\chi}{\omega + \omega_\chi} d. \quad (10)$$

Как следует из выражений (6) и (10), движение частиц во внешнем ортогональном магнитном поле осуществляется не вокруг их общего центра масс: частицы могут располагаться даже в одной полуплоскости относительно оси вращения системы.

Найдем частоты вращения бинарной системы, стабилизированной в ВОМП.

Подстановка (6) в (1) позволяет прийти к уравнению:

$$\left\{ \frac{\omega(\omega\mu + q\omega_\chi)[\omega(1-\mu) + \omega_\chi(1-q)]}{q(1-q)(\omega + \omega_\chi)} \right\} \times \frac{(M_1 + M_2)d^3}{(Q_1 + Q_2)^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}. \quad (11)$$

Введем в рассмотрение величину

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q(1-q)}{\mu(1-\mu)} \frac{(Q_1 + Q_2)^2}{(M_1 + M_2)d^3}}, \quad (12)$$

которая может быть названа *собственной частотой* вращения бинарной системы (заметим, что для системы, стабилизированной в ВОМП, собственная частота может быть мнимой величиной). С помощью (12) уравнение (11) можно записать в виде

$$\omega^3 + \left[\frac{q}{\mu} + \frac{1-q}{1-\mu} \right] \omega_\chi \omega^2 + \left[\frac{q(1-q)}{\mu(1-\mu)} \omega_\chi^2 - \omega_0^2 \right] \omega - \omega_\chi \omega_0^2 = 0. \quad (13)$$

Особым случаем является ситуация, когда при различных массах заряды частиц одинаковы, но противоположны по знаку, то есть $Q_1 = -Q_2$. При этом $\omega_\chi = 0$, $q = \infty$, но

$$\lim_{Q_1 \rightarrow -Q_2} (q\omega_\chi) = \frac{Q_2}{M_1 + M_2} B_z.$$

В данном случае, как нетрудно показать, уравнение (13) принимает вид:

$$\omega^3 + \frac{M_2 - M_1}{M_1 M_2} Q_1 B_z \omega^2 - \left[\frac{Q_1^2 B_z^2}{M_1 M_2} + \omega_0^2 \right] \omega = 0. \quad (14)$$

Уравнение (14) имеет три корня:

$$\omega_1 = 0, \quad \omega_{2,3} = \frac{1}{2} \left[-\frac{M_2 - M_1}{M_1 M_2} Q_1 B_z \pm \sqrt{\left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \right)^2 Q_1^2 B_z^2 + 4\omega_0^2} \right],$$

два из которых лишены физического смысла. Ясно, что физического смысла не имеет корень $\omega = 0$, поскольку он соответствует движению частиц по орбитам с бесконечно большими радиусами. Кроме того, корни должны быть положительными величинами, так как ось Z вращающейся системы координат направлена по вектору ω . Следовательно, единственным корнем уравнения (14), обладающим физическим смыслом, является

$$\omega = \frac{1}{2} \left[\sqrt{\left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \right)^2 Q_1^2 B_z^2 + 4\omega_0^2} - \frac{M_2 - M_1}{M_1 M_2} Q_1 B_z \right]. \quad (15)$$

Во всех остальных случаях, когда зарядовый параметр бинарной системы q имеет определенное числовое значение, уравнение (13) может быть решено относительно ω методом Кардано [2].

Введем в рассмотрение вспомогательные величины

$$P = - \left[\left(\frac{q}{\mu} \right)^2 - \frac{q(1-q)}{\mu(1-\mu)} + \left(\frac{1-q}{1-\mu} \right)^2 \right] \frac{\omega_\chi^2}{3} - \omega_0^2 \quad (16)$$

и

$$K = \left[\left(\frac{q}{\mu} \right)^2 \frac{2q - 3\mu + q\mu}{\mu(1-\mu)} + \left(\frac{1-q}{1-\mu} \right)^2 \frac{2\mu - 3q + q\mu}{\mu(1-\mu)} \right] \times \frac{\omega_\chi^3}{27} + \frac{q - 2\mu - 2q\mu + 3\mu^2}{3\mu(1-\mu)} \omega_0^2 \omega_\chi, \quad (17)$$

$$D = \left(\frac{P}{3} \right)^3 + \left(\frac{K}{2} \right)^2. \quad (18)$$

При этом выражения для корней уравнения (13) могут быть записаны в виде

$$\omega_1 = R_1 + R_2 - \left[\frac{q}{\mu} + \frac{1-q}{1-\mu} \right] \omega_\chi, \quad (19)$$

$$\omega_2 = \frac{i\sqrt{3}-1}{2} R_1 - \frac{i\sqrt{3}+1}{2} R_2 - \left[\frac{q}{\mu} + \frac{1-q}{1-\mu} \right] \omega_\chi, \quad (20)$$

$$\omega_3 = -\frac{i\sqrt{3}+1}{2} R_1 + \frac{i\sqrt{3}-1}{2} R_2 - \left[\frac{q}{\mu} + \frac{1-q}{1-\mu} \right] \omega_\chi, \quad (21)$$

$$\text{где } R_1 = \sqrt[3]{-\frac{K}{2} + \sqrt{D}}; \quad R_2 = \sqrt[3]{-\frac{K}{2} - \sqrt{D}}; \quad i = \sqrt{-1}. \quad (22)$$

Выражения (19)–(21) позволяют построить графики зависимостей

$$\frac{\omega_1}{|\omega_0|} = f_1 \left(\frac{\omega_\chi}{|\omega_0|} \right), \quad \frac{\omega_2}{|\omega_0|} = f_2 \left(\frac{\omega_\chi}{|\omega_0|} \right) \text{ и } \frac{\omega_3}{|\omega_0|} = f_3 \left(\frac{\omega_\chi}{|\omega_0|} \right),$$

где f_1 , f_2 и f_3 – функции, определяемые указанными выражениями.

Данные зависимости можно назвать *циклотронно-частотными характеристиками (ЦЧХ)* бинарной системы.

Анализ циклотронно-частотных характеристик бинарных систем

Математический анализ уравнения (11) показывает, что прямые

$$\frac{\omega}{|\omega_0|} = -\frac{q}{\mu} \frac{\omega_\chi}{|\omega_0|}, \quad \frac{\omega}{|\omega_0|} = -\frac{1-q}{1-\mu} \frac{\omega_\chi}{|\omega_0|} \quad \text{и} \quad \frac{\omega}{|\omega_0|} = 0$$

являются асимптотами кривых ЦЧХ, а при $\frac{\omega_\chi}{|\omega_0|} \rightarrow 0$ одна из кривых ЦЧХ может быть аппроксимирована прямой $\frac{\omega}{|\omega_0|} = -\frac{\omega_\chi}{|\omega_0|}$. Дадим

краткий физический комментарий этим математическим результатам.

$$\text{Случай } \frac{\omega}{|\omega_0|} \rightarrow -\frac{q}{\mu} \frac{\omega_\chi}{|\omega_0|} \quad \text{и} \quad \frac{\omega}{|\omega_0|} \rightarrow -\frac{1-q}{1-\mu} \frac{\omega_\chi}{|\omega_0|}$$

реализуются в сильном ВОМП ($|\omega_\chi| \gg |\omega_0|$) на высоких частотах орбитального движения частиц ($\omega \gg |\omega_0|$), когда сила Кулона, действующая на одну из частиц со стороны другой, практически компенсируется силой Лоренца, действующей на нее в ВОМП, будучи противоположной ей по направлению. Эта частица, как следует из (6) и (10), совершает движение по орбите с малым радиусом, в то время как другая частица фактически обращается вокруг нее по орбите радиуса d .

Случай $\frac{\omega}{|\omega_0|} \rightarrow 0$ реализуется в сильном ВОМП, при векторе обобщенной циклотронной частоты системы ω_χ , направленном противоположно вектору угловой скорости вращения системы ω . В данном случае магнитное поле является столь сильным, что стационаризация орбитального движения частиц оказывается возможной при их движении со скоростями значительно меньшими $\omega_0 d$ (скорости частиц равны $|1-q|\omega d$ и $|q|\omega d$), поскольку действующие на частицы силы Лоренца при $|\omega_\chi| \gg |\omega_0|$ весьма значительны.

Случай $\frac{\omega}{|\omega_0|} \rightarrow -\frac{\omega_\chi}{|\omega_0|}$ реализуется в относительно слабом ВОМП ($|\omega_\chi| \ll |\omega_0|$) при векторе обобщенной циклотронной частоты системы ω_χ , направленном противоположно вектору угло-

вой скорости вращения системы ω . При этом стационаризация движения системы достигается за счет высоких скоростей линейного движения частиц по орбитам, имеющим большие радиусы (порядка $\frac{|q-\mu|}{\varepsilon} d$, где $\varepsilon = \left| \frac{\omega}{\omega_\chi} + 1 \right|$),

что приводит к появлению значительных по величине сил Лоренца, сравнимых по модулю с силами кулоновского взаимодействия частиц. Частицы в рассматриваемом случае находятся в одной полуплоскости относительно оси вращения системы.

Рассмотрим синхротронно-частотные характеристики конкретных бинарных систем. На рис. 2 приведены ЦЧХ бинарной системы с $q = 0,8$ и $\mu = 0,6$.

Собственная частота такой системы, как следует из (12), является мнимой величиной, однако во внешнем ортогональном магнитном поле оказывается возможным стационарное вращение такой системы. При этом вектор обобщенной циклотронной частоты системы ω_χ должен быть направлен против вектора угловой скорости вращения системы ω .

Как видно из рис. 2, при $\omega_\chi < 0$ рассматриваемая система, вообще говоря, может находиться в нескольких стационарных состояниях.

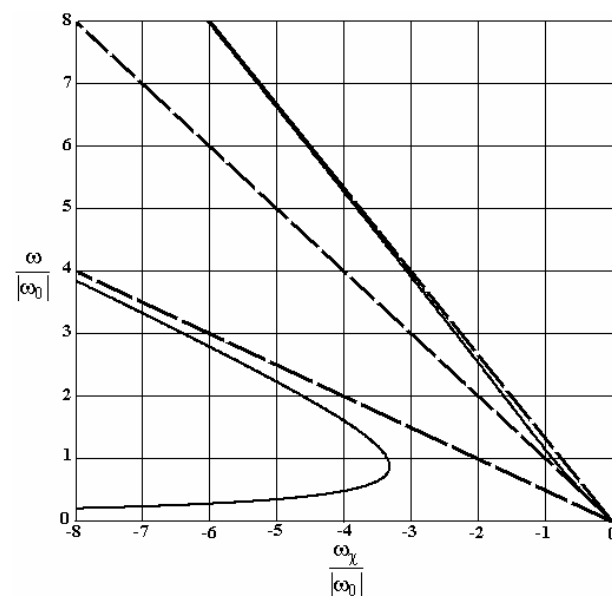


Рис. 2. Циклотронно-частотные характеристики бинарной системы с $q = 0,8$ и $\mu = 0,6$. Сплошными линиями нанесены кривые зависимостей $\omega/|\omega_0|$ от $\omega_\chi/|\omega_0|$, а пунктирными — асимптоты этих кривых

Как показывают расчеты, при $-3,3237|\omega_0| < \omega_\chi < 0$ системе соответствует лишь одно стационарное состояние при $\omega_\chi = -3,3237|\omega_0|$ – два стационарных состояния с частотами $\omega = 0,8747|\omega_0|$ и $\omega = 4,3440|\omega_0|$, а при $\omega_\chi < -3,3237|\omega_0|$ система может быть стабилизирована в ВОМП в трех состояниях.

На рис. 3 приведены ЦЧХ бинарной системы с $q=1,5$ и $\mu=0,6$. Данная система сформирована частицами с противоположными по знаку зарядами и характеризуется действитель-

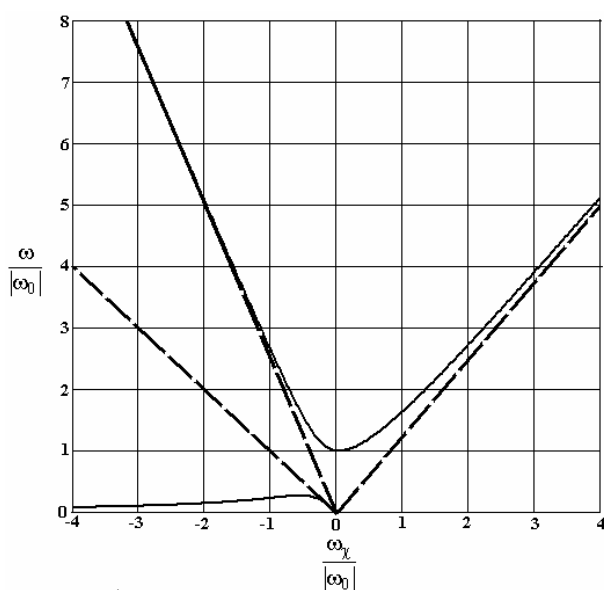


Рис. 3. Циклотронно-частотные характеристики бинарной системы с $q=1,5$ и $\mu=0,6$. Сплошными линиями нанесены кривые зависимостей $\omega/|\omega_0|$ от $\omega_\chi/|\omega_0|$, а пунктирными – асимптоты этих кривых

ной собственной частотой. В отсутствии внешнего поля, когда $\omega_\chi = 0$, как и следовало ожидать, стационарному состоянию системы соответствует $\omega = \omega_0$, что визуализируется на графике. Из ЦЧХ также видно, что при $\omega_\chi > 0$ системе соответствует лишь одно стационарное состояние, в то время как при $\omega_\chi < 0$ система может быть стабилизирована в двух состояниях – высокочастотном и низкочастотном. Стабилизация в трех состояниях для такой системы невозможна.

Выводы. Сравнение рис. 2 и 3 позволяет сделать вывод о том, что ЦЧХ систем, образованных частицами с одинаковыми и противоположными по знаку зарядами, качественно различны. Этот факт может быть объяснен тем обстоятельством, что системы, образованные частицами с разноименными зарядами, могут существовать и без наличия внешнего магнитного поля, в то время как системы частиц с одноименными зарядами являются диссипативными, и удержание частиц в них возможно лишь при наличии внешних сил, каковыми в рассматриваемом случае являются силы Лоренца, действующие на частицы в ВОМП.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Воронин, П. В. Трехмерная ограниченная задача трех тел в условиях кулоновского и радиационного электромагнитного взаимодействия / П. В. Воронин // Известия Волгоградского государственного технического университета: межвуз. сб. науч. ст. № 6 (32) / ВолгГТУ. – Волгоград, 2007. – С. 12–18. (Сер. Электроника, измерительная техника, радиотехника и связь). Вып. 1.
2. Корн, Г. Справочник по математике для научных работников и инженеров. Определения, теоремы, формулы / Г. Корн, Т. Корн. – М.: Наука, 1968. – 720 с.

УДК 537.8+621.38

В. П. Заярный

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ЛОВУШЕК В СЛОЕ ПОЛУПРОВОДНИКА ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СТРУКТУР НА СВОЙСТВА МИКРОПРИБОРОВ, ВЫПОЛНЕННЫХ НА ИХ ОСНОВЕ

Волгоградский государственный технический университет

Исследовалось влияние концентрации центров захвата носителей заряда, локализованных на моноэнергетическом уровне (МУ) полупроводника в составе твердотельных гетероструктур (в нашем случае структуры типа «металл – диэлектрик – полупроводник», у которых слой полупроводника – кремний – легирован титаном) для изготовления приборов с переносом заряда на их основе. Выявлена зависимость от частоты основных характеристик (эффективного частотного фактора и порядка зарядовых процессов), определяющих потери заряда при его взаимодействии с электрическими полями радиочастотного диапазона.

The influence of the charge carrier trapping centers concentration localized at the semiconductor monoenergetic level (ML) included into the solid-state structures (in our case, those are of the “metal-dielectric-semiconductor” type, the semiconductor (silicon) layer being a titanium alloy) for manufacturing the devices with the charge transfer has been investigated. The dependence upon the frequencies of the fundamental characteristics (i.e. the effective frequency coefficient and the order of the charge processes) that determine the losses of the charge while its interacting on the electric fields of the waveband has become clear.

Известно [1], что внесение легирующей примеси в слой полупроводника приводит к появлению моноэнергетических уровней (МУ) с концентрацией ловушек, пропорциональной концентрации легирующей примеси. В данном случае исследуется влияние концентрации этих ловушек N_t в приповерхностной области полупроводника структур типа «металл (Al) – диэлектрик (SiO_2) – полупроводник (Si)» на их основные характеристики, такие как эффективный частотный фактор ω_3 и порядок кинетики зарядовых процессов на МУ m , определяющие потери сигнального заряда у микроэлектронных приборов при его переносе. Перенос сигнального заряда осуществляется подачей сдвинутых по фазе импульсов напряжения на гетероструктуры, расположенные в ряд. При этом под слоем диэлектрика в приповерхностной области полупроводника соответствующих структур при воздействии импульсного электрического поля формируются потенциальные ямы для неосновных носителей заряда (в нашем случае электронов), куда инжектируются сигнальные зарядовые пакеты с последующим переносом вдоль поверхности полупроводника [2]. В процессе переноса сигнального заряда происходит его захват на ловушки, имеющиеся в приповерхностной области полупроводника при наличии электрического поля (потенциальной ямы) и его эмиссия из ловушек при снятии

поля и перемещении заряда в соседнюю потенциальную яму.

Определение указанных выше характеристик исследовавшихся гетероструктур производилось по экспериментально измеренным пикам термостимулированных токов деполяризации (ТСТД), аналогично пикам, исследовавшимся в [2] (там же описана методика определения значений ω_3 и m).

Измеренные пики ТСТД в нашем случае можно описать соотношениями, полученными из модельных представлений, приведенных в [3]:

$$I(T) = q \mu t_p \omega_3 E N_t S \exp[-E_t/kT - \int_{T_0}^T (\omega_3/\beta) \times \exp(-E_t/kT') dT'], \quad (1)$$

в случае слабого перезахвата носителей заряда на имеющемся МУ в слое полупроводника (для него $t_p \ll t_3$, где t_p и t_3 – времена релаксации заряда (опустошения ловушек) и захвата заряда на ловушки) и

$$I(T) = q \mu t_p/t_3 \omega_3 E N_t S \exp[-E_t/kT - \int_{T_0}^T (\omega_3 t_p/\beta) \exp(-E_t/kT') dT'], \quad (2)$$

в случае сильного перезахвата (для него $t_p \gg t_3$), что позволило взять их за основу при определении значений ω_3 и m . В этих выражениях

$I(T)$ – модельное представление пиков ТСТД (T – абсолютная температура); q – единичный заряд; μ – подвижность носителей заряда; E – средняя напряженность электрического поля в гетероструктуре при воздействии на нее приложенного напряжения; β – скорость нагрева образца при измерении пиков ТСТД; k – постоянная Больцмана; E_t – энергия активации МУ; S – площадь гетероструктуры; T^i – параметр интегрирования по ширине пика ТСТД. Методика определения концентрации ловушек N_t на МУ по известной концентрации легирующей примеси приведена в [1].

При использовании выражений (1), (2) и методики определения эффективного частотного фактора, были получены его значения для исследованных гетероструктур на основе кремния, легированного титаном в различных концентрациях. Полученная нами экспериментальная зависимость ω_3 от N_t для этого случая приведена на рис. 1. Видно, что с увеличением N_t значения ω_3 также возрастают. В [3] подобная зависимость была получена численным моделированием, но оказалась нелинейной, вопреки ожидаемой линейной (согласно приведенному там же обоснованию). В нашем случае ее нелинейность находится в пределах статистического значения погрешности измерений.

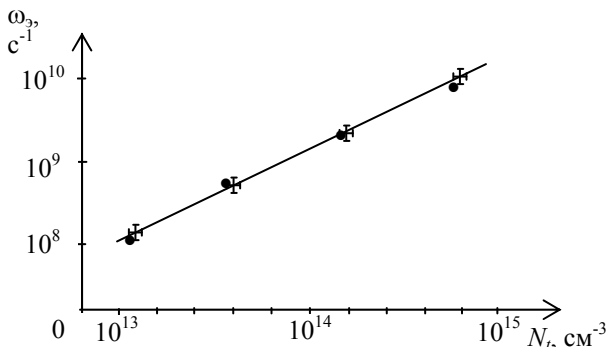


Рис. 1. График зависимости частотного фактора зарядовых процессов в гетероструктуре от концентрации ловушек на моноэнергетическом уровне в слое кремния, легированном титаном

В [2] нами уже показано, что увеличение эффективного частотного фактора ω_3 приводит к уменьшению потери сигнального заряда при его переносе у приборов с зарядовой связью (ПЗС), выполненных на основе подобных гетероструктур. Однако в данном случае при увеличении N_t также будет иметь место тенденция к увеличению потери сигнального заряда при

его переносе за счет повышения плотности разрешенных состояний в запрещенной зоне полупроводника гетероструктур (показано далее).

Полученная нами по экспериментально измеренным пикам ТСТД зависимость порядка кинетики m от концентрации ловушек на МУ N_t с использованием модельных представлений (1), (2) приведена на рис. 2.

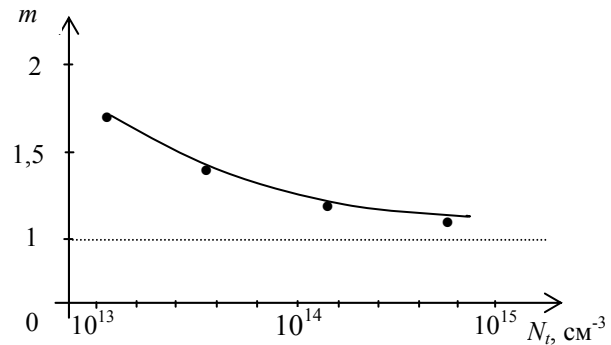


Рис. 2. График зависимости порядка кинетики зарядовых процессов от концентрации ловушек на моноэнергетическом уровне в кремнии, легированном титаном

Из рисунка видно, что в этом случае изменение порядка кинетики нелинейное и имеет тенденцию к уменьшению с увеличением N_t , что должно приводить к уменьшению степени перезахвата сигнального заряда у ПЗС при его переносе (штриховая линия на графике означает, что в модельных представлениях всегда значения $m \geq 1$).

Характер приведенных на рис. 1 зависимостей для одних и тех же значений N_t также хорошо согласуется с соотношением, связывающим значения ω_3 и m [3]:

$$\omega_3 \approx (E_t \beta / kT_m) \exp(-E_t / kT_m) \times [1 + (m-1) 2kT_m / E_t]^{-1},$$

где T_m – температурное положение максимума данного пика ТСТД.

Однако внесение легирующей примеси в слой полупроводника подобных структур приводит как к появлению МУ, так и к увеличению плотности поверхностных состояний N_{ss} в запрещенной зоне полупроводника вблизи границы раздела «диэлектрик – полупроводник» [1], что должно увеличивать неэффективность ϵ_{ss} переноса сигнального заряда у ПЗС (т. е. его потери). Для исследованных гетероструктур нами экспериментально установлена зависимость усредненного значения N_{ss} от концентрации ловушек N_t на МУ, обусловленных наличием легирующей примеси (титана) разной

концентрации в слое кремния (значения N_{ss} получены методом высокочастотных вольт-фарадных характеристик). Эта зависимость приведена на рис. 3 и подтверждает факт увеличения усредненных значений N_{ss} при увеличении концентрации легирующей примеси для исследованных структур.

Несмотря на то, что приборы с зарядовой связью на основе данных гетероструктур нами не исследовались (из-за их отсутствия), существует соотношение [4], связывающее значения ϵ_{ss} и N_{ss} , с помощью которого можно построить ожидаемую (прогнозируемую) зависимость ϵ_{ss} от N_{ss} . Оно имеет вид:

$$\epsilon_{ss} = q kT N_{ss} / (C_d V_g) \ln(p+1), \quad (3)$$

где $C_d V_g$ – поверхностная плотность сигнального заряда; p – число фаз у ПЗС. Для значений $C_d \approx 70$ пФ (определено нами по измеренным высокочастотным вольт-фарадным характеристикам), $V_g = 10$ В, $p = 3$ (типовое значение) зависимость, полученная в соответствии с (3), будет иметь вид, показанный на рис. 3. Характер этой зависимости такой же, как и у аналогичной представленной в [2]. Там же приведены граничные значения ϵ_{ss} , по которым можно определить значения N_t , при которых ПЗС на основе данных гетероструктур сохраняет работоспособность. Из сравнения полученной характеристики рис. 3 и данных, приведенных в [2], следует, что в нашем случае работоспособность могут сохранять ПЗС на основе гетероструктур,

имеющих значение N_t не более $1,5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ (ему соответствует $\epsilon_{ss} = 5 \cdot 10^{-3}$) в режиме формирования сигналов изображения и не более $N_t = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ ($\epsilon_{ss} = 4 \cdot 10^{-2}$) в режиме логической обработки сигналов.

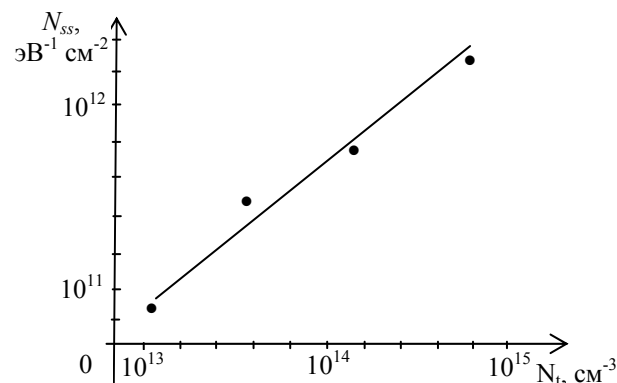


Рис. 3. Зависимость усредненной плотности поверхностных состояний гетероструктур от концентрации ловушек на МУ в слое полупроводника

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Зи, С. Физика полупроводниковых приборов / С. Зи. – М.: Мир, 1984. – 456 с.
2. Заярный В. П. Исследование зарядовых и частотных свойств твердотельных гетерогенных структур с зарядовой связью / В. П. Заярный // Известия вузов. Радиопизика. – 2002. – Т. 45. Вып. 5. – С. 427–432.
3. Гороховатский, Ю. А. Термоактивационная токовая спектроскопия высокоомных полупроводников и диэлектриков / Ю. А. Гороховатский, Г. А. Бордовский. – М.: Наука, 1991. – 248 с.
4. Барб, Д. Ф. Приборы с зарядовой связью / Д. Ф. Барб. – М.: Мир, 1982. – 240 с.

УДК 539.2:530.145

А. О. Литинский, Г. Ю. Васильева

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ЭЛЕКТРОНОВ В ИОННЫХ ЩЕЛОЧНО-ГАЛОИДНЫХ И LiH КРИСТАЛЛАХ С ДЕФЕКТАМИ НА ПОВЕРХНОСТИ

Волгоградский государственный технический университет

В рамках модели молекулярного кластера в форме расширенной элементарной ячейки и полуэмпирической квантово-химической расчетной схемы MNDO-PM/3 исследованы спектры одноэлектронных энергетических состояний ионных кубических кристаллов LiH, LiF, LiCl (идеальных и с дефектами на поверхности). Обсуждены геометрические и зарядовые характеристики дефектных групп и околодефектных областей, а также особенности состояний электронов, обусловленные введением дефекта.

Within the framework of a molecular cluster model in the form of an extended unit cell and semi-empirical quantum chemical scheme MNDO-PM/3 one-electronic energy states spectra of the ionic cubic crystals LiH, LiF, LiCl (ideal and containing the defects on the surface) were analysed. The geometric and charge characteristics of the defect groups and near-defect areas and the peculiarities of electron states caused by the defects inserting were discussed.

Кристалл LiH и щелочно-галогидные кристаллы (ЩГК), в частности LiF и LiCl, относятся к кубическим кристаллам с преимущественно ионным характером химической связи (ИКК). Электронное строение и энергетический

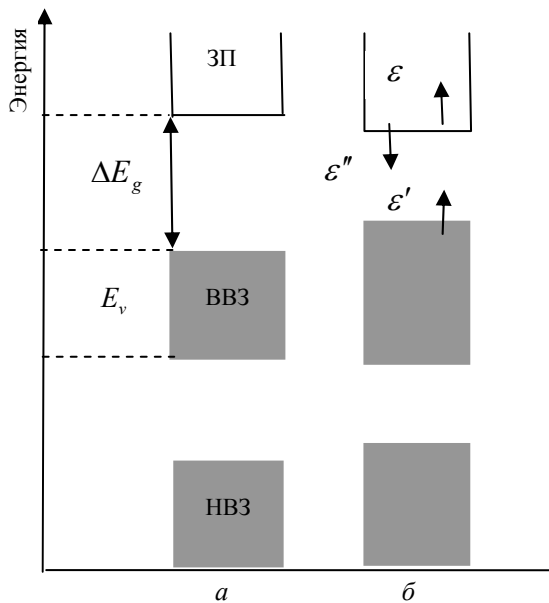


Рис. 1. Схема энергетических уровней электронов ионных кубических кристаллов идеальных (а) и содержащих дефект (б) (стрелками указаны области энергий, в которых возникают состояния, обусловленные дефектами)

спектр электронов (в случае бездефектных структур) достаточно хорошо изучены [1, 2]. Что же касается кристаллов с дефектами (в особенности на их поверхности), то эти характеристики изучены в меньшей степени. Энергетические зоны ИКК типа LiH и ЩГК имеют много общего (рис. 1). Зоне проводимости (ЗП) отвечают состояния, преимущественный вклад в которые вносят валентные *s*-орбитали атомов металла; верхней валентной зоне (ВВЗ) отвечают валентные *p*-орбитали атомов водорода или галогенов. В состоянии нижней валентной зоны (НВЗ) ЩГК основной вклад вносят *s*-орбитали атомов галогенов. Зоны отмеченных выше разрешенных состояний разделены запрещенными зонами (ЗЗ).

В данной работе проведен расчет энергетического спектра кубических кристаллов – гидроксида, фторида и хлорида лития без дефектов (идеальных) и с дефектами на плоскости типа «вакансия на поверхности» (ВП-1, ВП-2) (рис. 2, б) и «дополнительная ионная пара на поверхности» (ДИП) (рис. 2, в). В бездефектных кристаллах использовались следующие значения межатомных расстояний: $R(\text{Li-H}) = 2,05 \text{ \AA}$, $R(\text{Li-F}) = 2,015 \text{ \AA}$, $R(\text{Li-Cl}) = 2,57 \text{ \AA}$ [3, 4]. Исследуемые кристаллы моделировались молекулярным кластером в форме расширенной эле-

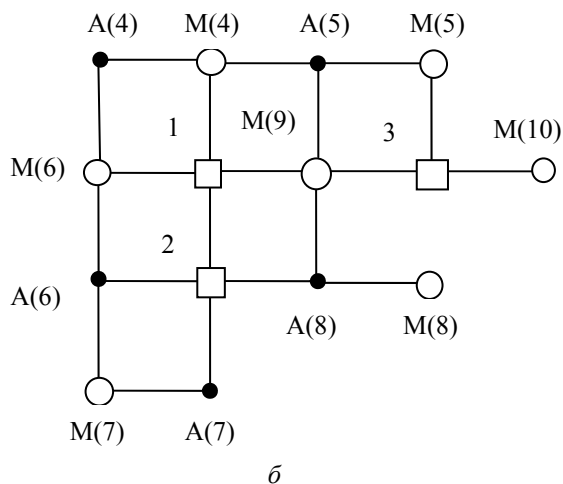
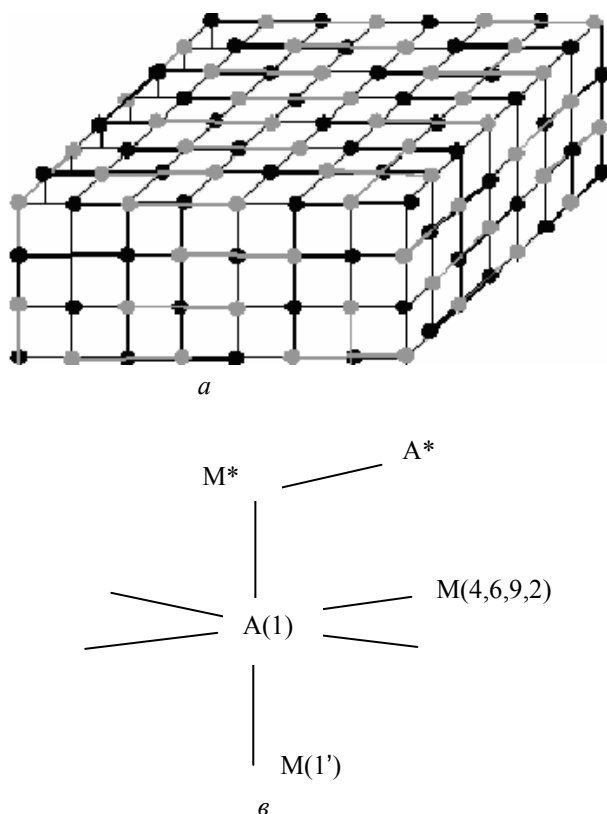


Рис. 2. Модель кристалла М-А с поверхностью (ПМК в форме РЭЯ) (а) и обозначение атомов и дефектов: а – без дефекта; б – с дефектом типа «вакансии на поверхности»: (ВП-1) – удалены атомы А(1) и М(2) с поверхностной плоскости; (ВП-2) – удалены атомы А(3) и М(2) с поверхностной плоскости; в – с дефектом типа «дополнительная ионная пара на поверхности» (ДИП); 1, 2, 3, ... – атомы на поверхности; 1', 2', 3', ... – атомы в подповерхностной плоскости (М: Li; А: H, F, Cl)

ментарной ячейки (МК РЭЯ) (рис. 2, а), представляющей собой прямоугольный параллелепипед, содержащий $4 \times 4 \times 2 = 128$ элементарных (двухатомных) ячеек. Как показано в [7, 8], в модели типа МК-РЭЯ влияние граничных атомов на состояние внутриобъемных атомов оказывается незначительным. Расчеты проводились в валентном базисе с использованием полуэмпирической схемы MNDO-PM/3. В табл. 1 приведены значения ширин энергетических щелей ΔE_g и зон ΔE_v (см. рис. 1) «идеальных» ЦГК и гидрида лития, полученные в результате квантово-химического расчета, и соответствующие экспериментальные данные [5, 6].

Таблица 1

Ширин (эВ) энергетических щелей и зон бездефектных кубических кристаллов
(обозначения согласно рис. 1)

Квантово-химический расчет с применением модели МК				Эксперимент [5, 6]		
Размер кластера (число атомов)	8x8x4 = 256					
Кристалл	LiH	LiF	LiCl	LiH	LiF	LiCl
ΔE_g , эВ	8,0	16,0	9,0	8,0	13,6	9,4
ΔE_v	4,5	4,4	5,4	3,0	6,1	5,0

В табл. 2 приведены рассчитанные значения зарядов на атомах идеальных ИКК и на атомах, лежащих вблизи дефектов (обозначения в соответствии с рис. 2 (б, в)). Как видно из таблицы, появление дополнительной ионной пары над атомом А(1) приводит к уменьшению отрицательного заряда на нем (для гидрида лития LiH на 16, для хлорида лития LiCl несколько меньше – на 11 %) по сравнению с зарядом на соответствующем атоме в бездефектном кристалле. В самой же ионной паре (M*-A*) имеет место увеличение отрицательного заряда на атоме Н или галогене (A*) и уменьшение положительного заряда на атоме металла (M*). Дефект типа «вакансия» также оказывает влияние на величины зарядов расположенных рядом с ним атомов. Удаление пары соседних атомов 1-2 (ВП-1: с позиции 1 удаляется атом галогена или водорода, с позиции 2 – атом лития) вызывает увеличение положительного заряда на лежащем вблизи дефекта атоме М(4) \approx на 9 % для LiH, \approx на 30 % для LiF и \approx на 17 % для LiCl. Удаление атомов 2–3 (ВП-2: атом неметалла удаляется с позиции 3) также приводит к увеличению положительного заряда на рядом лежащем атоме М(9) \approx на 19 % для LiH, \approx на 30 % для LiF и \approx на 18 % для LiCl.

Таблица 2

Заряды на атомах бездефектных (б/д) ИКК и с дефектами типа ДИП, ВП-1 и ВП-2
(обозначения атомов и дефектов приведены на рис. 2, б, в)

Атом	LiH				LiF			LiCl			
	б/д	ДИП	ВП-1	ВП-2	б/д	ВП-1	ВП-2	б/д	ДИП	ВП-1	ВП-2
A1	-0,32	-0,27	—	-0,32	-0,31	-0,31	-0,35	-0,35	-0,31	—	-0,37
M2	0,32	0,27	—	—	0,3	—	—	0,35	0,34	—	—
A3	-0,32	-0,32	-0,32	—	-0,31	-0,31	—	-0,35	-0,35	-0,35	—
M1'	0,32	0,33	0,33	0,32	0,29	0,33	0,26	0,26	0,27	0,31	0,26
A2'	-0,32	-0,32	-0,32	-0,31	-0,28	-0,31	-0,3	-0,26	-0,26	-0,3	-0,27
M3'	0,32	0,32	0,32	0,32	0,28	0,29	0,33	0,26	0,26	0,26	0,29
M4	0,32	0,31	0,35	0,29	-0,3	0,39	0,3	0,35	0,34	0,41	0,38
A4	-0,31	-0,31	-0,29	-0,31	-0,31	-0,3	-0,3	-0,34	-0,34	-0,35	-0,34
A5	-0,32	-0,32	-0,29	-0,27	-0,31	-0,3	-0,29	-0,35	-0,35	-0,35	-0,35
M6	0,32	0,32	0,33	0,33	0,3	0,37	0,26	0,35	0,34	0,41	0,35
A6	-0,32	-0,31	-0,32	-0,33	-0,31	-0,35	-0,35	-0,35	-0,35	-0,39	-0,37
A7	0,32	-0,32	-0,33	-0,33	-0,31	-0,36	-0,35	-0,35	-0,35	-0,38	-0,37
A8	-0,32	-0,31	-0,32	-0,24	-0,31	-0,35	-0,32	-0,35	-0,35	-0,39	-0,35
M9	0,32	0,32	0,33	0,26	0,3	0,37	0,33	0,35	0,34	0,41	0,38
A9	-0,31	-0,31	-0,31	-0,28	-0,3	-0,3	-0,3	-0,35	-0,35	-0,35	-0,36
M*		0,29							0,48		
A*		-0,39							-0,61		

Таблица 3

Оптимизированные геометрические параметры ИКК с дефектом типа ДИП (обозначения в соответствии с рис. 2, в)

ИКК	LiH		LiCl	
	б/д	ДИП	б/д	ДИП
$R(A1-M^*)$, Å	2,05	2,3	2,57	2,85
$R(M^*-A^*)$, Å	2,05	1,44	2,57	2,24
α , град		132		179
β , град		2		90

Примечание. $R(M-A)$ – межатомные расстояния; α – угол $A(1)M^*A^*$; β – угол между плоскостями $A^*M^*A(1)$ и $M(4)A(1)M(9)$

Из табл. 3 следует, что дополнительная ионная пара по-разному ориентируется относительно поверхности кристалла: в случае кристалла LiH – преимущественно параллельно, а в случае LiCl – перпендикулярно поверхности. В обоих случаях имеет место увеличение расстояния между атомом водорода или хлора на поверхности и дополнительным атомом лития над ней (\approx на 10–12 %. Расстояние между ионами дополнительной пары при этом уменьшается \approx на 30 (LiH) и \approx на 12 % (LiCl).

На рис. 3 представлены графики плотностей электронных состояний* валентной зоны и зоны проводимости структур как бездефектных, так и с дефектами отмеченных выше типов, а на рис. 4 приведены диаграммы, характеризующие степени проникновения состояний, обусловленных орбиталями атомов дефектов, в различные энергетические зоны.

Анализ приведенных на этих рисунках результатов позволяет отметить следующие особенности электронных спектров, имеющих место при введении соответствующих дефектов:

1) *дефект типа ДИП*: для всех кристаллов имеет место появление состояний типа ϵ' , отщепившихся от верхней валентной зоны и проникающих в запрещенную зону – в случае гидрида лития \approx на 2–3 % (вклады в них вносят, в основном, орбитали околодефектных атомов водорода); в случае хлорида лития \approx на 1–9 % (преимущественный вклад вносят орбитали атомов дополнительной ионной пары). Для обоих кристаллов в зоне проводимости появляются также состояния типа ϵ , обусловленные орбиталями атомов металла дополнитель-

ной пары со степенями проникновения \approx 8 % (LiH) и \approx 15 % (LiCl);

2) *дефект типа ВП-1*: в запрещенной зоне появляются состояния типа ϵ' , обусловленные атомами водорода и галогенов, расположенными как вблизи дефекта на одной с ним плоскости, так и непосредственно под дефектом. С увеличением межатомного расстояния степени внедрения увеличиваются (от \approx 2 % для LiH до \approx 8 % для LiCl). Также появляются состояния типа ϵ'' , отщепившиеся от нижней границы ЗП, обусловленные околодефектными атомами лития (от \approx 6 % для LiH до \approx 13 % для LiF). В случае LiCl такие состояния не образуются, но появляются состояния типа ϵ , с преимущественным вкладом орбиталей атомов лития, проникающие в ЗП \approx на 15 %;

3) *дефект типа ВП-2*: изменения в спектре энергетических состояний примерно такие же, как в случае дефекта ВП-1. Степени внедрения в запрещенную зону состояний типа ϵ' , обусловленных околодефектными атомами водорода и галогенов изменяются от \approx 6 % (LiH) до \approx 16 % (LiCl); степени проникновения в ЗП состояний типа ϵ'' вклады в которые вносят преимущественно орбитали атомов лития, находящихся вблизи дефекта, составляют \approx 20 % (LiH и LiF); в случае кристалла LiCl появляются состояния типа ϵ , основной вклад в которые вносят орбитали ближайших к дефекту атомов лития, со степенями внедрения \approx 16–18 %.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Эварестов, Р. А. Молекулярные модели точечных дефектов в широкощелевых твердых телах / Р. А. Эварестов, Е. А. Котомин, А. Н. Ермошкин. – Рига: Зинатне, 1983. – 287 с.
2. Эварестов, Р. А. Квантово-химические методы в теории твердого тела / Р. А. Эварестов. – Л.: ЛГУ, 1982. – 279 с.
3. Эмсли, Дж. Элементы / Дж. Эмсли. – М: Мир, 1993. – 256 с.
4. Пенкаля, Т. Очерки кристаллохимии / Т. Пенкаля. – Л.: Химия, 1974. – 496 с.
5. Немошкालенко, В. В. Фотоэлектронные спектры и зонная структура ШГК / В. В. Немошкालенко // ДАН СССР. – 1972. – Т. 206, № 3. – С. 593–596.
6. Пирогов, В. Д. Исследование электронно-оптических свойств чистых и активированных монокристаллов гидрида и дейтерида лития : автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук / В. Д. Пирогов. – Свердловск, 1971. – 18 с.
7. Ермошкин, А. Н. О выборе формы и симметрии кластера в молекулярных моделях кристаллов / А. Н. Ермошкин, Р. А. Эварестов // Вестник ЛГУ. – Л., 1976. – № 10. – С. 18–26.
8. Захаров, И. П. Последовательный учет кулоновского взаимодействия в квантово-химических расчетах моделей твердого тела / Захаров И. П., Литинский А. О., Баявичюс Л. // Теоретическая и экспериментальная химия. – 1982. – Т. 18. – № 1. – С. 16–24.

* Число состояний, приходящихся на единичный интервал энергии

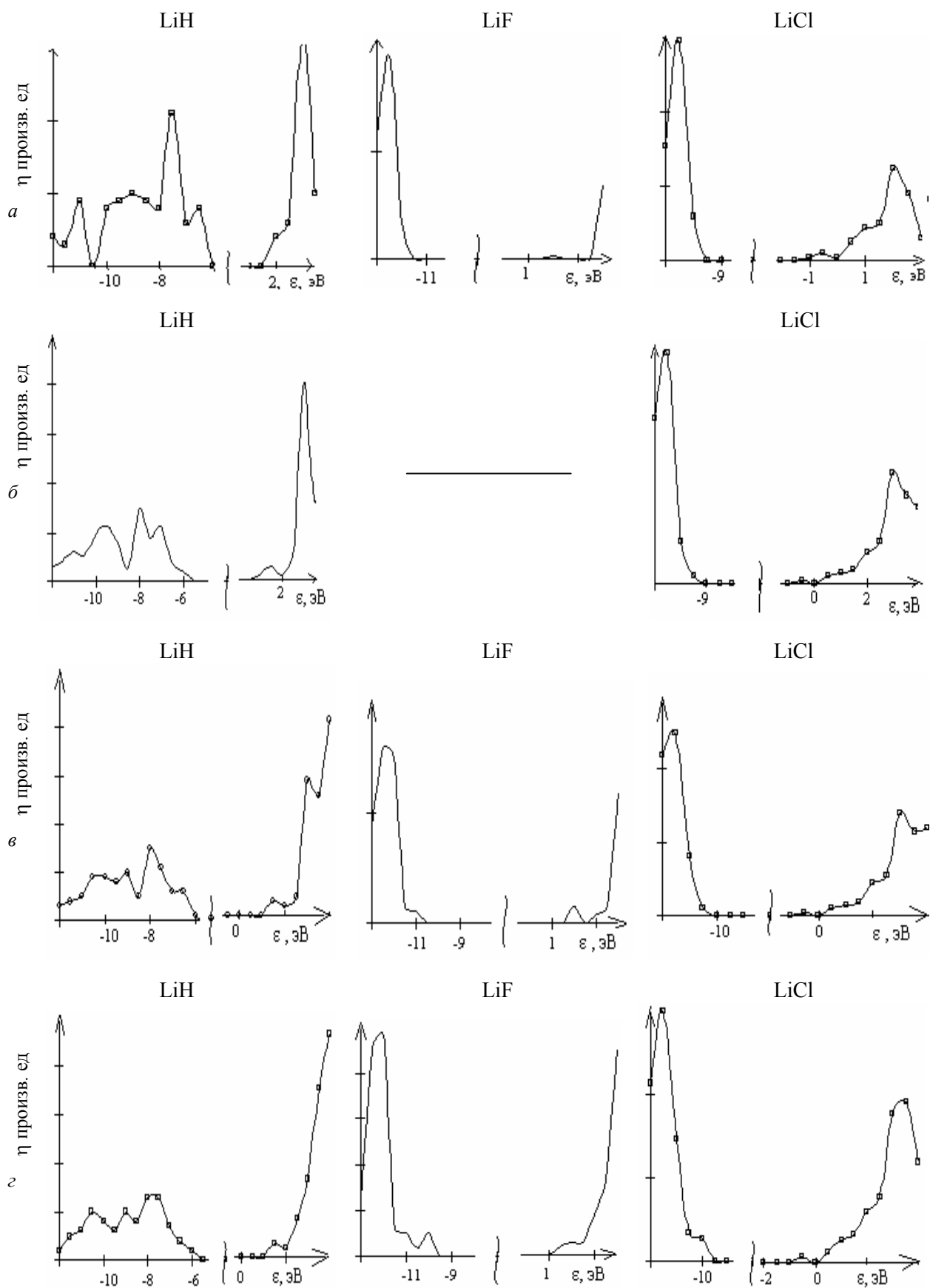
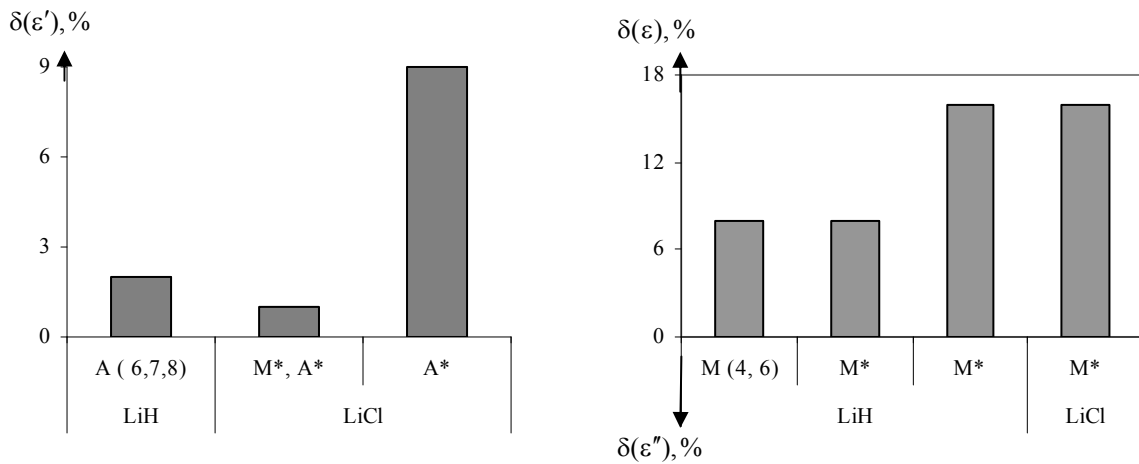
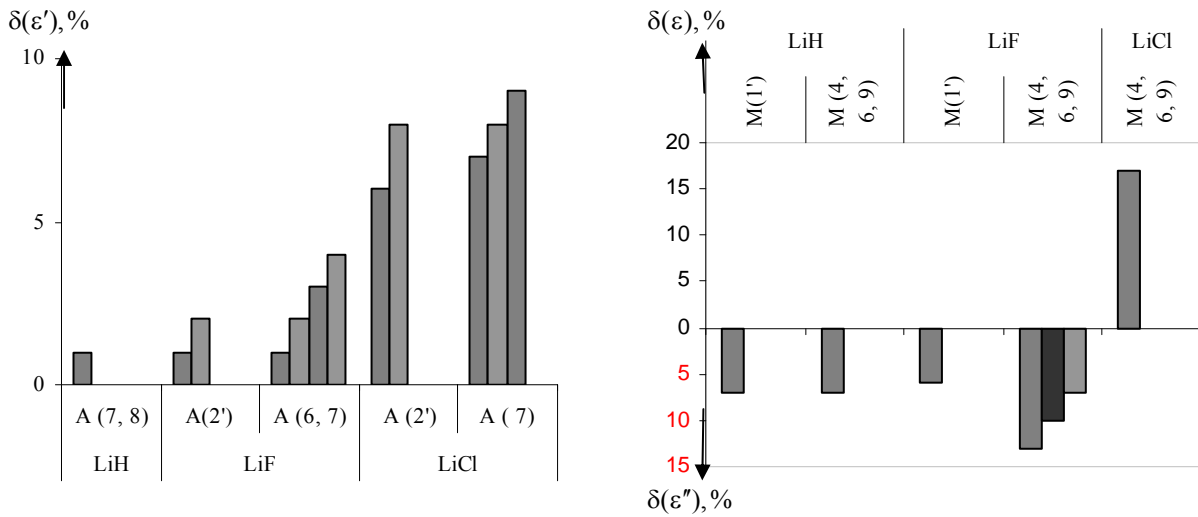


Рис. 3. Плотности состояний (η) электронов в кристаллах LiH, LiF, LiCl:
a – бездефектных; *б* – с дефектами типа ДИП; *в* – с дефектами типа VI-1; *г* – с дефектами типа VI-2

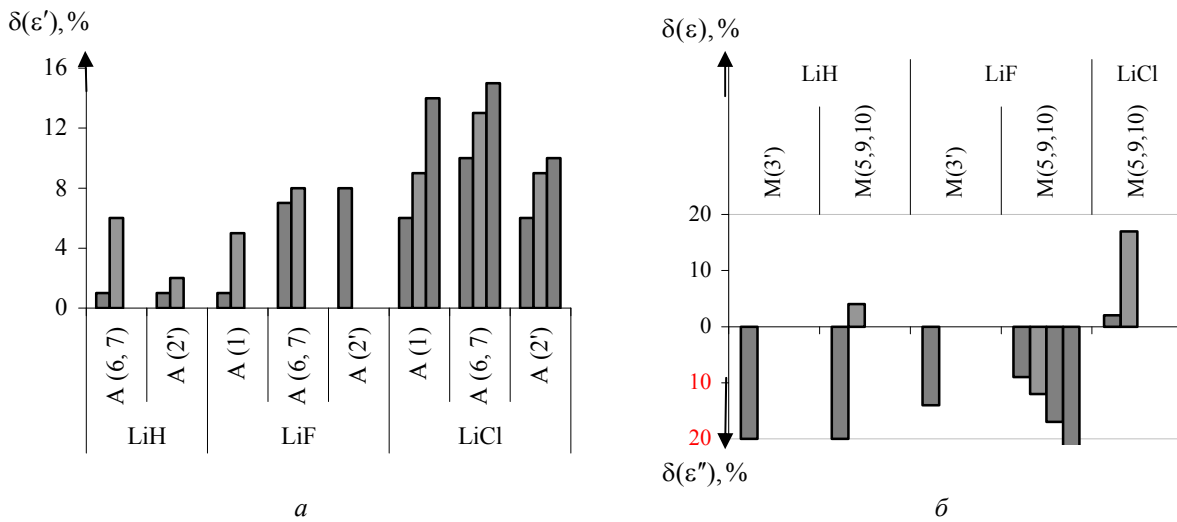
ДИП



ВП-1



ВП-2



a

б

Рис. 4. Степени проникновения в соответствующие зоны (в % относительно ширины запрещенной зоны идеального кристалла) состояний (ε, ε', ε''), обусловленных различными дефектами:

a – в зону проводимости δ(ε'); *б* – в запрещенную зону [δ(ε), δ(ε'')] (обозначение состояний в соответствии с рис. 1)

УДК 539.2:530.145

*М. В. Петров, В. Н. Перминов, С. И. Новиков***ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ ПОВЕРХНОСТИ ТРИОКСИДА МОЛИБДЕНА С ФТОРПОЛИМЕРНЫМ ПОКРЫТИЕМ****Волгоградский государственный технический университет**

Кластерная модель и вычислительная схема теории функционала плотности (гибридный обменно-корреляционный потенциал Беке – Ли – Янга – Пэра в базисах 3–21G и Lanl2DZ) применены для расчета электронно-энергетических характеристик и спектра одноэлектронных состояний поверхности триоксида молибдена: а) гидроксидированной; б) дегидроксидированной; в) с фторполимерным покрытием. Обсуждена природа состояний, возникающих в процессе перехода от одного типа поверхности к другому.

The cluster model and computing scheme of the density functional theory (the hybrid exchange-correlation potential of Becke – Lee – Yang – Parr in the 3–21G basis and Lanl2DZ basis) were applied to calculation of the electron–energy characteristics and one-electronic states spectra of the MoO₃ surface: a) hydroxided; b) dehydroxided; c) covered with fluoropolymers. The nature of states of different types of the surface is discussed.

На поверхности оксидов переходных элементов, а также в области их контакта с различными диэлектрическими покрытиями могут проходить электронные процессы, представляющие интерес для микро- и нанoeлектронных технологий. Специфичность этих процессов определяется особенностями электронного строения и спектром одноэлектронных состояний этих систем. В данной работе акцентируется внимание на элементах поверхности MoO₃

и контактах с ними фторполимерных покрытий [1–5].

Элемент гидроксидированной поверхности триоксида молибдена моделировался симметричным кластером, представленным на рис. 1, а, имеющим две поверхностные группы Mo–(OH)_{пов}, ближайшее к атомам молибдена кислородное октаэдрическое окружение, каждый атом кислорода которого замыкался атомами водорода, количество которых определя-

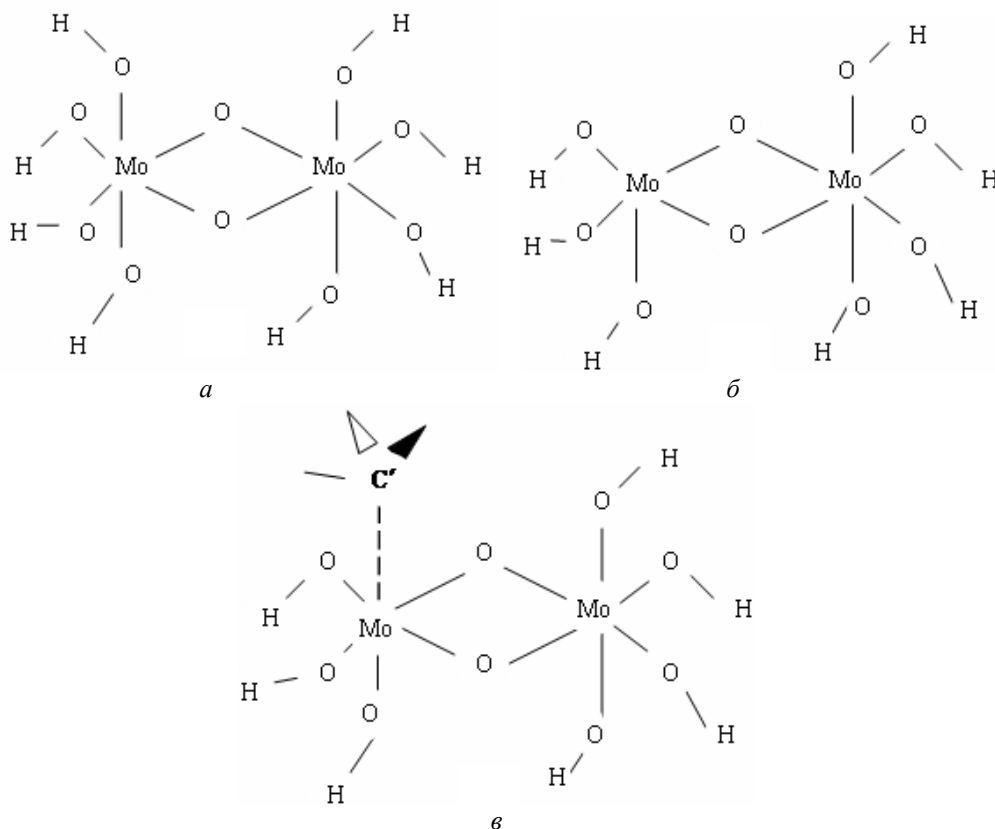


Рис. 1. Кластерные модели поверхности MoO₃: а – гидроксидированной; б – дегидроксидированной; в – с фторполимерным покрытием

лось условием электронейтральности при заданной (требуемой) степени окисления атомов молибдена (+6). В этой структуре учтена релаксация атомов, выходящих на поверхность и реконструкция поверхности [6–8].

Длины связей Mo–O усреднялись, поэтому все $R(\text{Mo–O})$ выбраны равными 1,88 Å, что вполне оправдано для получения качественного (или полуколичественного) спектра одноэлектронных состояний изучаемых систем. Дегидроксирированная поверхность (ДГП) MoO₃ моделировалась, исходя из модели гидроксидированной поверхности (ГП), путем удаления одной поверхностной OH-группы с образованием неполнокоординированного Mo-центра

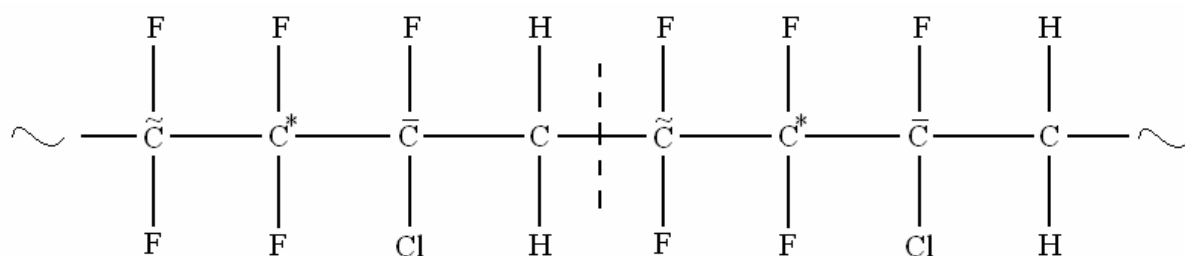


Рис. 2. Два элементарных звена макромолекулы фторполимера

В условиях, когда от поверхности MoO₃ отрывается OH-группа, а от МФП – атом F или Cl (под воздействием нагревания или резонансного электромагнитного излучения) образуются радикалы Mo[•]_{пов} и $\dot{\text{C}}\text{C}$, рекомбинация которых между собой приводит к образованию поверхностных структур типа Mo–C $\ddot{\text{C}}$ (контакты, соответствующие фторполимерному покрытию, рис. 1, в).

Для расчета электронных состояний, энергетических характеристик и спектра одноэлектронных состояний (СОС) изучаемых структур (с использованием их моделей) применена самосогласованная процедура в рамках теории функционала плотности (гибридный обменно-корреляционный потенциал Беке – Ли – Янга – Парра) [9]: а) в валентно-расщепленном гауссовском базисе 3–21G [10,11] и (для сравнения) б) в валентном двухэкспонентном базисе в виде линейной комбинации функций гауссовского типа с остоным псевдопотенциалом лос-аламосского типа для атома молибдена [12]. Расстояния $R(\text{Mo–C}')$ и все валентные углы Mo–C'–C оптимизировались. Остальные геометрические параметры были зафиксированы и соответствовали экспериментальным значениям, заимствованным из родственных соединений.

(рис. 1, б). В качестве макромолекулы фторполимера (МФП) выбрана структура фторкаучука СКФ–32, два звена которого представлены на рис. 2. МФП с выделенным центром (C*, $\tilde{\text{C}}$, $\bar{\text{C}}$) моделировалась, в свою очередь, низкомолекулярными структурами, включающими эти центры и ближайшие к ним два атома углерода МФП с соответствующим окружением и замыканием оборванных валентностей атомами водорода:

- 1) HCIFCCCH₂ $\tilde{\text{C}}$ F₂CF₂CFCiH;
- 2) H₃CCF₂C*F₂CFCiCH₃;
- 3) HF₂CCF₂ $\bar{\text{C}}$ FClCH₂CF₂H.

На рис. 3 представлены графики плотностей одноэлектронных состояний*, рассчитанных для модели гидроксидированной и дегидроксирированной поверхности в базисах а и б. Как следует из этого рисунка, характер зависимости от энергии как полных плотностей состояний (ППС), так и парциальных (локальных) (ЛПС) качественно один и тот же в обоих базисах. Поэтому все остальные расчеты выполнены нами в более простом базисе а.

ППС и ЛПС для моделей гидроксидированной и дегидроксирированной поверхности приведены на рис. 4, а для моделей поверхности с фторполимерным покрытием – на рис. 5. На этих же рисунках представлены графики вкладов заселенностей перекрытия (доля электронной плотности, приходящейся на область между выделенными атомами) в различные одноэлектронные состояния.

Анализ полученных результатов позволяет сделать следующие выводы:

- 1) гидроксидированная поверхность (ГП). Энергетическая область, отвечающая занятым

* Число состояний, приходящихся на единичный интервал энергии, как функция от энергии состояния.

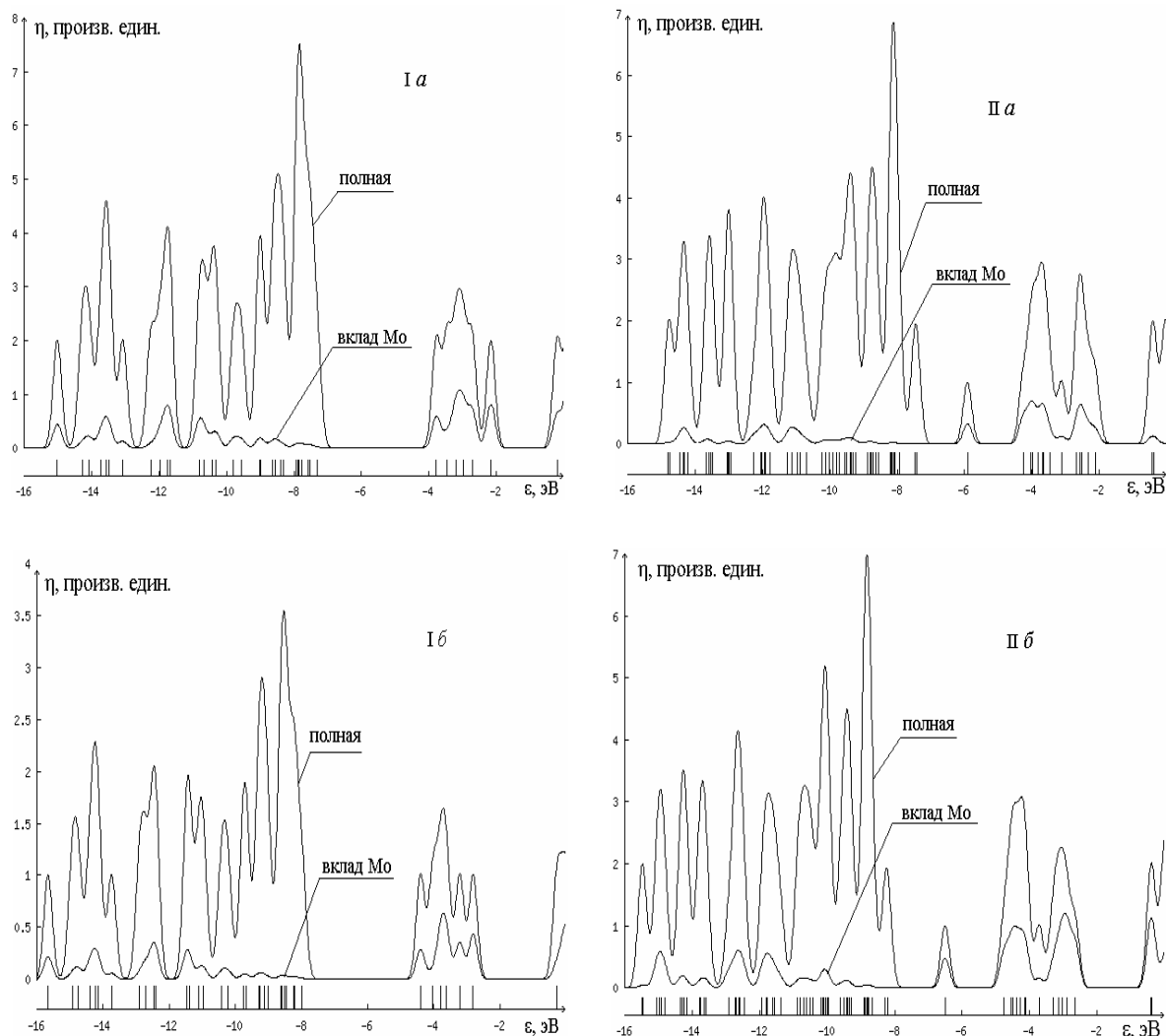


Рис. 3. Плотности одноэлектронных состояний:

I – гидроксидированной, *II* – дегидроксидированной поверхностей, рассчитанные с применением кластерных моделей (рис. 1, *a, б*) в рамках теории функционала плотности с обменно-корреляционным потенциалом Бекке – Ли – Янга – Пары в базисах: *a* – 3–21G и *б* – двухэкспонентных функций с остоным псевдопотенциалом для атома Mo

электронным состояниям (ОЗС) отделена от области, соответствующей вакантным состояниям (ОВС), запрещенной энергетической щелью $\Delta E' \approx 3,0$ эВ. Верхней границе ОЗС отвечают состояния, преимущественный вклад в которые вносят орбитали атомов кислорода (слабо связывающие орбитали Mo–O связи и орбитали с неподеленными парами электронов атомов кислорода). Состояния, соответствующие сильно связывающим орбиталам Mo–O связи, имеют более глубоко лежащие энергии. Взаимодействие между атомами молибдена имеет антисвязывающий характер – отрицательный вклад заселенности перекрытия $\rho(\text{Mo}–\text{Mo})$ в некоторые состояния из ОЗС. ОВС соответствуют разрыхляющие орбитали Mo–O связей;

2) *дегидроксидированная поверхность* (поверхностное радикальное состояние). При ее образовании (посредством отрыва OH-группы от соответствующего центра гидроксидированной поверхности) в ЗЭЩ, отвечающей ГП, появляется состояние с неспаренным (радикальным) электроном (отщепляется от верхней границы ОЗС), имеющее характер слабо разрыхляющих орбиталей Mo–O связей, ориентированных вдоль поверхности. Энергия этого состояния \approx на 1 эВ глубже границы остальных занятых орбиталей. Их характер примерно такой же, как в случае гидроксидированной поверхности. Область вакантных состояний сдвигается \approx на 0,5 эВ в область более низких энергий, а по своей природе эти состояния такие же, как и для ГП;

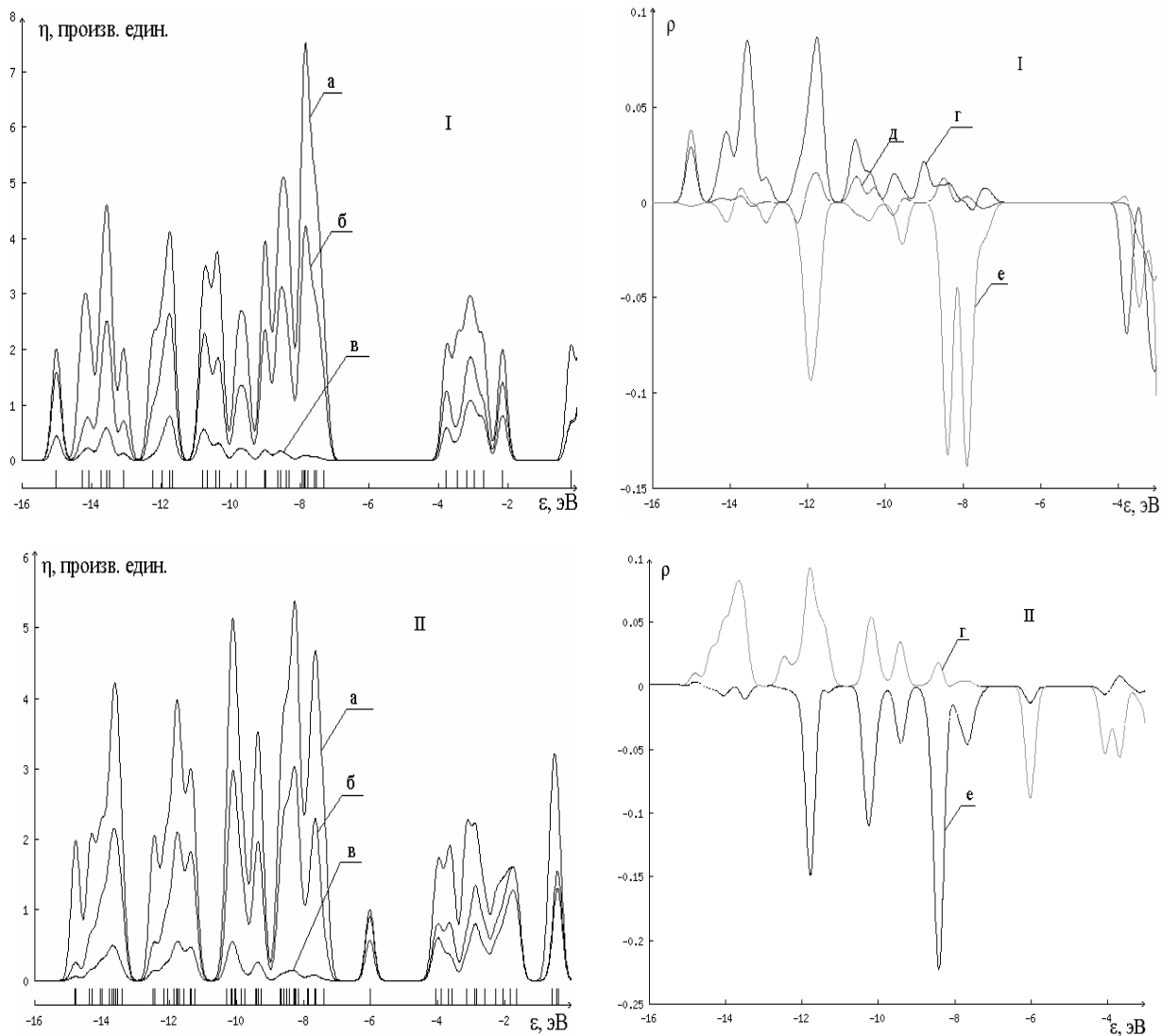


Рис. 4. Полная (а) и локальная, включающая вклады орбиталей атомов кислорода (б); молибдена (в) плотности состояний η и вклады в одноэлектронные состояния заселенностей перекрывания ρ связей атома молибдена с ближайшими атомами кислорода, кроме OH-группы (з); д) Mo–O_(H) (д) и Mo–Mo (е) (I – гидроксидированная, II – дегидроксидированная поверхности)

3) поверхность с фторполимерным покрытием (ПФПП). Наиболее прочный контакт образуется при взаимодействии поверхностного атома молибдена с \tilde{C} -центром МФП, а наиболее слабый контакт – с \bar{C} -центром (энергии разрыва соответствующих связей и оптимизированные длины связей Mo– \tilde{C} представлены в таблице). Спектры одноэлектронных состояний ПФПП с контактами по атомам (C^* , \tilde{C} , \bar{C}) качественно идентичны, поэтому на рис. 5 приведены графики плотностей состояний и вкладов заселенностей перекрывания только для случая взаимодействия с атомами \tilde{C} ФПМ. Из этих графиков следует, что верхнему занятому состоянию, которое отстоит \approx на 0,5 эВ от

верхней границы остальных заполненных состояний, отвечает связывающая орбиталь Mo–C связи. Вклад в это состояние Mo–O связей носит разрыхляющий характер (отрицательный вклад заселенности перекрывания). Более глубокими по энергии оказываются состояния с неподеленными парами электронов атомов кислорода и связывающие состояния, отвечающие орбиталю Mo–O связей. Вакантные состояния, преимущественный вклад в которые вносят разрыхляющие орбитали Mo–O, лежат в области \approx на 0,5 эВ больших энергий, чем в случае ГП, а нижняя граница отвечающей им области энергий сдвинута \approx на 0,7 эВ по сравнению со случаем ДП в сторону меньших энергий.

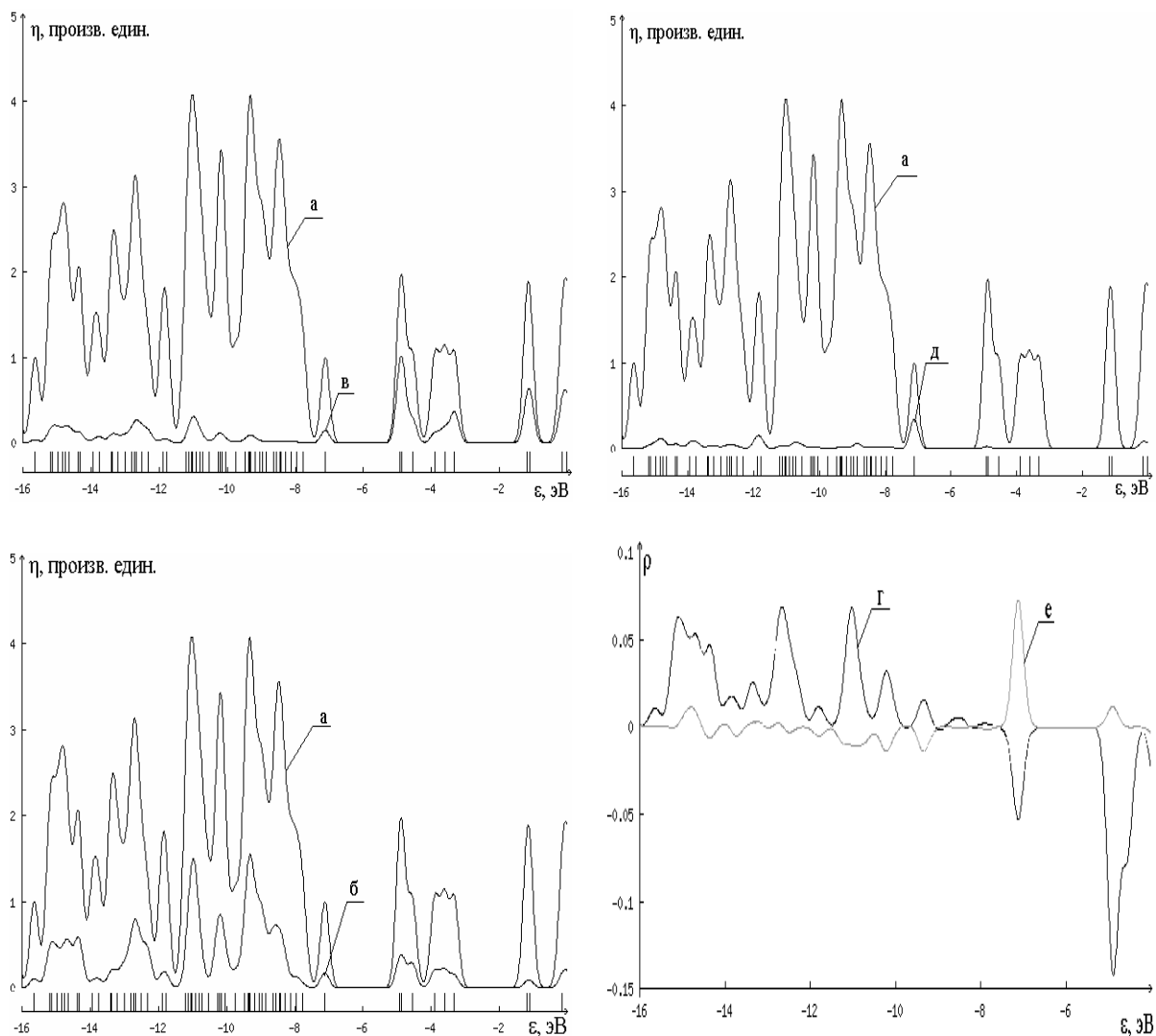


Рис. 5. Полная (а) и локальная (включая вклады атомов кислорода (б), молибдена (ε), углерода (δ)) плотности состояний η и вклады в одноэлектронные состояния заселенности перекрытия ρ связей Mo–O (ε) и Mo–C (ε) поверхности MoO_3 с фторполимерным покрытием (вариант взаимодействия по атому \bar{C})

Длины (R) и энергии разрыва (ΔE) связей Mo–C' ($C' \equiv \bar{C}; C^*; \bar{C}$) и Mo–O_(H) гидроксидированной (рис. 1, а) и с фторполимерным покрытием (рис. 1, в) поверхности MoO_3

ΔE , эВ	\bar{C}	C^*	\bar{C}	OH
		2,1	1,7	1,15
$R(\text{Mo}-C')$, Å	2,28	2,27	2,28	1,83

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Особенности воздействия лазерного излучения на фторэластомеры при формировании новых антифрикционных и защитных покрытий / Е. И. Тескер [и др.] // Физика и химия обработки материалов. – 2001. – № 3. – С. 28–33.
2. Исследование механизма формирования адгезионных связей фторполимерных пленочных покрытий с металлической подложкой под действием излучения

CO_2 -лазера / Е. И. Тескер [и др.] // Физика и химия обработки материалов. – 2005. – № 1. – С. 70–77.

3. Влияние наполнителей на процессы структурирования тонкопленочных фторполимерных покрытий под действием лазерного излучения / Е. И. Тескер [и др.] // Физика и химия обработки материалов. – 2005. – № 4. – С. 72–76.

4. Особенности адгезии фторполимеров к поверхности высокоуглеродистой стали под воздействием непрерывного лазерного излучения. Модельный квантово-химический подход / А. Н. Кольченко [и др.] // Вестник Волгоградс. гос. ун-та. – 2005. – Вып. 9. – С. 105–109.

5. Адгезия при лазерном напылении пленок / Е. В. Жованник [и др.] // Физика и химия обработки материалов. – 1996. – № 6. – С. 72–78.

6. Жидомиров, Г. М. Кластерные приближения в квантово-химических исследованиях хемосорбции и поверхностных структур / Г. М. Жидомиров // Итоги науки и техники. – М.: ВINITI, 1984. – Т. 9. – С. 3–161.

7. Литинский, А. О. Квазимолекулярные модели хемосорбции и поверхностных структур : дис. ... д-ра хим. наук / А. О. Литинский. – М.: МГУ, 1987. – 344 с.

8. Крылов, О. В. Адсорбция и катализ на переходных металлах и их оксидах / О. В. Крылов, В. Ф. Киселёв. – М.: Химия, 1981. – 288 с.

9. Becke, A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange / A. D. Becke // J. Chem. Phys. 98, 5648 (1993).

10. Binkley, J. S. Self-Consistent Molecular Orbital Methods. 21. Small Split-Valence Basis Sets for First-Row

Elements / J. S. Binkley, J. A. Pople and W. J. Hehre // J. Amer. Chem. Soc. 102, 939 (1980).

11. Gordon, M. S. Self-Consistent Molecular-Orbital Methods. 22: Small Split-Valence Basis Sets for Second-Row Elements / M. S. Gordon, J. S. Binkley, J. A. Pople, W. J. Pietro and W. J. Hehre // J. Amer. Chem. Soc. 104, 2797 (1982).

12. T. H. Dunning Jr. and P. J. Hay, in Modern Theoretical Chemistry, Ed. H. F. Schaefer, III (Plenum, New York, 1976), vol. 3, 1.

УДК 539.23

С. В. Крючков, Е. И. Кухарь, В. А. Яковенко

ОСЦИЛЛЯЦИИ ПРОВОДИМОСТИ ГРАФЕНА В ПОПЕРЕЧНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Волгоградский государственный педагогический университет

Изучена поперечная проводимость графена, помещенного во внешнее магнитное поле. В борновском приближении по потенциалу рассеяния на акустических фонах получена формула для поперечной магнитопроводимости графена вблизи дираковской точки зоны Бриллюэна. Исследована зависимость поперечной проводимости графена от индукции магнитного поля. Показано, что проводимость графена испытывает осцилляции с изменением индукции внешнего магнитного поля.

Работа проводилась в рамках программы Минобрнауки «Развитие научного потенциала высшей школы».

The transversal conductivity of the graphene under the external magnetic field was studied. The expression for the graphene transversal magnetoconductivity in the Born approximation near the Dirac point of the Brillouin band was derived. The graphene conductivity dependence on the magnetic field intensity was investigated. The graphene conductivity was shown to have the oscillations when the magnetic field intensity changes.

The work was done within the program of Department of Education and Science "Advancement of the higher school science potential".

Графен представляет собой монослой углерода и обладает рядом необычных свойств, обусловленных особенностями его зонной структуры [1, 2]. В лаборатории графен получен совсем недавно [3], поэтому в настоящее время идет активное теоретическое [4–9] и экспериментальное [10–13] исследование свойств этого нового материала. Непараболичность и неаддитивность энергетического спектра графена приводит к возможности проявления ряда нелинейных кинетических эффектов. Нелинейный терагерцовый отклик в графене исследован в [4]. Возможность выпрямления поперечного тока в графене изучена в [5].

Высокая электрическая проводимость делает графен перспективным материалом для использования в наноэлектронике наряду с углеродными нанотрубками [14]. В [3] экспериментально показано, что длина свободного пробега электрона в графене имеет порядок микрометра. Этот факт позволяет использовать графен для создания микрометровых приборов, работающих в баллистическом режиме.

Одной из особенностей электронного спектра графена является его линейность по абсо-

лютному значению квазиимпульса вблизи так называемой «дираковской точки» зоны Бриллюэна, что соответствует безмассовым частицам [2]. Этот факт дает, кроме всего прочего, возможность использовать графен для проверки релятивистских эффектов.

В [15–18] изучены магнитные осцилляционные эффекты в графене вблизи дираковской точки. Влияние магнитного поля на высокочастотную проводимость графена и на поглощение графеном электромагнитного излучения исследованы в [13, 16–18]. Осцилляции поперечной магнитопроводимости (эффект Шубникова – де Гааза) в двумерной системе с дираковским спектром изучены в [15], где предполагалось, что уровни Ландау имеют конечную ширину, связанную с рассеянием носителей заряда на неоднородностях решетки. При этом не рассматривался конкретный механизм рассеяния, а уширение уровней Ландау вводилось как феноменологический параметр.

В данной работе рассмотрены осцилляции магнитопроводимости графена, помещенного во внешнее магнитное поле, с учетом упругого рассеяния электронов проводимости на акусти-

ческих фононах. Гамильтониан и собственные волновые функции электрона в графене вблизи дираковских точек найдены в [6–9], причем уравнение на собственные значения формально совпало с уравнением Дирака для безмассовой частицы. В случае, когда графен помещен во внешнее магнитное поле, напряженность \mathbf{H} которого перпендикулярна его плоскости (рис. 1), гамильтониан имеет вид [9]:

$$\hat{H}_0 = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial y} - i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{a_H^2} \\ -\frac{\partial}{\partial y} - i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{a_H^2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где v_F – скорость электрона на поверхности Ферми; $a_H = \sqrt{c\hbar/eH}$ – ларморовский радиус. Собственные волновые функции и значения энергии, соответствующие гамильтониану (1), имеют вид:

$$|kn\rangle = \frac{1}{\sqrt{2La_H}} e^{ikx} \begin{pmatrix} \Phi_{n-1}\left(\frac{y-y_k}{a_H}\right) \\ \Phi_n\left(\frac{y-y_k}{a_H}\right) \end{pmatrix}, \quad (2)$$

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar v_F}{a_H} \sqrt{2n}, \quad (3)$$

где $\Phi_n(y)$ – функция гармонического осциллятора, k – проекция волнового вектора электрона на ось $0x$; $y_k = -ka_H^2$, $n = 0, 1, 2, \dots$; L – линейный размер графена вдоль оси $0x$. Как видно из (3), уровни Ландау для графена не являются эквидистантными.

Тот факт, что электроны проводимости вблизи дираковской точки ведут себя подобно безмассовым частицам, требует пересмотра формулы Титейка [19]. Для этого воспользуемся подходом, развитым в [19]. Пусть вдоль оси $0y$ приложено слабое электрическое поле \mathbf{E} (рис. 1). Тогда плотность тока для ансамбля частиц, описываемого матрицей плотности $\langle nk | \rho | n'k' \rangle$, определится формулой:

$$j_y = ie v_F \sum_{nk} (\langle nk | \rho | k(n+1) \rangle + \langle kn | \rho | k(n-1) \rangle). \quad (4)$$

Полная матрица плотности $\hat{\rho}_T$, учитывающая переходные процессы, определяется из уравнения движения:

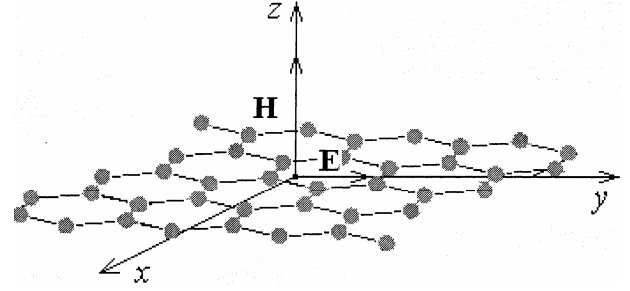


Рис. 1. Взаимная ориентация плоскости графена и внешних электрического и магнитного полей

$$-i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_T}{\partial t} = \hat{\rho}_T \hat{H} - \hat{H} \hat{\rho}_T, \quad (5)$$

где \hat{H} – гамильтониан, учитывающий внешнее магнитное поле, тянущее электрическое поле и потенциал рассеяния $V(\mathbf{r})$:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + eEy + V(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Уравнение (7) для лапласовского образа матрицы плотности $P(s)$ имеет вид:

$$-i\hbar s \hat{P} = \hat{P} \hat{H} - \hat{H} \hat{P} - i\hbar s \hat{\rho}_0, \quad (7)$$

где $\hat{\rho}_0$ – матрица плотности в начальный момент времени (до включения электрического поля). В качестве начальной матрицы плотности выберем точную матрицу равновесного ансамбля:

$$\langle k'n' | \hat{\rho}_0 | kn \rangle = f(\varepsilon_n) \delta_{n'n} \delta_{k'k}, \quad (8)$$

где $f(\varepsilon_n)$ – функция распределения Ферми-Дирака. Матрица плотности $\hat{\rho}$, описывающая стационарный ток и входящая в формулу (4), определяется спустя столь долгий промежуток времени, что все величины, характеризующие переходные процессы, обращаются в нуль за этот промежуток времени. Значение матрицы плотности спустя длительный промежуток времени можно определить, найдя предел, к которому стремится образ Лапласа $P(s)$, когда параметр $s \rightarrow 0$.

В борновском приближении по потенциалу рассеяния $V(\mathbf{r})$ и в линейном приближении по напряженности электрического поля получаем:

$$\begin{aligned} \langle kn | \rho | k(n \pm 1) \rangle &= \pi i e E \sum_{n'k'} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_n} (y_{k'} - y_k) \times \\ &\times \frac{\langle kn | V | k'n' \rangle \langle k'n' | V | k(n+1) \rangle}{\varepsilon_{n \pm 1} - \varepsilon_n} \times \\ &\times (\delta(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n) + \delta(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_{n \pm 1})). \quad (9) \end{aligned}$$

После подстановки (9) в (4) и ряда преобразований получаем следующее выражение для поперечной магнитопроводимости графена:

$$\sigma_{yy} = -\frac{\pi e^2}{\hbar} \sum_{nk} \sum_{n'k'} A_n \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_n} (y_{k'} - y_k)^2 \times \times \left| \langle k'n' | V | kn \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n). \quad (10)$$

Множитель A_n , входящий в формулу (10) имеет вид:

$$A_n = \frac{1}{2\sqrt{n+1}(\sqrt{n+1} - \sqrt{n})}. \quad (11)$$

Пусть электроны в графене рассеиваются на акустических фононах. Тогда потенциал рассеяния можно представить в следующем виде [20]:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \quad (12)$$

где $V_{\mathbf{q}} = \sqrt{\hbar \Lambda^2 q / 2\rho v S}$; \mathbf{q} – волновой вектор акустических фононов; Λ – деформационный потенциал; ρ – поверхностная плотность графена; v – скорость звука в графене; S – площадь образца. После подстановки (12) в (11) получаем:

$$\sigma_{yy} = -\frac{\pi e^2}{\hbar} \sum_{nk} \sum_{n'k'} \sum_{\mathbf{q}} A_n V_{\mathbf{q}}^2 \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_n} (y_{k'} - y_k)^2 \times \times \left| \langle k'n' | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | kn \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n). \quad (13)$$

Как видно из (13), проводимость отлична от нуля в случае, когда $n = n'$. Квадрат матричного элемента, входящего в формулу (13), равен:

$$\left| \langle k'n' | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | kn \rangle \right|^2 = Q_n(a_H q) \delta_{k', k+q_x}, \quad (14)$$

где $Q_n(x) = (L_{n-1}(x^2/2) + L_n(x^2/2))^2 \exp(-x^2/2)$, $L_n(x)$ – полином Лагерра. После подстановки (14) в (13) и вычисления сумм по k и k' получаем:

$$\sigma_{yy} = -\frac{e^2 \Lambda^2}{16\pi \rho v a_H^3} \sum_n \sum_{n'} F(n) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_n} \delta(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n), \quad (15)$$

где
$$F(n) = A_n \int_0^\infty x^4 Q_n(x) dx. \quad (16)$$

Если осцилляции проводимости малы по сравнению с неосциллирующей частью, то их можно учесть только в одной из сумм (15). Подставив в (15) функцию распределения Ферми – Дирака и воспользовавшись формулой

Пуассона, преобразуем (15) к следующему виду:

$$\sigma_{yy} = \frac{e^2 \Lambda^2}{64\pi \hbar^4 \rho v \nu_F^4 \theta} a_H \times \times \sum_{\kappa=-\infty}^{\infty} \int_0^\infty \varepsilon^2 F\left(\frac{a_H^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2 \nu_F^2}\right) \text{ch}^{-2}\left(\frac{\varepsilon - \mu}{2\theta}\right) e^{\frac{i\pi \kappa a_H^2 \varepsilon^2}{\hbar^2 \nu_F^2}} d\varepsilon, \quad (17)$$

где μ – химический потенциал, θ – температура электронного газа. Множители ε^2 и $F(\varepsilon)$ представляют собой медленно меняющиеся функции ε по сравнению с осциллирующей частью в подынтегральном выражении (17). Поэтому в (17) эти множители могут быть заменены их значениями при $\varepsilon = \mu$:

$$\sigma_{yy} = \frac{e^2 \Lambda^2 \mu^2}{64\pi \hbar^4 \rho v \nu_F^4 \theta} a_H F\left(\frac{a_H^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2 \nu_F^2}\right) \times \times \sum_{\kappa=-\infty}^{\infty} \int_0^\infty \text{ch}^{-2}\left(\frac{\varepsilon - \mu}{2\theta}\right) e^{\frac{i\pi \kappa a_H^2 \varepsilon^2}{\hbar^2 \nu_F^2}} d\varepsilon. \quad (18)$$

При $\mu \gg \theta$ интеграл, входящий в (18), приближенно равен:

$$\int_0^\infty \text{ch}^{-2}\left(\frac{\varepsilon - \mu}{2\theta}\right) e^{\frac{i\pi \kappa a_H^2 \varepsilon^2}{\hbar^2 \nu_F^2}} d\varepsilon \approx \frac{2\pi^2 \kappa \theta^2 \mu a_H^2}{\hbar^2 \nu_F^2} \text{sh}^{-1} \times \times \left(\frac{2\pi^2 \kappa \theta^2 \mu a_H^2}{\hbar^2 \nu_F^2} \right) e^{\frac{i\pi \kappa a_H^2 \mu^2}{\hbar^2 \nu_F^2}}. \quad (19)$$

Подставив (19) в (18), получаем выражение для магнитопроводимости графена:

$$\sigma_{yy} = \frac{\sigma_0}{\sqrt{q}} F\left(\frac{\mu^2}{\theta^2 q}\right) \times \times \left(1 + \sum_{\kappa=1}^{\infty} \frac{4\pi^2 \kappa \mu}{\theta q} \text{sh}^{-1}\left(\frac{4\pi^2 \kappa \mu}{\theta q}\right) \cos\left(\frac{2\pi \kappa \mu^2}{\theta^2 q}\right) \right), \quad (20)$$

где $q = 2\hbar^2 \nu_F / \theta^2 a_H^2$, $\sigma_0 = e^2 \Lambda^2 \mu^2 / 32\sqrt{2}\pi \hbar^3 \rho v \theta \nu_F^3$.

Выражение (17) справедливо, если амплитуда осцилляции мала по сравнению с неосциллирующей частью. Как видно из (20), для этого необходимо, чтобы аргумент функции $\text{sh}x$ был достаточно большим по сравнению с единицей. Это приводит к следующему условию, ограничивающему величину напряженности магнитного поля:

$$H < \frac{2\pi^2 c \mu \theta}{e \hbar \nu_F^2}. \quad (21)$$

Для $v_F \sim 10^6$ м/с, $\mu \sim 0,12$ эВ, $\theta \sim 0,001$ эВ, согласно условию (21), верхний предел для индукции магнитного поля составляет 6 Тл. На рис. 2 показана зависимость проводимости графена от индукции внешнего магнитного поля, построенная по формуле (20).

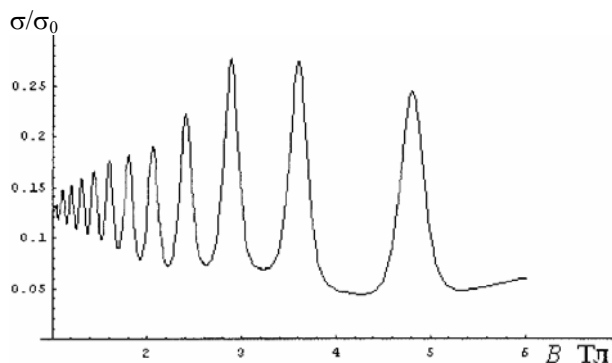


Рис. 2. Зависимость поперечной проводимости графена от индукции внешнего магнитного поля:
 $\mu \sim 0,12$ эВ, $\theta \sim 0,001$ эВ, $\sigma_0 \sim 0,01$ (Ом \times м) $^{-1}$

Таким образом, для графена, так же как и для объемных полупроводников, должны наблюдаться осцилляции поперечной магнитопроводимости, периодичные по обратному магнитному полю. Однако имеются некоторые особенности осцилляций магнитопроводимости в графене. Во-первых, как видно из графика на рис. 2, величина проводимости в максимуме увеличивается с ростом индукции магнитного поля, а затем уменьшается (в отличие от объемного полупроводника, где проводимость в максимуме монотонно уменьшается с ростом индукции магнитного поля). Во-вторых, период этих осцилляций пропорционален квадрату отношения μ/θ , а не первой степени, как для объемных полупроводников. Связано это с неэквидистантностью уровней Ландау (3) в графене.

Работа проводилась в рамках программы Минобрнауки «Развитие научного потенциала высшей школы».

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Reich, S. Tight-binding description of graphene / S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen, P. Ordejón // *Physical Review B*. – 2002. – Vol. 66. – 035412.
2. Wallace, P. R. The Band Theory of Graphite / P. R. Wallace // *Physical Review*. – 1947. – V. 71. – P. 622–634.
3. Novoselov, K. S. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov // *Science*. – 2004. – Vol. 306. – P. 666–669.
4. Mikhailov, S. A. Non-linear electromagnetic response of graphene. / S. A. Mikhailov // *Europhysics Letters*. – 2007. – Vol. 79. – 27002.
5. Завьялов, Д. В. О возможности эффекта выпрямления поперечного тока в графене / Д. В. Завьялов, С. В. Крючков, Э. В. Марчук // *Письма в Журнал технической физики*. – 2008. – Т. 34. Вып. 21. – С. 21–26.
6. Ando, T. Impurity Scattering in Carbon Nanotubes – Absence of Back Scattering / T. Ando, T. Nakanishi // *Journal of the Physical Society of Japan*. – 1998. – Vol. 67. – P. 1704–1713.
7. Ando, T. Berry's Phase and Absence of Back Scattering in Carbon Nanotubes / T. Ando, T. Nakanishi // *Journal of the Physical Society of Japan*. – 1998. – Vol. 67. – P. 2857–2862.
8. DiVincenzo, D. P. Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds / D. P. DiVincenzo, E. J. Mele // *Physical Review B*. – 1984. – Vol. 29. – P. 1685–1694.
9. The electronic properties of graphene / A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim // *Reviews of Modern Physics*. – 2009. – Vol. 81. – P. 109–163.
10. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, A. A. Firsov // *Nature*. – 2005. – Vol. 438. – P. 197–200.
11. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene / Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, P. Kim // *Nature*. – 2005. – Vol. 438. – P. 201–204.
12. Infrared Spectroscopy of Landau Levels of Graphene / Z. Jiang, E. A. Henriksen, L. C. Tung, Y.-J. Wang, M. E. Schwartz, M. Y. Han, H. L. Stormer // *Physical Review Letters*. – 2007. – Vol. 98. – 197403.
13. Observation of Half-Integer Quantum Hall Effect in Single-Layer Graphene Using Pulse Magnet / S. Masubuchi, K. Suga, M. Ono, K. Kindo, S. Takeyama, T. Machida // *Journal of the Physical Society of Japan*. – 2008. – Vol. 77. – 113707.
14. Milton Pereira, J. Graphene-based resonant-tunneling structures / J. Milton Pereira, Jr., P. Vasilopoulos, F. M. Peeters // *Applied Physics Letters*. – 2007. – Vol. 90. – 132122.
15. Sharapov, S. G. Transport properties in the d-density-wave state in an external magnetic field: The Wiedemann-Franz law / S. G. Sharapov, V. P. Gusynin, H. Beck // *Physical Review B*. – 2003. – Vol. 67. – 144509.
16. Gusynin, V. P. Magneto-optical conductivity in graphene / V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, J. P. Carbotte // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2007. – Vol. 19. – 026222.
17. Peres, N. M. R. Electronic properties of disordered two-dimensional carbon / N. M. R. Peres, F. Guinea, A. H. Castro Neto // *Physical Review B*. – 2006. – Vol. 73. – 125411.
18. Gusynin, V. P. Transport of Dirac quasiparticles in graphene: Hall and optical conductivities / V. P. Gusynin, S. G. Sharapov // *Physical Review B*. – 2006. – Vol. 73. – 245411.
19. Адамс, Э. Квантовая теория поперечных гальваномагнитных явлений. / Э. Адамс, Т. Гольдштейн // *Вопросы квантовой теории необратимых процессов* : сб. ст. – М.: Изд-во иностранной лит. – 1961. – С. 255–297.
20. Hwang, E. H. Dielectric function, screening, and plasmons in two-dimensional graphene / E. H. Hwang, S. Das Sarma // *Physical Review B*. – 2007. – Vol. 75. – 205418.

УДК 539.23

*Д. В. Завьялов, В. И. Конченков, С. В. Крючков***ПОСТОЯННЫЙ ТОК В ГРАФЕНЕ, ИНДУЦИРОВАННЫЙ ДВУМЯ
ВЗАИМНО ПЕРПЕНДИКУЛЯРНЫМИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМИ ВОЛНАМИ****Волгоградский государственный педагогический университет**

Решена задача о взаимодействии двух электромагнитных волн разной частоты, падающих нормально на поверхность двуслойного графена, векторы напряженности которых направлены перпендикулярно друг другу, с носителями заряда в графене. Рассмотрена возможность возникновения постоянной составляющей электрического тока. Показано, что постоянный ток возникает только в случае, когда отношение частот падающих волн равно двум. Получены зависимости величины постоянного тока от сдвига фаз между падающими волнами, а также – от температуры.

Работа проводилась в рамках программы Минобрнауки «Развитие научного потенциала высшей школы».

Problem of interaction between two incident perpendicularly to surface of bilayer graphene electromagnetic waves with different frequencies and charge carriers of graphene was solved. The capability of direct electric current level appearance was considered. It was shown that the direct current arises if frequency relation of incident waves was equal two only. The dependence of the current magnitude on the phase displacement of incident waves and on temperature was obtained.

The work was done within the bounds of program «Advancement of science potential of higher school» of Department of Education and Science.

Введение. Графен – монослой атомов углерода – был впервые экспериментально получен в 2004 г. [1]. Это послужило толчком для бурного роста интереса к новому материалу. В настоящее время графен изучается теоретически и экспериментально; получены различные модификации графена. Проводимость графена существенно (более чем на порядок) выше проводимости кремния. Уже созданы опытные образцы транзисторов на основе графена [2], и предполагается создание на основе графена новой элементной базы электроники.

Уникальные свойства графена обусловлены особенностями его электронного энергетического спектра, в первую очередь, неаддитивностью и неквадратичностью спектра [3]. Графен является полуметаллом, в его спектре отсутствует энергетическая щель между валентной зоной и зоной проводимости. Это относится, прежде всего, к графену на подложке SiO_2 , который был получен самым первым [1]. Однако в некоторых случаях в спектре графена запрещенная зона себя обнаруживает. В [4] сообщается о получении монослойного графена на подложке SiC , в спектре которого имеется энергетическая щель $\approx 0,26$ эВ ($4,16 \cdot 10^{-20}$ Дж). Запрещенная зона возникает и в спектре двуслойного (bilayer) графена [5], помещенного в поперечное постоянное электрическое поле, причем ширину запрещенной зоны можно регулировать в интервале от 0 до $\approx 0,15$ эВ ($2,40 \cdot 10^{-20}$ Дж), меняя напряженность прило-

женного поля. Теоретически и экспериментально показано, что запрещенная зона существует в спектре графеновых нанолент с границей типа «кресло» (armchair), и ширина запрещенной зоны в спектре наноленты растет с уменьшением ширины самой наноленты (например, [6, 7]).

В работе [8] изучается влияние концентрации легирующих атомов калия на ширину запрещенной зоны двуслойного графена на подложке SiC .

Теоретическое изучение электронных свойств графена облегчается, если в спектре есть запрещенная зона, поскольку в этом случае можно ограничиться однозонным приближением. Более того, наличие щели в спектре приводит к устранению неаналитических особенностей в его поведении. Работа [9] посвящена эффекту возникновения постоянной (перпендикулярной тянущему постоянному электрическому полю) составляющей тока в квазиклассической ситуации, когда на образец графена нормально к его поверхности падает эллиптически поляризованная электромагнитная волна. Было отмечено, что особенности бесщелевого энергетического спектра (а именно разрыв первой производной в точке $|p|=0$) не позволяет аналитически корректно решить задачу даже в случае слабых электрических полей. Квазиклассический подход к изучению транспортных свойств графена используется также, например, в [10–12].

В настоящей работе рассматриваются некоторые новые особенности поведения двуслойного графена с запрещенной зоной, которые могут проявить себя в квазиклассической ситуации.

Постановка задачи

Рассмотрим задачу о взаимном влиянии на носители тока двух электромагнитных волн разной частоты, падающих нормально на поверхность двуслойного графена, с векторами напряженности, направленными перпендикулярно друг другу. Покажем, что при определенном соотношении между частотами этих волн возможно возникновение постоянной составляющей тока в образце.

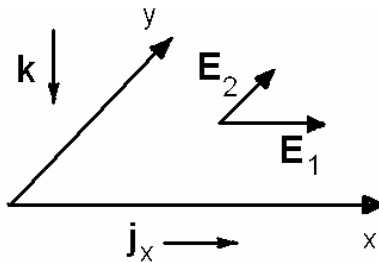


Рис. 1. Геометрия задачи

Геометрия задачи изображена на рис. 1, где $E_1 = E_{10} \cos(\omega_1 t)$, $E_2 = E_{20} \cos(\omega_2 t + \varphi)$ – составляющие напряженности переменных электрических полей. Энергетический спектр носителей тока вблизи дна зоны проводимости ($v_f |p| \ll \Delta \ll t_\perp$) запишем в виде [13]

$$\varepsilon(\mathbf{p}) \approx \Delta - \frac{\Delta v_f^2 |\mathbf{p}|^2}{t_\perp^2} + \frac{v_f^4 |\mathbf{p}|^4}{2\Delta t_\perp^2}, \quad (1)$$

где v_f – скорость на поверхности Ферми (для графена $v_f \approx 10^6$ м/с); Δ – полуширина запрещенной зоны, $t_\perp \approx 0,35$ эВ ($5,60 \cdot 10^{-20}$ Дж) – интеграл перекрытия между слоями графена [14].

$$j_x = j_0 \left\langle \int_{-\infty}^0 d\tau_1 \exp(\gamma \tau_1) \int_0^{2\pi} d\varphi \cos \varphi \int_0^\infty \exp\left(-\frac{\Delta}{T} + \frac{T\Delta}{t_\perp^2} G - \frac{T^3}{2t_\perp^2 \Delta} G^2\right) \left(1 - \frac{T^2 \theta^2}{\Delta^2}\right) \theta^2 d\theta \right\rangle, \quad (7)$$

здесь
$$j_0 = - \left(2\sqrt{2} e n v_f T^{5/2} \Delta^{1/2} \gamma \exp\left(\frac{\Delta}{T} - \frac{\Delta^3}{2t_\perp^2 T}\right) \right) / \left(\pi^{3/2} t_\perp^3 \left(1 + \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{\Delta^3}{2t_\perp^2 T}}\right) \right) \right);$$

$$\gamma = v / \omega_2; \quad G = (g_1 + \theta \cos \varphi)^2 + (g_2 + \theta \sin \varphi)^2;$$

$$g_1 = \alpha_1 (\sin(b(\tau_1 + \tau)) - \sin(b\tau));$$

$$g_2 = \alpha_2 (\sin(\tau_1 + \tau + \delta) - \sin(\tau + \delta));$$

Вычисление плотности электрического тока

Плотность тока определяется стандартным образом:

$$j_x = e \sum_{\mathbf{p}} v_x(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}, t), \quad (2)$$

где
$$\mathbf{v} = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = \left\{ -\frac{2v_f^2 p_x}{t_\perp^2} \left(\Delta - \frac{v_f^2 |\mathbf{p}|^2}{\Delta} \right) - \frac{2v_f^2 p_y}{t_\perp^2} \left(\Delta - \frac{v_f^2 |\mathbf{p}|^2}{\Delta} \right) \right\}. \quad (3)$$

Неравновесная функция распределения $f(\mathbf{p}, t)$ является решением кинетического уравнения Больцмана, столкновительный член которого выберем в приближении частоты столкновений ν , которую в дальнейшем считаем постоянной. Таким образом, уравнение Больцмана имеет вид:

$$\frac{\partial f(\mathbf{p}, t)}{\partial t} + e\mathbf{E} \frac{\partial f(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = -\nu [f(\mathbf{p}, t) - f_0(\mathbf{p})], \quad (4)$$

где $\mathbf{E} = \mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2$; $f_0(\mathbf{p})$ – равновесная функция распределения.

Решение уравнения (4) имеет следующий вид:

$$f(\mathbf{p}, t) = \nu \int_{-\infty}^t dt' \exp(-\nu(t-t')) f_0(\mathbf{p}'(t'; \mathbf{p}, t)), \quad (5)$$

где $\mathbf{p}'(t'; \mathbf{p}, t)$ представляет собой решение классического уравнения движения электрона

$$d\mathbf{p}'/dt' = e\mathbf{E}(t') \quad (6)$$

с начальным условием $t' = t$, $\mathbf{p}' = \mathbf{p}$.

Подставляя решение уравнения (6) в (2), (5) и выбирая $f_0(\mathbf{p})$ в виде функции распределения Больцмана, получим следующее выражение для поперечной поверхностной плотности тока

Угловые скобки в (7) обозначают усреднение по большому, по сравнению с периодами волн, промежутку времени.

Для дальнейшего анализа выражения (7) будем считать, что напряженности электрических полей падающих волн малы, так что $\alpha_1, \alpha_2 \ll 1$. При этом подынтегральное выражение в (7) можно разложить в ряд Тейлора,

$$F(x, y, z) = -\frac{3\pi x^4}{z^5(4 + 5y^2 + y^4)} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{z}{x} + xz\theta^2 - \frac{x^3}{2z}\theta^4\right) \left(\theta^2 - \frac{z^2}{x^2}\right) \times \\ \times \left(\theta^8 x^7 - 3\theta^6 x^5 z^2 + \theta^4 x^3 z(3z^3 - 5x) + \theta^2 x z^3(7x - z^3) + 2z^2(x - z^3)\right) \theta^3 d\theta. \quad (9)$$

Обсуждение результатов

Отметим, что постоянная составляющая тока не равна нулю, только если частоты электромагнитных волн находятся в соотношении $\omega_1 = 2\omega_2$ (т. е. когда $b = 2$). Отметим также, что величина эффекта и его знак зависят от разности фаз между электромагнитными волнами и в случае $\varphi = \pi/4$ постоянная составляющая тока j_x обращается в нуль независимо от значения b , а при $\varphi = 0$ эффект максимален. Интеграл в (9) не выражается в квадратурах. График этой функции $F(x, y, z)$ приведен на рис. 2 при $z = 0,03$. На рис. 3 приведены графики j_{x0} . Хорошо видно, что эффект будет выражен сильнее при более высоких температурах и частотах электромагнитных волн $\omega \geq \nu$. При значениях $\nu \approx 10^{11} - 10^{12} \text{ c}^{-1}$ последнему требованию удовлетворяют частоты терагерцового диапазона.

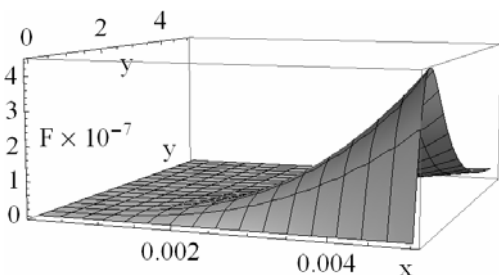


Рис. 2. График функции $F(x, y, z)$ при $z = 0,03$

Обсуждаемый эффект может быть использован, например, для определения сдвига фаз между двумя линейно поляризованными электромагнитными волнами разной частоты, – как детектор второй гармоники или в качестве компенсационного метода измерения частоты.

ограничившись первыми неисчезающими членами.

Взяв интегралы в (7), получим следующее выражение для постоянной составляющей тока, текущего вдоль оси OX :

$$j_x = j_{x0} \alpha_1 \alpha_2^2 \cos(2\varphi) \delta_{b,2}, \\ j_{x0} = j_0 F(T/t_\perp, \gamma, \Delta/t_\perp). \quad (8)$$

Функция $F(x, y, z)$ имеет вид:

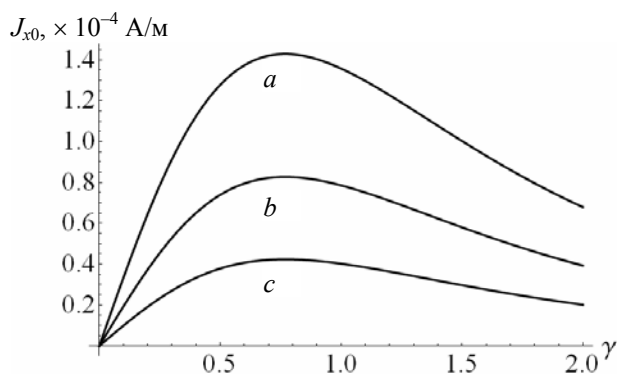


Рис. 3. Зависимость функции j_{x0} от температуры. Кривым «а», «б», «с» соответствуют температуры 30, 25, 20 К (значение полуширины запрещенной зоны полагалось $\Delta = 0,03t_\perp$)

Отметим, что подобный эффект возможен и в графене на подложке SiO_2 , но отсутствие запрещенной зоны в этом случае приводит к «подмешиванию» в ток электронов валентной зоны графена и существенно затрудняет аналитическое исследование эффекта.

Заметим также, что подобного рода взаимное выпрямление электромагнитных волн с частотами, кратными двум, уже изучалось в различных нелинейных материалах, например, в сверхрешетках. Однако ранее изучались ситуации, когда поляризации волн совпадали, и эффект выпрямления давала нелинейность материала. В графене же, как показали наши расчеты, при совпадении поляризаций электромагнитных волн кубического по полям выпрямления не происходит. Эффект наблюдается только при поперечной поляризации волн по отношению друг к другу, что является проявлением неаддитивности энергетического спектра носителей тока.

Проведем, наконец, некоторые численные оценки. При типичных значениях параметров

графена ($n \approx 10^{14} \text{ м}^{-2}$; $\gamma \approx 0,1$; $v_f = 10^6 \text{ м/с}$) поверхностная плотность тока $j_x \approx 10^{-7} \text{ А/м}$, что соответствует пространственной плотности тока $j_{xs} \approx 10^3 \text{ А/м}^2$. Такие плотности тока достижимы в двуслойном графене при температурах порядка 30 К [8]. Условие $\alpha_1, \alpha_2 \ll 1$, необходимое для получения аналитической зависимости (8) при комнатных температурах и частотах падающих волн $\omega_1, \omega_2 \approx 10^{13} \text{ с}^{-1}$, хорошо выполняется при значениях напряженностей электрических полей $E_{10}, E_{20} \approx 3 \cdot 10^4 \text{ В/м}$ (1 ед. СГСЭ). Отметим также, что численный анализ выражения (7) подтверждает вывод о том, что постоянная составляющая тока появляется только при выполнении условия $b = 2$.

Работа проводилась в рамках программы Минобрнауки «Развитие научного потенциала высшей школы».

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov // *Science*. – 2004. – Vol. 306. – P. 666–669.
2. Graphene nano-ribbon electronics / Z. Chen, Y.-M. Lin, M. J Rooks, P. Avouris // *Physica E: Low-dimensional systems and Nanostructures*. – 2007. – Vol. 40. – Is. 2. – P. 228–232.
3. Wallace, P. R. The Band Theory of Graphite / P. R. Wallace // *Physical Review*. – 1947. – Vol. 71. – P. 622–634.
4. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene / S. Y. Zhou, G.-H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, D.-H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto, A. Lanzara // *Nature Materials*. – 2007. – Vol. 6. – P. 770–775.
5. Biased Bilayer Graphene: Semiconductor with a Gap Tunable by the Electric Field Effect / E. V. Castro, K. S. Novoselov, S. V. Morozov, N. M. R. Peres, J. M. B. Lopes dos Santos, J. Nilsson, F. Guinea, A. K. Geim and A. H. Castro Neto // *Physical Review Letters*. – 2007. – Vol. 99. – P. 216802.
6. Energy Band-Gap Engineering of Graphene Nanoribbons / M. Y. Han, B. Özyilmaz, Y. Zhang, P. Kim // *Physical Review Letters*. – 2007. – Vol. 98. – P. 206805.
7. Katsnelson, M. I. Conductance quantization in graphene nanoribbons: adiabatic approximation / M. I. Katsnelson // *The European Physical Journal B*. – 2007. – Vol. 57. – P. 225–228.
8. Controlling the Electronic Structure of Bilayer Graphene / T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, E. Rotenberg // *Science*. – 2006. – Vol. 313. – P. 951–954.
9. Завьялов, Д. В. О возможности эффекта выпрямления поперечного тока в графене / Д. В. Завьялов, С. В. Крючков, Э. В. Марчук // *Письма в Журнал технической физики*. – 2008. – Т. 34. Вып. 21. – С. 21–26.
10. Laakso, M. A. Charge transport in ballistic multiprobe graphene structures [Электронный ресурс] / M. A. Laakso, T. T. Heikkilä // e-Print: arxiv: 0806.4528v1. 2008.
11. Shaffique, A. Boltzmann transport and residual conductivity in bilayer graphene [Электронный ресурс] / A. Shaffique, S. Das Sarma // e-Print: arxiv: 0711.0003v3. 2007.
12. Shaffique, A. Crossover from quantum to Boltzmann transport in graphene [Электронный ресурс] / A. Shaffique, P. W. Brouwer, S. Das Sarma // e-Print: arxiv: 0811.0609v1. 2008.
13. Guinea, F. Electronic states and Landau levels in graphene stacks / F. Guinea, A. H. Castro Neto, N. M. R. Peres // *Physical Review B*. – 2006. – Vol. 73. – P. 245426.
14. The electronic properties of graphene / A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim // *Reviews of Modern Physics*. – 2009. – Vol. 81. – P. 109–163.

ВАКУУМНАЯ ЭЛЕКТРОНИКА

УДК 621.372

А. Г. Шейн, С. С. Буланцев

ВЫЧИСЛЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ПЛОСКОЙ ГРЕБЕНЧАТОЙ СИСТЕМЕ

Волгоградский государственный технический университет

Получены выражения для распределения электростатического поля в пространстве взаимодействия замедляющей системы типа «плоская гребенка над плоскостью», позволяющие рассчитывать структуру электростатического поля с достаточной для практики степенью точности. Проведено исследование зависимости величины неоднородности электростатического поля от ширины резонансной щели и показано, что при размерах щели больше четверти периода замедляющей системы неоднородности вблизи поверхности носят существенный характер.

Expressions for distribution of an electrostatic field in interaction space of slow-wave structure of type «a flat comb over a plane» are received, that allow to count structure of an electrostatic field with range of sufficient accuracy for practice. It is proved that the electrostatic field near to cavity of resonant slots is nonuniform. Research of dependence of amount of heterogeneity of an electrostatic field from width of a resonant slot is conducted and

shown that at the big measures of a slot an order of the period of structure heterogeneity have essential character, as well as at size of the slot equal to half of the period. Also it is shown that the heterogeneity is insignificant at the small sizes of a slot, i.e. she can be neglected.

Введение. Изучение физических процессов, протекающих в приборах сверхвысоких частот, направленное на создание новых устройств с заранее предсказанными характеристиками или на совершенствования параметров современных приборов, – важное приоритетное направление развития физической электроники. Одним из путей, позволяющих решить поставленную задачу, является математическое моделирование физических процессов взаимодействия электромагнитных волн с электронными потоками.

Учитывая сложность процессов, протекающих в приборах, при формулировке математических моделей вводятся различные допущения, которые, по мнению авторов [1–3], не принципиально нарушают общую картину, хотя и вносят дополнительные погрешности в расчеты. В результате, использование различных моделей позволяет не только получить интегральные характеристики (величину выходной мощности, коэффициент полезного действия, зависимости этих параметров от величин индукции магнитного поля и от напряжения на аноде и другие), но и изучить такие тонкие процессы, как конкуренция сигналов с различными частотами, структура электронного потока и т. п.

Стандартным ограничением практически всех математических моделей является использование приближения гладких электродов, когда электростатическое поле в пространстве взаимодействия в плоской системе считается однородным. Однако в реальных замедляющих системах анод представляет собой гофрированную поверхность, что вызывает периодическую неоднородность распределения электростатического поля, учет которой может быть полезен, а в ряде случаев – необходим при изучении тонких эффектов взаимодействия, в том числе и при выявлении электромагнитных колебаний, вызванных неустойчивостью электронного потока.

Классическим типом замедляющей системы, применяемой в электронике приборов М-типа, является «гребенка над плоскостью», представленная на рис. 1. Распределения электростатического поля в ней можно вычислить методом интеграла Кристоффеля – Шварца или численным методом решения соответствующе-

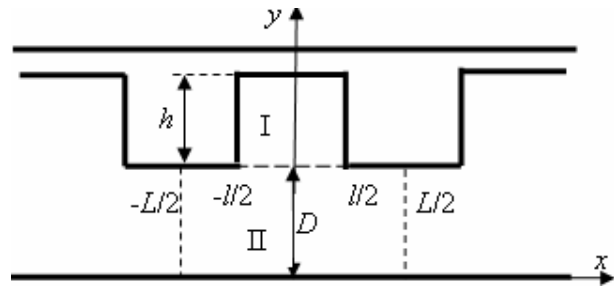


Рис. 1. Замедляющая система типа «плоская гребенка над плоскостью»

го уравнения электростатики. Однако при этом невозможно получить аналитические соотношения, в связи с чем воспользуемся электродинамическим методом расчета – методом частных областей, широко применяемым при решении задач электродинамики.

Определение распределения потенциала

Для решения поставленной задачи разобьем пространство замедляющей системы на две области (см. рис. 1) – область I внутри резонаторов и область II – пространство взаимодействия. Ввиду периодичности системы вдоль направления Ox достаточно рассмотреть только один период системы.

Исходя из физической картины распределения полей, граничные условия для касательных составляющих электрического поля E_x^I и E_y^I к поверхности металла в области I имеют вид:

$$E_x^I = 0 \text{ при } y = h + D, E_y^I = 0 \text{ при } x = \pm l/2, \\ E_x^I(x = l/2) = -E_x^I(x = -l/2).$$

В области II для составляющей электрического поля E_x^{II} на поверхности металла замедляющей системы граничные условия:

$$E_x^{II} = 0 \text{ при } y = D \text{ и } -L/2 \leq x \leq -l/2, \\ E_x^{II} = 0 \text{ при } y = D \text{ и } l/2 \leq x \leq L/2,$$

а на катоде $E_x^{II} = 0$ при $y = 0$.

Кроме этого, исходя из физических закономерностей изменения знака составляющей E_x^{II} в середине ламели и в середине щелей, должно выполняться условие –

$$E_x^{II} = 0 \text{ при } y = D; x = \pm L/2 \text{ и } x = 0.$$

Анод находится под потенциалом $U = U_a$, а на катоде – $U = 0$.

С учетом этих условий получаем следующие выражения для составляющих электростатического поля в каждой из выделенных областей замедляющей системы:

$$E_x^I = \sum_{m=0}^{\infty} B_m \sin\left(\frac{\pi(2m+1)}{l}x\right) \times \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{\pi(2m+1)}{l}(D+h-y)\right)}{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi(2m+1)}{l}(D+h)\right)}, \quad (1)$$

$$E_y^I = \sum_{m=0}^{\infty} B_m \cos\left(\frac{\pi(2m+1)}{l}x\right) \times \frac{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi(2m+1)}{l}(D+h-y)\right)}{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi(2m+1)}{l}(D+h)\right)}. \quad (2)$$

в I области и

$$E_x^{II} = -\sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{2\pi nx}{L}\right) \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{2\pi ny}{L}\right)}{\operatorname{ch}\left(\frac{2\pi nD}{L}\right)}, \quad (3)$$

$$E_y^{II} = A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos\left(\frac{2\pi nx}{L}\right) \frac{\operatorname{ch}\left(\frac{2\pi ny}{L}\right)}{\operatorname{ch}\left(\frac{2\pi nD}{L}\right)}. \quad (4)$$

во II.

Поскольку $\mathbf{E} = -\operatorname{grad}U$, тогда распределение потенциала в пространстве взаимодействия может быть описано соотношением:

$$U = -A_0 y -$$

$$-\sum_{n=1}^{\infty} A_n \left(\frac{L}{2\pi n}\right) \cos\left(\frac{2\pi nx}{L}\right) \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{2\pi ny}{L}\right)}{\operatorname{ch}\left(\frac{2\pi nD}{L}\right)}. \quad (5)$$

Для определения постоянной A_0 воспользуемся условием, что анод находится под потенциалом $U = U_a$ при

$$y = D, \quad -L/2 \leq x \leq -l/2 \quad \text{и} \quad l/2 \leq x \leq L/2.$$

Усредняя потенциал по границе металла (при $y = D$)

$$Ua = -\frac{2}{L-l} \times$$

$$\times \int_{-l/2}^{l/2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos\left(\frac{2\pi nx}{L}\right) \operatorname{th}\left(\frac{2\pi nD}{L}\right) \frac{L}{2\pi n} + A_0 D \right) dx,$$

находим:

$$A_0 = -\frac{Ua}{D} + \frac{2}{L-l} \frac{1}{D} \times \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{\pi nl}{L}\right) \operatorname{th}\left(\frac{2\pi nD}{L}\right) \left(\frac{L}{2\pi n}\right)^2. \quad (6)$$

Для определения неизвестных амплитудных множителей A_n и B_m в (1–4) воспользуемся условиями непрерывности составляющих поля на границе между первой и второй областями (учитывая, что на поверхности металла равна нулю тангенциальная составляющая поля в области II), и ортогональностью функций в заданных интервалах:

$$\int_{-l/2}^{l/2} E_x^{II} \sin\left(\frac{2\pi nx}{L}\right) dx = \int_{-l/2}^{l/2} E_x^I \sin\left(\frac{2\pi nx}{L}\right) dx, \quad (7)$$

$$\int_{-l/2}^{l/2} E_y^{II} \cos\left(\pi \frac{(2m+1)}{l} x\right) dx = \int_{-l/2}^{l/2} E_y^I \cos\left(\pi \frac{(2m+1)}{l} x\right) dx. \quad (8)$$

В результате получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} -A_n \operatorname{th}\left(\frac{2\pi nD}{L}\right) = \sum_{m=0}^{\infty} B_m \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{\pi(2m+1)}{l}h\right)}{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi(2m+1)}{l}(D+h)\right)} \alpha_{mn}; \\ -B_m \frac{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi(2m+1)}{l}h\right)}{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi(2m+1)}{l}(D+h)\right)} = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \beta_{mn} + A_0 \frac{2l(-1)^m}{\pi(2m+1)}, \end{cases} \quad (9)$$

$$\text{где } \alpha_{mn} = \frac{(2m+1)}{2n} x_{mn}^2 \beta_{mn};$$

$$\beta_{mn} = \frac{4}{\pi(2m+1)} (-1)^m \frac{\cos\left[\frac{\pi(2m+1)}{2} x_{mn}\right]}{(1-x_{mn}^2)}; \quad (10)$$

$$x_{mn} = \left[\frac{2n}{(2m+1)} \frac{l}{L} \right],$$

позволяющую определить все неизвестные коэффициенты, входящие в суммы, через величину анодного напряжения.

В итоге находим выражение, позволяющее определить распределение потенциала в пространстве взаимодействия,

$$U^{\text{II}} = \frac{Ua}{D} y - \sum_{n=1}^{\infty} A_n \left[\frac{L}{2\pi n} \cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right) \frac{\text{sh}\left(\frac{2\pi n y}{L}\right)}{\text{ch}\left(\frac{2\pi n D}{L}\right)} - y \frac{2}{(L-l)D} \left(\frac{L}{2\pi n}\right)^2 \sin\left(\frac{\pi n l}{L}\right) \text{th}\left(\frac{2\pi n D}{L}\right) \right]. \quad (11)$$

Анализ полученных результатов

В соотношении (10) имеется разрыв при $x_{mn} = 1$ (когда между размерами щели и периода выполняется соотношения $l/L = (2m+1)/2n$), который легко раскрывается, в результате чего все $\alpha_{mn} = (2m+1)/2n = l/L$, а $\beta_{mn} = 1/x_{mn} = 1$. При этом следует учитывать, что в данном случае должно соблюдаться условие $(2m+1) < 2n$, поскольку размеры щелей меньше периода замедляющей системы.

В случае, когда ширина резонансной щели равна половине периода замедляющей системы, линии электростатического поля в пределах одного периода и эквипотенциальные линии поля в пространстве взаимодействия (область 2) показаны на рис. 2.

Электростатическое поле неоднородно вблизи щели. При увеличении ширины щели неоднородность поля возрастает (рис. 3). Даже при узких щелях наблюдается нарушение однородности распределения поля вблизи анода (рис. 4).

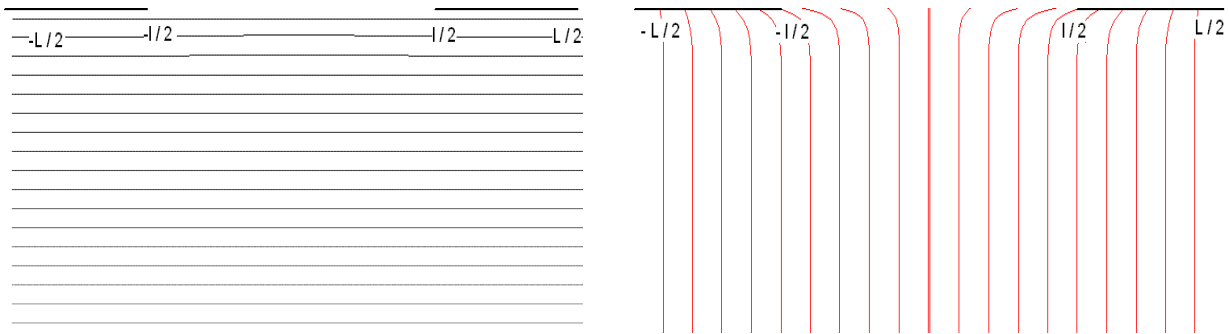


Рис. 2. Эквипотенциальные линии и линии напряженности электрического поля в пространстве взаимодействия при ширине щели $l = L/2$

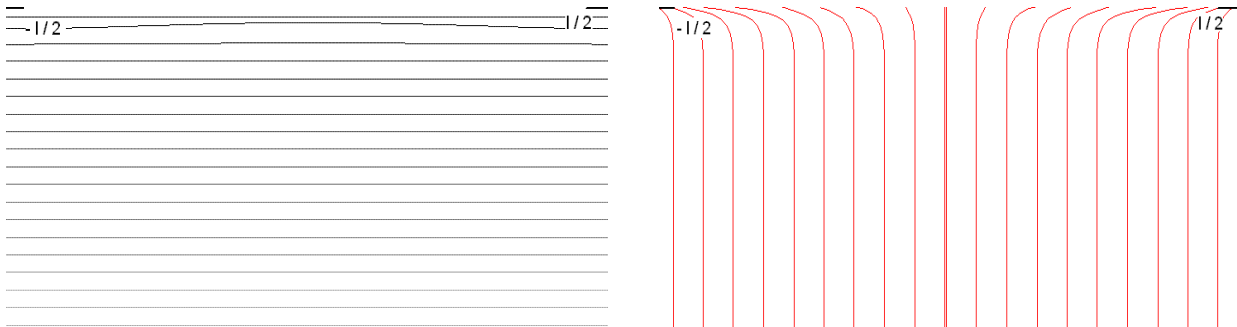


Рис. 3. Эквипотенциальные линии и линии напряженности электрического поля в пространстве взаимодействия при ширине щели $l = 9L/10$

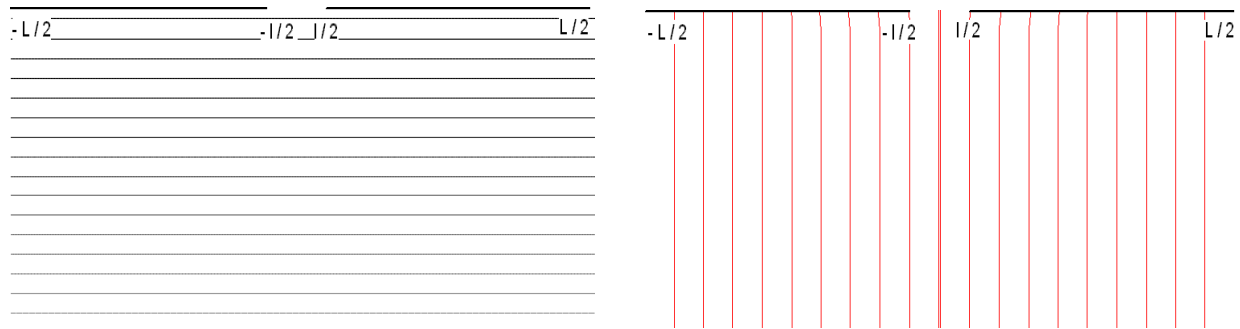


Рис. 4. Эквипотенциальные линии и линии напряженности электростатического поля в пространстве взаимодействия при $l = L/10$

Заключение. По результатам работы можно сделать следующие выводы: необходимо дальнейшее исследование вопроса с целью выяснить влияние неоднородных электростатических полей на процессы взаимодействия электронного потока с замедленной электромагнитной волной в приборах М-типа и описать тонкие эффекты этих процессов математически. Также в работе показано, что пренебрегать неоднородным электростатическим полем можно лишь в определенных случаях, а именно – при небольших размерах резонансной щели по сравнению с периодом «плоской гребенки». В остальных случаях необходим учет неоднородного электростатического поля в решении уравнений движения электронного потока.

УДК 621 : 385.6

А. Г. Шейн, Е. А. Шамов

СТОХАСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ ПЛОСКОГО ЭЛЕКТРОННОГО ПОТОКА В СКРЕЩЕННЫХ СТАТИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ И МАГНИТНОМ ПОЛЯХ

Волгоградский государственный технический университет

Рассматривается трехмерная модель движения плоского электронного потока в скрещенных электрическом и магнитном полях при наличии случайных величин координат влета, значений скоростей и углов влета электронов на входе в пространство взаимодействия. Показано, что наличие малых случайных отклонений параметров, определяющих инжекцию электронов, влияет на характер движения. Определено влияние величины шага интегрирования уравнения движения на получение корректных результатов расчета.

The three-dimensional model of movement of a flat electronic stream in the crossed electric and magnetic fields is considered at presence of random variables of coordinates enter, values of speeds and corners enter electrons on an input in space of interaction. It is shown that presence of small casual deviations of the parameters determining injection electrons, influences character of movement. The role of a step of integration of the equation of movement on reception of correct results of calculation is determined.

Изучение физических процессов, протекающих в приборах сверхвысоких частот, направленное на создание новых устройств с заранее предсказанными характеристиками или на совершенствования параметров современных приборов, является одним из приоритетных направлений развития физической электроники. Среди всех типов СВЧ-приборов важное место принадлежит электровакуумным приборам М-типа, имеющим хорошие технические характеристики (высокий электронный коэффициент полезного действия, достаточно малый вес при генерации или усилении больших уровней мощности). Это позволяет эффективно использовать их в системах: радиолокации, радионавигации, радиопротиводействия; в устройствах промышленного нагрева, быту.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Бинс, К. Анализ и расчет электрических и магнитных полей [Текст] / К. Бинс, П. Лауренсон. – М.: Энергия, 1970. – 376 с.
2. Бухгольц, Г. Расчет электрических и магнитных полей [Текст] / Г. Бухгольц. – М.: ИЛ, 1961. – 712 с.
3. Вайнштейн, Л. А. Лекции по сверхвысокочастотной электронике [Текст] / Л. А. Вайнштейн, В. А. Солнцев. – М.: Советское радио, 1973. – 399 с.
4. Васянович, А. В. Анализ точности решения уравнения движения в приборах М-типа / А. В. Васянович, Г. И. Чурюмов [Текст] // «Радиотехника». – 1986. – Вып. 77. – С. 44–48.
5. Шевчик, В. Н. Аналитические методы расчета в электронике СВЧ [Текст] / В. Н. Шевчик, Д. И. Трубецков. – М.: Советское радио, 1970. – 345 с.

Наряду с этими качествами все приборы со скрещенными полями обладают рядом параметров, которые можно рассматривать как недостатки или использовать как полезные свойства. Это, прежде всего, высокий уровень шума, присущий всем приборам М-типа [1,2,3].

С одной стороны, он ограничивает минимальный уровень входного сигнала и не позволяет получать высокий коэффициент усиления в лучевых усилителях, что не дает возможности получить «чистый» одночастотный сигнал при генерации высоких уровней мощности, приводя, тем самым, к появлению целого спектра колебаний с различными частотами в выходном тракте [2,3]. Это может привести к нарушению работы других радиоэлектронных средств (РЭС). Проблемы элект-

ромагнитной совместимости (ЭМС) систем, использующих данные приборы, являются весьма сложно решаемой задачей и требуют порой такого усложнения выходных трактов мощных СВЧ-устройств, что приводит к существенным экономическим затратам.

С другой стороны, наличие сложного спектра шумов, например, в генераторах, в принципе, допускает создание приборов, способных генерировать (в пределах полосы пропускания замедляющей системы) стохастический сигнал, что позволяет создавать генераторы шума с высоким уровнем мощности.

Хотя многие исследователи констатируют высокий уровень шума, до сих пор нет единого мнения о его причинах. В первую очередь обращает на себя внимание шум, вызванный оседанием электронов на электроды, который должен существовать и при наличии только статистических полей. Однако высокий уровень широкополосного шума как в высокочастотном тракте, так и на коллекторе усилителей и генераторов со скрещенными полями значительно превышает уровень дробового и фликкер-шумов [1,2,3].

Экспериментальным исследованиям о токе отрицательного электрода или шуме коллекторного тока посвящено достаточно много работ. Однако спектр этих шумов лежит в низкочастотном диапазоне, в то время как шумы в приборах М-типа не имеют равномерного распределения по частотам, образуя сложный спектр. Измерениям же коэффициента шума в высокочастотной области спектра уделялось недостаточно внимания, обычно они проводились лишь как побочные измерения при разработке приборов.

Из гипотез, которые в той или иной мере могут корректно описать появление шумов, можно, прежде всего, отметить влияние электронного потока на нарастание шума. Электронный поток в скрещенных электрическом и магнитных полях нестабилен даже при отсутствии влияния на него внешних факторов, поскольку при эмиссии с катода и при дальнейшем его движении в пространстве взаимодействия взаимное влияние отдельных электронов друг на друга приводит к случайному изменению их траекторий и скоростей. Кроме того, поток склонен к самопроизвольному возбуждению плазменных колебаний за счет перераспределения зарядов в пространстве взаимодействия, циклотронных, ларморовых и

гибридных колебаний при движении частиц в магнитном поле [4]. Все это приводит к мысли, что изучение спектрального состава электронного потока, транспортируемого в скрещенных статических электрическом и магнитном полях, может помочь в какой-то степени понять причины появления достаточно высоких уровней мощности шума [5,6].

Таким образом, необходимо разобраться в достаточно тонкой структуре формирования электронного потока. Поскольку экспериментальные исследования не всегда позволяют выявить природу шума, а лишь показывают его наличие, одним из инструментов, позволяющих определить причины его появления, может быть математическое моделирование динамики электронного потока. Однако точность моделирования таких явлений в существенной мере зависит от учета пространственного заряда и взаимодействия частиц друг с другом. Широко используемый в настоящее время «метод крупных частиц» не позволяет выявить тонкие эффекты ввиду большого количества электронов, входящих в эти крупные частицы, что приводит к искажению величины сил, действующих между ними. Действительно, если в уравнения движения входит удельный заряд частицы, равный удельному заряду электрона, то силы пространственного заряда рассчитываются для крупной частицы и их величина намного превышает реальную величину силы Кулона.

Кроме того, в большинстве случаев вводится предположение о наличии моноскоростного потока, а траектории частиц на входе в пространство взаимодействия считаются параллельными электродам. Поэтому естественной целью является приближение модели к реальному электронному потоку, увеличение точности и быстроты расчета динамики, что необходимо для изучения шумовых характеристик.

Таким образом, задача сводится к решению классического уравнения движения частиц, составляющих электронный поток:

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{e}{m} \{ \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_{\text{пз}} + [\mathbf{v}_i \mathbf{B}_0] \},$$

где \mathbf{E}_0 и \mathbf{B}_0 – векторы напряженности и магнитной индукции статического поля; $\mathbf{E}_{\text{пз}}$ – напряженность поля в месте расположения частицы, обусловленная кулоновским взаимодействием частиц; \mathbf{v}_i – вектор скорости i -й частицы.

В данной модели электронного потока в скрещенных полях используется расчет взаимодействия между частицами электронного потока, представляемыми в виде материальных точек, методом «частица – частица» [6] при движении его в трехмерной области. Эта область – пространство взаимодействия – на данном этапе состоит из гладкого положительного электрода – анода, на который подан положительный потенциал, помещенного в П-образный отрицательный электрод (катод) с нулевым потенциалом (рис. 1).

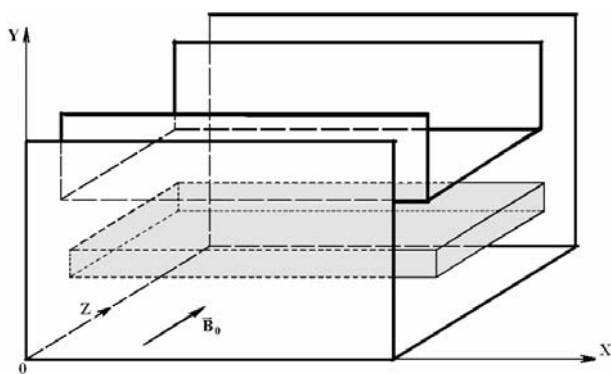


Рис. 1. Принципиальная схема ЛБВ М-типа с инжектированным электронным пучком

Координаты влета частиц в пространство взаимодействия в пределах размеров потока, имеющего на входе прямоугольную форму, задаются по закону случайных чисел; при этом величины продольных скоростей и углов влета также выбираются случайно. Изменение скорости влета частиц выбирается в интервале $\pm 10\%$ относительно величины дрейфовой скорости $v_0 = E_0 / B_0$, где E_0 и B_0 – величины напряженности электрического поля и магнитной индукции статических полей. Угол влета электронов определяется отношением скоростей частиц по осям OY и OZ , задаваемых в пределах $\pm 10\%$ от величины дрейфовой скорости частиц (по оси X) по случайному закону. Расчет взаимодействия между частицами электронного потока методом «частица – частица», т. е. расчет кулоновского взаимодействия между частицами выбран, исходя из тех соображений, что он позволяет непосредственно определять силы, действующие на частицу со стороны других частиц именно в том месте, где частица находится. Такая модель лучше соответствует реальной картине движения электронов даже в хорошо сформированном электронном потоке.

Увеличение количества частиц и уменьшение их массы и заряда требует использования специальных вычислительных методов расчета, основанных на распараллеливании вычислений. В этом случае главный процесс равномерно (исходя из вычислительных мощностей каждого процессора) распределяет расчетные задания между всеми процессами, которые рассчитывают задания и пересылают главному процессу необходимые результаты. Каждый процесс закрепляется за своим физическим ядром процессора(ов). При моделировании динамики электронного потока в скрещенных полях задания по расчету взаимодействия между частицами и пересчет параметров частиц распределяются между процессами. Программа сохраняет данные о потоке в файлах с расширением *.3dg и *.3dd каждый такт, соответствующий шагу интегрирования по времени. Файлы, имеющие расширение *.3dg, отображаются в 3-мерном пространстве с помощью программы 3D Grapher и хранят координаты электронов в потоке. Файлы, имеющие расширение *.3dd, хранят координаты, скорости и ускорения электронов в потоке и могут использоваться для подробного анализа.

Для анализа влияния случайного распределения точек инжекции электронов в пространство взаимодействия, их скоростей и углов влета приведем несколько примеров. На рис. 2 показаны структуры электронного потока для четырех случаев: *a* – когда все крупные частицы имеют одинаковую величину скорости влета, равную дрейфовой скорости, и влетают параллельно оси OZ , но координаты влета выбираются случайно в пределах прямоугольного поперечного сечения потока; *b* – когда величины угла влета электронов задаются по случайному закону, но величины скоростей остаются одинаковыми; *c* – величины скоростей частиц выбраны случайным образом (в пределах заданных величин вариации скоростей, указанных ранее), вектор скорости остается параллельным оси OZ ; *d* – добавляется случайный угол влета каждой частицы при сохранении случайного выбора координат влета и величин скоростей каждой крупной частицы.

Чтобы на картину динамики потока меньшее влияние оказала величина пространственного заряда, величина плотности пространственного заряда была выбрана малой и составляла $6,7 \cdot 10^{-4}$ Кл/м³, $\omega_p = 2,6 \cdot 10^9$ рад/с, а $\omega_c = 1,76 \cdot 10^{10}$ рад/с. Видно, что в первом случае

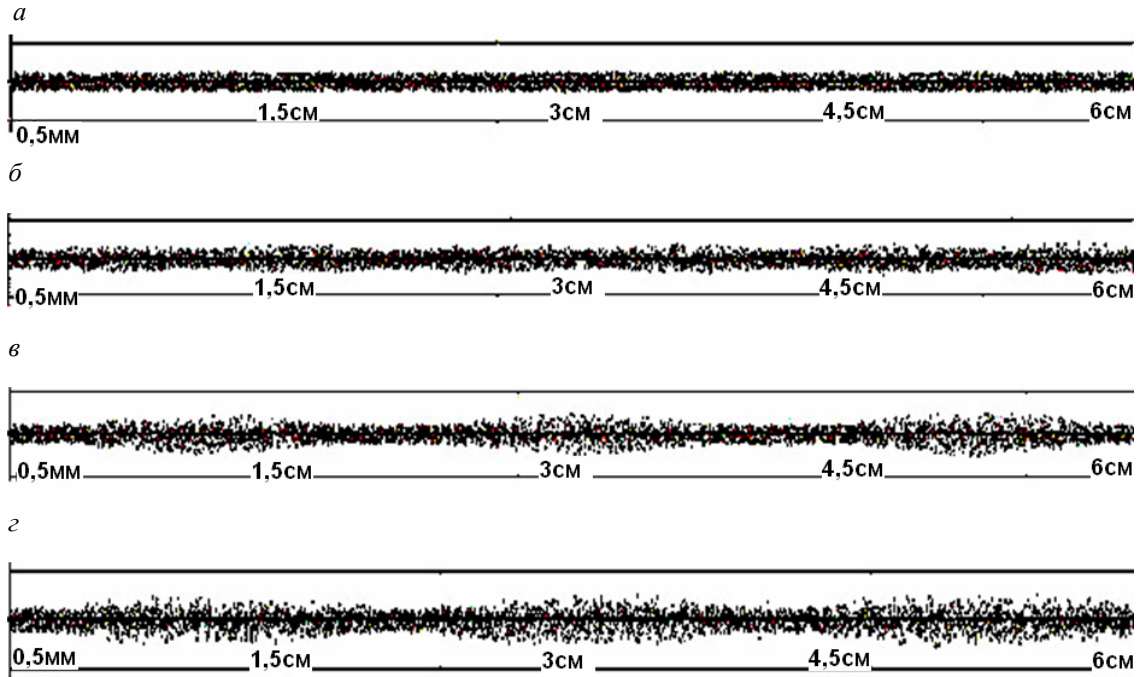


Рис. 2. Картины структуры электронного потока при малых величинах объемной плотности пространственного заряда

практически точно выполняется условие ламинарности потока, связанное с равенством величины продольной скорости электронов дрейфовой скорости. Однако при наличии вариаций величин скоростей и углов их влета картина существенно изменяется, и даже при малых величинах пространственного заряда появляются периодические искажения внешней границы,

приблизительно определяемой из условия $\lambda = (2\pi / \omega_c) v_0$.

При повышении величины тока при неизменных размерах поперечного сечения потока, что эквивалентно увеличению пространственного заряда ($\omega_p = 1,28 \cdot 10^{10}$ рад/с), картина изменяется (рис. 3).

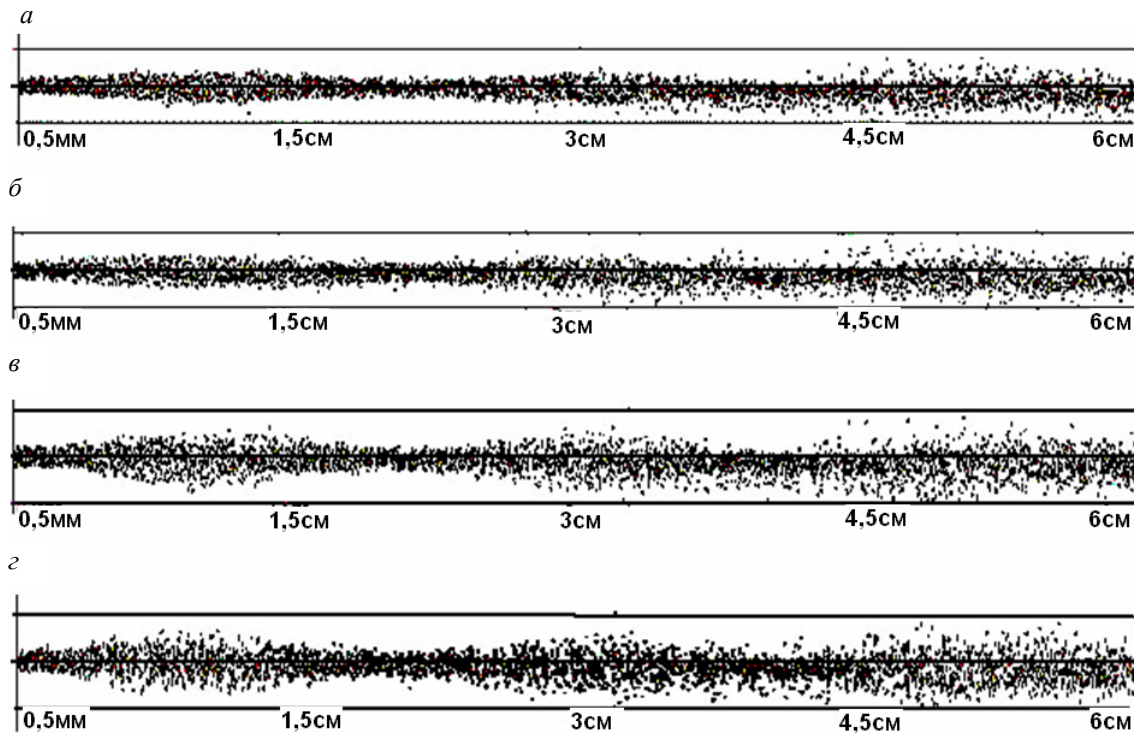


Рис. 3. Структуры электронных потоков при больших величинах тока

Нарушение формы границы наблюдается уже при инжекции моноскоростного потока (рис. 3, *a*), а амплитуда пульсаций увеличивается при введении дополнительных условий вариации величин скоростей и углов влета частиц (рис. 3, *б*, *в* и *г*).

Указанная на рисунке нумерация потоков совпадает с используемой на рис. 2.

Наряду с нарушением условия инжекции ламинарного потока в существенной мере проявляется роль расталкивающего действия кулоновских сил, и толщина потока возрастает при движении его вдоль пространства взаимодействия.

Строго говоря, появление пульсаций при наличии неколлинеарности векторов скоростей частиц в тонком потоке при малых плотностях пространственного заряда легко объясняется даже в пределах приближенных теорий [7]. Однако при совпадении направлений векторов скоростей появление пульсаций можно объяснить только наличием действия кулоновских сил. При больших плотностях пространственного заряда (условие $\omega_p > \omega_c$) линейная теория дает просто неверные результаты.

Корректность получаемых при расчетах результатов определяется правильным заданием параметров вычислительных процедур, а не только величиной и массой крупных частиц. Наиболее существенным из таких параметров

является шаг (или такт) интегрирования уравнений движения, который, кроме всего, определяет и расстояние, проходимое частицей за один такт. Приведенные на рис. 4 картины структур потоков, рассчитанные при различных величинах шага, ясно демонстрируют необходимость выбора соответствующей величины Δt для получения корректных результатов.

Очевидно, что при $\Delta t > 3 \cdot 10^{-12}$ с форма границ и структура потока для данного набора параметров (сила тока, количество частиц, величина скорости электронов и т. п.) существенно нарушается, в то время как для меньших величин Δt она практически не изменяется (с учетом задания стохастических условий влета частиц).

Отметим, что при $\Delta t = 10^{-10}$ с величина пробега частицы составляет 6 мм, а при $\Delta t = 3 \cdot 10^{-12}$ с – 0,18 мм. Естественно, что при больших расстояниях пробега результаты не могут быть корректными. Таким образом, модель, учитывающая произвольность координат влета частиц, стохастическое распределение скоростей, углов влета электронов и учет предыстории электронного потока до влета его в пространство взаимодействия, позволяет изучать динамические процессы, происходящие в различных потоках с высокой степенью достоверности.

Распараллеливание дает возможность уменьшить время расчета, заряд и массу круп-

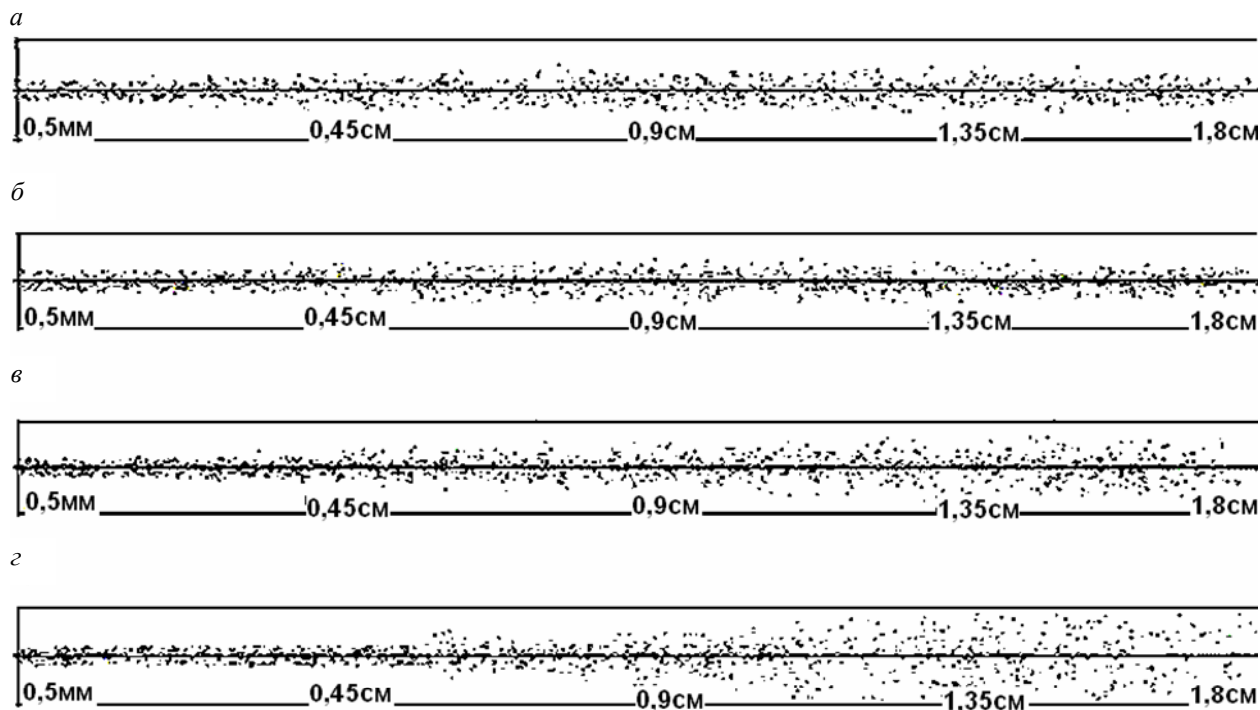


Рис. 4. Структуры электронных потоков:
такт равен: *a* – $3 \cdot 10^{-13}$ с; *б* – $3 \cdot 10^{-12}$ с; *в* – $3 \cdot 10^{-11}$ с; *г* – 10^{-10} с; *a*, *б*, *в*, *г* – $\omega_p = 2,6 \cdot 10^9$ рад/с

ной частицы и получить результаты динамики, близкие к явлениям в реальном потоке. При этом необходимо выбирать оптимальное время такта, исходя из расстояния, которое проходит частица за это время.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Калинин, Ю. А. Сложная динамика и явление динамического хаоса в потоке заряженных частиц, формируемом магнетронно-инжекторной пушкой (численный и физический эксперимент) [Текст] / Ю. А. Калинин, В. Н. Кожевников, А. Г. Лазерсон // ЖТФ. – 2000. – Т. 70. – Вып. 7. – С. 83–91.
 2. Шаповалов, А. С. Спектры модуляционных шумов генератора обратной волны магнетронного типа [Текст] / А. С. Шаповалов // Вопросы прикладной физики. – 1998. – Вып. 4. – С. 64–65.

3. Шаповалов, А. С. Флуктуации сигнала и их спектры, вызванные СВЧ-шумами электронного пучка генератора обратной волны магнетронного типа [Текст] / А. С. Шаповалов // Вопросы прикладной физики. – 1998. – Вып. 4. – С. 66–68.
 4. Михайловский, А. Б. Теория плазменных неустойчивостей. В 2 т. Т. 2. Неустойчивости неоднородной плазмы [Текст] / А. Б. Михайловский. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Атомиздат, 1977. – 360 с.
 5. Гутин, В. С. Обнаружение стохастических сигналов при дискретном спектральном анализе [Текст] / В. С. Гутин // Радиотехника. – № 4. – 2003. – С. 28.
 6. Шеин, А. Г. Спектральные характеристики ленточного электронного потока в скрещенных полях [Текст] / А. Г. Шеин, Р. А. Евдокимов // Зарубежная радиоэлектроника. Успехи современной радиоэлектроники. – 2002. – № 8. – С. 4–8.
 7. Шеин, А. Г. Вакуумная и газоразрядная электроника. В 2 ч. Ч. 1.: учеб. пособие для студентов // А. Г. Шеин, Д. Л. Ковтун. – Волгоград ; ВолгГТУ. – 2008. – 106 с.

АКУСТОЭЛЕКТРОНИКА И МОЛЕКУЛЯРНАЯ ЭЛЕКТРОНИКА

УДК 547.567:541.124

В. И. Порхун, И. В. Поляков

РАДИОИЗЛУЧЕНИЕ В СПИН-СПИНОВЫХ ПЕРЕХОДАХ С ИНВЕРСНОЙ НАСЕЛЕННОСТЬЮ ЯДЕР ВОДОРОДА

Волгоградский государственный технический университет

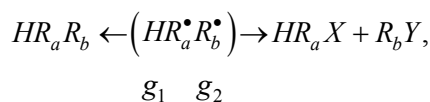
Дано решение уравнения Шредингера со спиновым гамильтонианом для модельной системы радикалов. Приведены результаты фотореакций хинона со спиртами, найден механизм этих реакций. Описан и исследован эффект стационарной поляризации ядер водорода при фотореакции фурана в спирте.

The decision of equation Schrodinger with spin Hamiltonian for modeling system of radicals is given. Results of photoreactions quinon with spirits are resulted, the mechanism of these reactions is found. The effect of stationary polarization of kernels of hydrogen is described and investigated at photoreaction furan in spirit.

Для изучения механизмов радикальных реакций (т. е. с распаренными электронами в радикальной паре) в последнее время широко применяется метод химической поляризации ядер (ХПЯ), эффекты которого можно регистрировать в спектрах ядерного магнитного резонанса.

В подобных радикальных или ион-радикальных парах создаются магнитные моменты электронов, которые сильно взаимодействуют между собой, с магнитными моментами ядер и внешним магнитным полем. Все эти взаимодействия при некоторых условиях приводят к несохранению электронного и ядерного спина реагирующей системы, и возникновению магнитных эффектов в химических реакциях.

Рассмотрим взаимосвязь изменений в электронной и ядерной спин-системах на простом примере модельной пары



в которой имеется лишь один протон и земеновские энергии неспаренных электронов в радикалах различны ($g_1\beta H, g_2\beta H$), где g_1, g_2 и g – факторы радикалов. Такая пара может либо рекомбинировать, либо диссоциировать: выходящие из радикальной пары радикалы участвуют в реакциях замещения или присоединения, превращаясь в продукты HR_aX и R_bY .

Энергетические уровни (термы) пары показаны схематично на рис. 1.

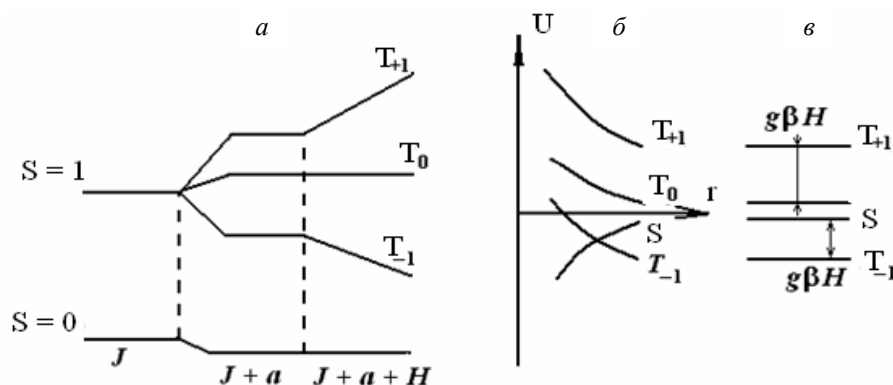


Рис. 1. Схема энергетических уровней радикальной пары:

a – расщепление уровней объемным, сверхтонким и зеемановским взаимодействием; *b* – зависимость энергии уровней от расстояния между радикалами в паре; *c* – положение уровней в сильном магнитном поле на больших расстояниях

Обменное взаимодействие неспаренных электронов в паре вызывает расщепление синглетного S и триплетного T термов. Сверхтонкое электрон-ядерное взаимодействие (СТВ) снимает вырождение триплетного уровня расщепляя его на три $T_{-1}T_0T_{+1}$ различающихся энергией взаимодействия электронов с ядром. Внешнее магнитное поле вызывает дополнительное зеемановское расщепление этих подуровней. Спиновые функции состояний имеют следующий вид:

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta - \beta\alpha), \quad T_{+1} = \alpha\alpha,$$

$$T_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta + \beta\alpha), \quad T_{-1} = \beta\beta.$$

Здесь α и β – спиновые функции электронной пары. Для синглет-триплетных переходов в нашем случае можно ограничиться только S - T_0 переходом.

Чтобы решить задачу о селективности молекул по ядерно-спиновым состояниям, необходимо вычислить вероятности, с которыми в продукт рекомбинации протон радикала HR_a^\bullet переходит со спином α_n или β_n . Полные волновые функции пары, зависящие от времени, являются суперпозицией волновых функций состояний S и T_0 :

$$\varphi^{\alpha_n}(t) = [C_S^{\alpha_n}(t)S + C_{T_0}^{\alpha_n}(t)T_0] \alpha_n, \quad (1)$$

$$\varphi^{\beta_n}(t) = [C_S^{\beta_n}(t)S + C_{T_0}^{\beta_n}(t)T_0] \beta_n.$$

Первая описывает состояние пары со спином протона α_n , вторая – со спином β_n . Коэффициенты $|C_S|^2$ и $|C_{T_0}|^2$ определяют вероятность того, что в момент времени t пара находится в триплетном или синглетном состоянии; индексы α_n и β_n относятся к состояниям пары с

ядерным спином α_n и β_n , соответственно. Если начальное состояние пары триплетное, т. е. $|C_S(0)|^2 = 0$, $|C_{T_0}(0)|^2 = 1$. Для рекомбинации необходим ее переход в состояние с антипараллельными спинами, т. е. в синглет. Триплет-синглетный (T - S) переход с изменением суммарного электронного спина запрещен. Однако если существуют связи между электронной и ядерной спиновыми системами, запрет на переход снимается.

Для нахождения скорости превращения триплетной пары в синглетную необходимо решить временное уравнение Шредингера

$$i \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \mathbf{H} \varphi, \quad (2)$$

где гамильтониан определяет взаимодействие электронов и ядер в паре:

$$\mathbf{H} = \beta H (g_1 S_1 + g_2 S_2) - J \left(\frac{1}{2} + 2 S_1 S_2 \right) + a I S_1. \quad (3)$$

Первый член описывает зеемановское взаимодействие электронов; второй – представляет обменную энергию; третий – сверхтонкое взаимодействие электронов и протона в радикале HR_a^\bullet . Подставляя в (2) первую функцию (1) и умножая обе части полученного уравнения на функции S и T_0 , получим систему двух уравнений:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial C_S^{\alpha_n}}{\partial t} \langle S|S \rangle + i \frac{\partial C_{T_0}^{\alpha_n}}{\partial t} \langle S|T_0 \rangle &= \\ &= C_S^{\alpha_n} \langle S|\mathbf{H}|S \rangle + C_{T_0}^{\alpha_n} \langle S|\mathbf{H}|T_0 \rangle, \\ i \frac{\partial C_S^{\alpha_n}}{\partial t} \langle S|T_0 \rangle + i \frac{\partial C_{T_0}^{\alpha_n}}{\partial t} \langle T_0|T_0 \rangle &= \\ &= C_S^{\alpha_n} \langle T_0|\mathbf{H}|S \rangle + C_{T_0}^{\alpha_n} \langle T_0|\mathbf{H}|T_0 \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Она определяет временную зависимость коэффициентов $C_{T_0}^{\alpha_n}$ и $C_S^{\alpha_n}$ и, следовательно, T_0 - S эволюцию пары с ядерным спином α_n . Аналогично система получается для коэффициентов $C_{T_0}^{\beta_n}$ и $C_S^{\beta_n}$, характеризующих эволюцию пары с ядерным спином β_n .

Вычисляя в (4) матричные элементы $\langle S|S \rangle$; $\langle S|T_0 \rangle$; $\langle S|\mathbf{H}|S \rangle$; $\langle S|\mathbf{H}|T_0 \rangle$, получаем систему

$$i \frac{\partial C_S^{\alpha_n}}{\partial t} = C_S^{\alpha_n} J + C_{T_0}^{\alpha_n} \left(\frac{1}{2} \Delta g \beta H + \frac{1}{4} a \right),$$

$$i \frac{\partial C_{T_0}^{\alpha_n}}{\partial t} = C_S^{\alpha_n} \left(\frac{1}{2} \Delta g \beta H + \frac{1}{4} a \right) - C_{T_0}^{\alpha_n} J \quad (5)$$

для определения коэффициентов $C_{T_0}^{\alpha_n}$ и $C_S^{\alpha_n}$; $\Delta g = g_1 - g_2$.

Для коэффициентов $C_{T_0}^{\beta_n}$ и $C_S^{\beta_n}$ аналогичная система имеет вид:

$$i \frac{\partial C_S^{\beta_n}}{\partial t} = C_S^{\beta_n} J + C_{T_0}^{\beta_n} \left(\frac{1}{2} \Delta g \beta H - \frac{1}{4} a \right),$$

$$i \frac{\partial C_{T_0}^{\beta_n}}{\partial t} = C_S^{\beta_n} \left(\frac{1}{2} \Delta g \beta H - \frac{1}{4} a \right) - C_{T_0}^{\beta_n} J. \quad (6)$$

Учитывая, что в начальный момент времени пара была триплетной, т. е. $|C_{T_0}^{\alpha_n}(0)|^2 = 1$, решением (5) и (6) получаем

$$C_S^{\alpha_n, \beta_n} = -i \frac{\frac{1}{2} \Delta g \beta H \pm \frac{1}{4} a}{D^{\alpha_n, \beta_n}} \sin D^{\alpha_n, \beta_n} t,$$

$$C_{T_0}^{\alpha_n, \beta_n} = \cos D^{\alpha_n, \beta_n} t - i \frac{J}{D^{\alpha_n, \beta_n}} \sin D^{\alpha_n, \beta_n} t, \quad (7)$$

где $D^{\alpha_n, \beta_n} = \sqrt{\left(\frac{1}{2} \Delta g \beta H \pm \frac{1}{4} a \right)^2 \pm J^2}$.

Вероятность продукта рекомбинации из триплетной пары к моменту времени t пропорциональна примеси синглетного состояния $|C_S|^2$ к этому моменту:

$$|C_S^{\alpha_n, \beta_n}(t)|^2 = \frac{\left(\frac{1}{2} \Delta g \beta H - \frac{1}{4} a \right)^2}{(D^{\alpha_n, \beta_n})^2} \sin^2 D^{\alpha_n, \beta_n} t. \quad (8)$$

Из последнего уравнения следует, что скорости образования молекул HR_aR_b со спином водорода α_n и β_n различны и пропорциональны, соответственно, $\left(\Delta g \beta H + \frac{1}{2} a \right)^2$ и $\left(\Delta g \beta H - \frac{1}{2} a \right)^2$.

Ясно, что вероятности обнаружения α_n - и β_n -спин протона в молекуле, образующейся при рекомбинации пары, различны и зависят от величины и знака Δg и a . Каптейн* предложил компактную форму соотношений для определения знаков сигналов ЯМР при наличии ХПЯ:

$$\Gamma = \mu \varepsilon \Delta g a. \quad (9)$$

В этом соотношении $\mu = +1$, если предшественником молекулы является триплетная пара и $\mu = -1$, если предшественник – синглетная пара; $\varepsilon = +1$ – для продукта рекомбинации и $\varepsilon = -1$ – для продукта превращения радикалов покинувших пару. Величины Δg и a определяют знаки разности g -факторов и констант СТВ. $\Gamma > 0$ соответствует положительной поляризации (A); получаем аномально большой сигнал поглощения. $\Gamma < 0$ соответствует отрицательной поляризации (E), т. е. сигналу испускания.

При фотолизе 2,6-дифенил – 1,4-бензохинона в растворителях с добавлением различных спиртов сигналы ХПЯ наблюдаются на протонах исходного хинона, дибензофурана и спирта.

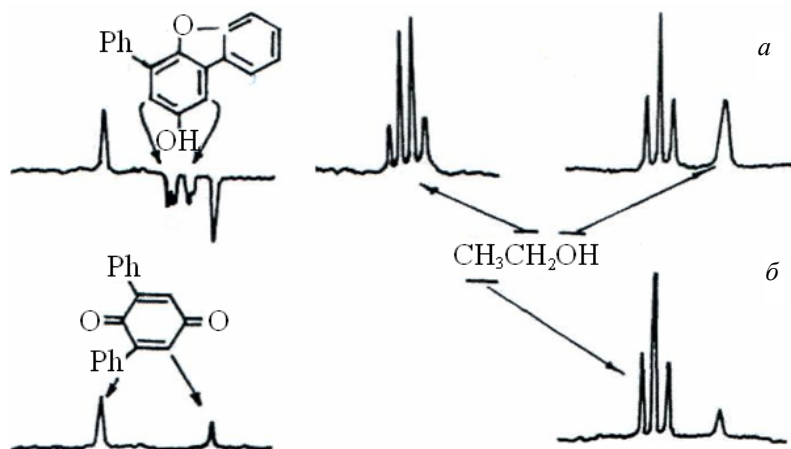
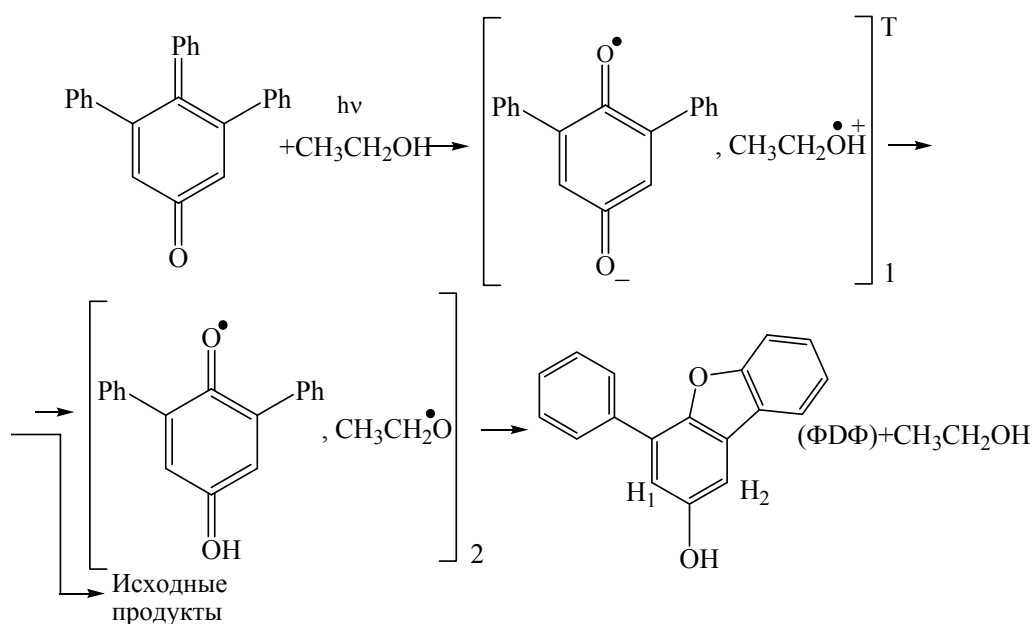


Рис. 2. Спектр ПМР продуктов реакции 2,6-дифенил – 1,4-бензохинона и этанола: а – до облучения их растворов; б – при облучении. Концентрация хинона и спирта в растворе – $2 \cdot 10^{-2}$ моль/л

* Бучаченко, А. Л. Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях [Текст] / А. Л. Бучаченко, Р. З. Сагдеев, К. М. Салихов. – Новосибирск : Наука, 1978. – 296 с.

Механизм фотореакции представлен на следующей схеме:



Согласно схеме, при переносе электрона от спирта к триплетным молекулам хинона образуются первичные радикальные пары РП1, состоящие из анион-радикала семихинона и катион-радикала спирта. Анион-радикалы протонируются и РП1 превращаются во вторичные РП2, сохраняя мультиплетность первичных пар. Диспропорционирование радикалов во вторичных парах дает, с одной стороны, молекулы спирта и дибензофурана, а с другой – спирта и хинона; наблюдаемые эффекты ХПЯ создаются по механизму S-T переходов в радикальной паре 2. Отрицательная поляризация мета-протонов дибензофурана подтверждается правилом Каптейна для интегральной поляризации [1]:

$$\Gamma = +++-+ < 0.$$

Сигналы соответствуют эмиссии.

В рамках предложенной схемы объясняются все наблюдаемые эффекты ХПЯ в фотореакции хинона со спиртами.

Авторы обратили внимание на аномально продолжительную поляризацию протонов конечного продукта фотореакций – дибензофурана (ФДФ).

Представляло интерес исследовать механизмы фотореакции чистого дибензофурана в различных средах. Нами был проведен фотолиз (ФДФ) в среде бензола, ацетонитрила, воды непосредственно в датчике спектрометра ЯМР (все растворители дейтерированы). Спектры ПМР практически не отличались от спектров, снятых в темновых условиях.

При добавлении в раствор метанола мы наблюдали сильную отрицательную поляризацию на мета-протонах исходного соединения (ФДФ).

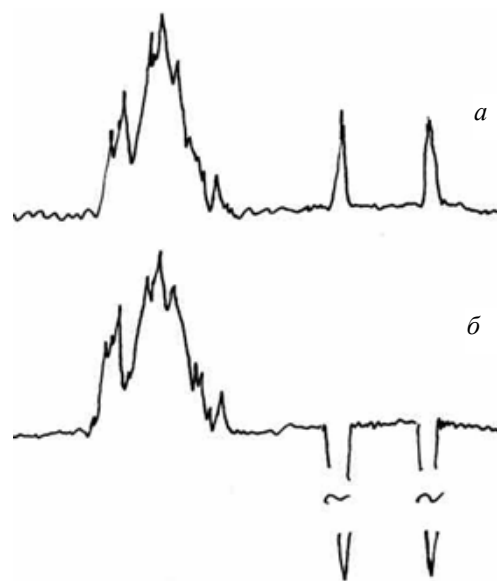
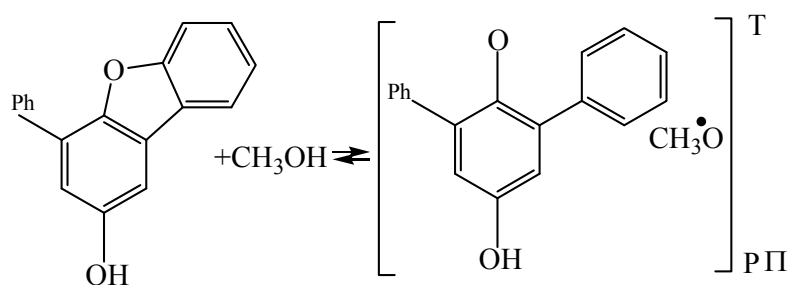


Рис. 3. Спектр ПМР (ФДФ) в ацетонитриле с добавлением 20 % метанола (по объему) в слабом поле: а – темновой спектр; б – при освещении светом

При концентрации спирта (20 % по объему) поляризация протонов достигала максимального значения с коэффициентом поляризации 700–750 и после переходного периода (15–20 с) величина сигнала оставалась постоянной и продолжалась на одном уровне в течение многих часов, с квантовым выходом до 30 % (т. е. имело место постоянное радиочастотное излу-

чение в процессе обратимой фотохимической реакции). После выключения света поляризация протонов на исходном (ФДФ) исчезала.

Можно предложить следующие механизмы стационарной поляризации протонов сигналом испускания:



При добавлении в реакционную смесь метанола, последний образует водородные связи с (ФДФ), на что указывают изменения химических сдвигов гидроксильных групп. При фотовозбуждении возникает радикальная пара в триплетном состоянии, затем в результате триплет-синглетного перехода, в клетке растворителя, мета протоны поляризуются отрицательно и приносят эту поляризацию в обратимой реакции на исходный продукт (ФДФ).

Параллельно возможен процесс, при котором происходит внутримолекулярный перенос электрона с атома кислорода в кольцо фурана, образуя ион-бирадикальное состояние; спирт стабилизирует это состояние, и в ходе дезактивации бирадикального состояния возникают процессы поляризации ядер (т. е. в чисто физи-

ческом процессе спинзависимых триплет-синглетных переходов). Как мы отмечали, интенсивность эффектов ХПЯ не меняется при многочасовом облучении реакционной смеси. Генерация происходит в поле $2,0 \cdot 10^6$ А/м с частотой излучения 100 МГц, при этом ширина линий излучения составляет 0,1–0,3 Гц.

Наблюдаемый эффект является одним из редких примеров стационарного радиоизлучения при фотореакции с химической накачкой, что имеет практические приложения при создании мишеней с ориентируемыми ядрами, а поскольку данная реакция образует продукты с отрицательно поляризованными ядрами, решается техническая задача ядерной намагниченности в промышленных магнитометрах.

ИЗМЕРИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ВОПРОСЫ МЕТРОЛОГИИ

УДК 658.562

Ю. П. Муха, В. А. Секачёв

АЛГОРИТМ ДЛЯ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ПРОГРАММНОГО КОДА НА ЯЗЫКЕ ВЫСОКОГО УРОВНЯ В ГРАФ-СХЕМУ

Волгоградский государственный технический университет

В статье рассматривается алгоритм, на основании которого возможна реализация программных модулей преобразователей текста программных процедур или функций, описывающих как вычислительные, так и любые другие процессы преобразования в граф-схемы. Показан пример применения для Object Pascal.

In article is considered algorithm, on the grounds of which possible realization of the programme modules of the converters of the text of the programme procedures or function, describing as computing, so and any other processes of the transformation in column-schemes. Example of the using is shown for Object Pascal.

Постановка задачи

Структурное проектирование сложных информационно-измерительных систем (ИИС) включает в себя процесс описания преобразования и передачи информационных потоков в виде электрических сигналов от преобразователя к преобразователю, которые также могут быть разложены как подсистемы [5].

Применение автоматизированного подхода к проектированию сложных ИИС подразумевает формализацию и описание объекта проектирования. Для описания и наглядного представления этих процессов может применяться граф-схема и описание в виде специального языка. В процессе проектирования необходимо переходить от языкового представления (семантической формы) к граф-схеме, и наоборот (часто эти формы представления взаимосвязаны).

Для перехода от семантической к графической формам представления необходим алгоритм, который бы производил синтаксический анализ текста путем выделения преобразовательных блоков и построения по ним фрагментов граф-схем. Подобный алгоритм может применяться и при визуализации текстов программных кодов на известных языках высокого уровня. Для демонстрации работоспособности данного алгоритма была создана программа по построению граф-схем процедур и функций, написанных на языке Object Pascal.

И при проектировании структур сложных ИИС, и при графической визуализации программных процедур и функций, ввиду большого объема и сложности обрабатываемых данных, целесообразно использование средств компьютерной техники. В настоящее время при реализации программных средств специализированного назначения (к которым относятся и программные средства типа «функциональный оптимизатор структур измерительных систем», например [6, 7]) до 75 % времени уходит на отладку. В процессе отладки происходит изменение порядка следования операторов, добавление новых, удаление ненужных и т. д. Зачастую бывает так, что когда программная функция начнет функционировать по заданному сценарию, ее алгоритм претерпевает значительные изменения. При оформлении программной документации приходится учитывать окончательный (рабочий) вариант. В ряде случаев, при оформлении программной документации, связанной с разработкой отдельных процедур или функций при разработке какой-либо ПС, когда разработана какая-либо сложная процедура или функция на языке высокого уровня, возникает проблема ее представления в графическом виде.

Теоретическое описание проблемы

Пусть имеется функция F , содержащая в себе определенную последовательность символьных переменных (строки), объединенных разде-

лителями. Можно записать:

$F(\langle fz \rangle, -r-, \langle fop \rangle, -r-, \langle stl \rangle, -r-, \dots, -r-, \langle stn \rangle)$,

где $\langle fz \rangle$ – строка заголовка, она озаглавливает процедуру или функцию в любом языке высокого уровня; $-r-$ – разделитель (символ конца строки, знак препинания и др.); $\langle fop \rangle$ – строка описания переменных; $\langle stl \rangle, -r-, \dots, -r-, \langle stn \rangle$ – строки операторов языка высокого уровня.

Для преобразования набора строк процедуры или функции в граф, где имена вершин – символьные операторы процедуры или функции необходимо учитывать, что существуют три разновидности организации вычислительных процессов – следование, ветвление и цикл. В любом языке высокого уровня имеются операторы, основанные на следовании, ветвлении и цикле. Можно предположить, что построение направленной граф-схемы состоит в выделении в определенной последовательности этих операторов, построении по ним фрагментов структур и объединении этих структур в общую граф-схему.

Построение алгоритма и его программная реализация

Важно определить, как производить анализ текста исходной программы для построения структуры определенной процедуры или функции и в какой последовательности это программно реализовать. Рабочий процесс кратко можно описать так: запускается окно программы, пользователь выбирает файл с текстом процедур и функций, далее в окне отображается список, состоящий из заголовков процедур и функций. Пользователь может выбрать одну и; нажав клавишу «Преобразовать в граф...»; получить граф алгоритма, который можно редактировать, а потом – сохранить в emf или bmp форматах. Главное окно будет иметь вид:

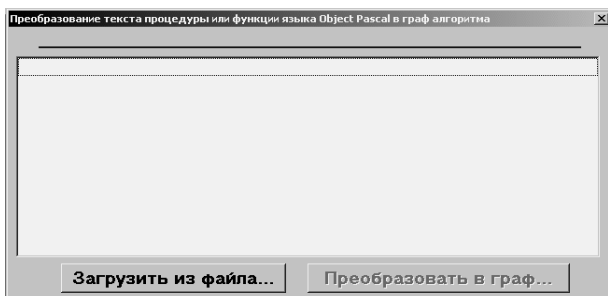


Рис. 1. Главное окно преобразователя при входе в программу

После загрузки файла список заполняется заголовками процедур и функций. Заполнение происходит при последовательном считывании строк файла и выполнении условия, при котором считываемая строка начинается на ключевое слово «procedure» или «function» (для языка Object Pascal).

При выборе заголовка процедуры или функции, которую надо преобразовать к виду алгоритма графа, происходит последовательное считывание строк текстового файла до совпадения с заголовком, после этого – формирование длинной строки из операторов, входящих в данную процедуру или функцию. Далее происходит удаление ненужных пробелов и вставка новых в соответствии с синтаксисом выбранного языка. Удаляются комментарии. Операторные скобки («begin» и «end») заменяются на «?» и «!», соответственно, для уменьшения длины строки. Преобразуются логические выражения. Там, где должен быть пробел для лучшей читаемости, он заменяется символом подчеркивания. Ключевые слова обязательно разделяются пробелами. Далее выполняется следующий алгоритм:

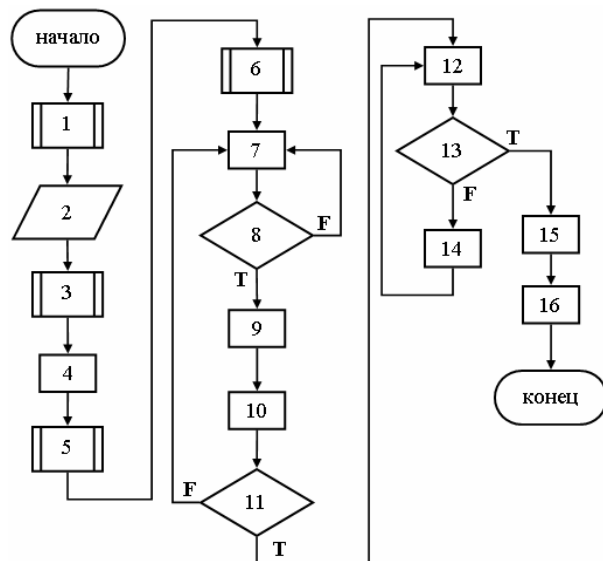


Рис. 2. Обобщенная структурная схема алгоритма для преобразования текста процедуры или функции в граф алгоритма в виде блок-схемы

На рис. 2 числами обозначены:

- 1 – загрузка файла с текстом процедур и функций для преобразования;
- 2 – выбор процедуры или функции для преобразования по заголовку;
- 3 – преобразование выбранной процедуры или функции в строку;

4 – удаление лишних пробелов в соответствии с синтаксисом применяемого ЯВУ;

5 – преобразование в строковый массив. Разделителями являются символы «;» и « »;

6 – корректировка каждого элемента массива (замена пробелов подчеркиванием);

7 – выделение фрагмента оператора (следования – циклов – ветвления), формирование на их основе структур графов;

8 – фрагмент выделен ?

9 – замена в массиве процедуры или функции выбранного оператора строкой замены и занесение этой строки в контрольный массив;

10 – занесение полученного фрагмента структуры в виде модифицированной матрицы инцидентности в массив под тем же индексом, что и строка замены;

11 – массив строки процедуры или функции состоит только из строк замены ?

12 – формирование структуры путем наращивания фрагментов (добавление в конец массива вместо строк замены по аналогичному индексу фрагмент структуры), просматривая массив, полученный из строки операторов (строка замены заменяется пустым символом);

13 – все символы в контрольном массиве пустые?

14 – продолжение формирования структуры путем врезки фрагментов (вместо записей, содержащих строки замены по аналогичному индексу фрагмента структуры), просматривая массив, полученный из строки операторов (строка замены заменяется пустым символом);

15 – назначение массиву записей полученной структуры координат, для наглядного отображения графа алгоритма;

16 – удаление вспомогательных соединительных вершин и линий (путем замены вершины с одним входом и одним выходом одной соединительной линией).

Алгоритм реализован средствами системы Delphi 5 на языке Object Pascal.

При реализации алгоритма, отображенного на рис. 2 для других языков высокого уровня, или даже низкого (Ассемблера), необходимо учитывать особенности синтаксиса этих языков. Сама последовательность действий при преобразовании остается прежней:

1) указание файла с текстом процедур или функций;

2) выбор определенной процедуры или функции;

3) запись выбранной процедуры или функции в виде длинной строки;

4) корректировка в соответствии с синтаксисом выбранного языка программирования;

5) преобразование в строковый массив;

6) выделение операторов и операндов (выражений), а также ключевых слов;

7) построение по ним фрагментов структур;

8) объединение структур, соответствующих выделенным операторам;

9) привязка и вставка их к определенным входам/выходам для сложных процедур;

10) удаление вспомогательных вершин и соединительных линий;

11) назначение координат вершинам графа для более наглядного отображения.

Иллюстрация работы алгоритма

Для иллюстрации работы рассмотрим следующий пример. Пусть имеется программный модуль m1.pas, который содержит в себе процедуры и функции для работы с направленными графами в программном модуле для оценки отклонений информационно-измерительных систем (ИИС) [3, 7]. После его загрузки в окно преобразователя получим следующее:

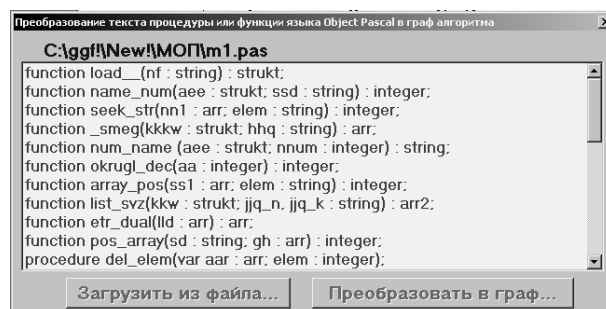


Рис. 3. Вид окна преобразователя при загруженном файле

Виден список всех процедур и функций, содержащихся в файле m1.pas. Для выбора процедуры или функции, граф блок-схемы которой надо построить, необходимо навести курсор мыши и щелкнуть по кнопке «Преобразовать в граф...». Пусть для преобразования в граф блок-схемы алгоритма выбрана функция **_smeg**, предназначенная для того, чтобы в направленном графе структуры kkkw, имеющем тип strukt, по имени вершины hhq, определить список смежных с ней вершин и вернуть его в одномерном строковом массиве типа arr (рис. 4).

При преобразовании в граф блок-схемы происходит автоматическая нумерация операторов по мере их выделения из строкового массива процедуры или функции. Поэтому нуме-

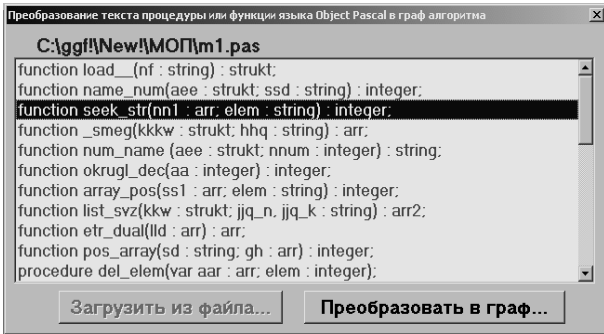


Рис. 4. Выбранная программная функция для преобразования

рация операторов может отличаться от порядковой. Проиллюстрируем работу этого алгоритма на конкретной программной функции.

Пусть выбрана функция

function seek_str(nn1 : arr; elem : string) : arr;
 Ее текст на Object Pascal имеет вид:

// Функция поиска строки в динамическом массиве.

// В случае удачи возвращает истину.

```
function seek_str(nn1 : arr; elem : string) : integer;
var i : integer;
begin
    seek_str := 0;
    for i:=1 to length(nn1) do
        if nn1[i-1] = elem then
            begin
                seek_str := i;
                break;
            end;
    end;
```

Для того, чтобы можно было выбрать процедуру или функцию для преобразования в граф-схему, в строковый динамический массив сперва загружается весь файл (для нашего случая – m1.pas); при этом разделение осуществляется по ключевым словам **«procedure»** или **«function»**. Не включаются комментарии (строки, расположенные между символами «{» и «}», «/*» и «*/»), и после «//»), строка **«end.»**. Выбор необходимой функции для преобразования осуществляется указанием конкретной строки, по которой осуществляется поиск и выбор нужной процедуры или функции.

После преобразования текста в строку, замены **«begin»** на «?», **«end;»** и **«end »** на «!» (для уменьшения длины строки), удаления комментариев, замены строки **«not»** на **«##»** (для исключения путаницы при выделении строк с логическими операторами), она будет иметь вид:

```
«function seek_str(nn1 : arr; elem : string) : integer; ? seek_str := 0; for i:=1 to length(nn1) do if nn1[i-1] = elem then ? seek_str := i; break; !!».
```

Удалив из этой строки лишние пробелы, принимая в качестве разделителей символы « » и «;», ее можно преобразовать в массив, который будет иметь вид:

```
('function', 'seek_str(nn1:arr', ', 'elem:string): integer', ', ' '?', 'seek_str:=0', ', ' 'for', 'i:=1', 'to', 'length(nn1)', 'do', 'if', 'nn1[i-1]=elem', 'then', '!', 'seek_str:=i', ', ' 'break', ', ' '!', '!').
```

Можно видеть, что он содержит пустые элементы и нарушенный синтаксис операторов. Для этого вызываются процедуры корректировки этого массива. Корректировка осуществляется с той целью, чтобы между двумя заданными элементами массива остался один единственный элемент. В случае для Object Pascal используются пары элементов **«function»** и **«?»**, **«procedure»** и **«?»**, **«if»** и **«then»**, **«for»** и **«do»**, **«while»** и **«do»**, **«case»** и **«of»**, **«with»** и **«do»**. После этого из массива удаляются пустые места. Далее, из массива функции удаляются не имеющие смысла для построения граф-схемы ключевые слова, например, **«then»**, **«do»**, **«of»**.

После этих преобразований массив имеет вид:

```
('?', 'seek_str:=0', 'for', 'i:=1_to_length(nn1)', 'if', 'nn1[i-1]=elem', '?', 'seek_str:=i', 'break', '!', '!').
```

Далее выполняется разделение условий диапазонов. В случае, если не присутствует оператор **«case»**, массив остается без изменений, как и в случае любой корректировки.

Удаляется первый и последний элемент массива. Как правило, это строки «?» и «!».

Начинается формирование модифицированной матрицы инцидентности [2, 4] для будущей структуры. Добавляется вершина с именем **«НАЧАЛО»**, соединенная с исходящей связью с вершиной **«iii0»**, обозначающей информационный выход некоторого блока и порядковый номер (в данном случае 0). Все информационные конструкции, представленные в виде модифицированной матрицы инцидентности, кроме содержащей вершины **«НАЧАЛО»** и **«КОНЕЦ»**, содержат в себе вспомогательные вершины **«vvvn»** и **«iiin»**, предназначенные для объединения путем замены вершин **«vvvn»** и **«iiin»** одной связью, при сборе граф-схемы.

Выполняется выделение операторов с формированием динамического массива замены и динамического массива выделенных структур

операторов. Сперва выделяются простые операторы следования. После выделения в массив программной функции на место элементов, занимаемых тем или иным оператором, записывается строка замены (в нашем случае «zmn» с порядковым номером произведенной замены).

В нашем случае, после выделения операторов следования, массив исследуемой функции имеет вид: ('zmn1', 'for', 'i:=1_to_length(nn1)', 'if', 'nn1[i-1]=elem', '?', 'zmn2', 'zmn3', '!'). Операторы следования можно выделить всегда, так как это самый простой вид оператора. В матрице инцидентности, в форме которой представляется данный фрагмент, есть вершина (блок) этого оператора, вспомогательная вершина входа (vvn) и выхода (iin). Он не со-

держит вложенных операторов и его достаточно просто идентифицировать.

Далее выделяются операторы циклов («for», «while», «repeat»). Если какой-либо оператор выделить невозможно, он пропускается для того, чтобы было возможно к нему потом вернуться. Причиной невозможности выделения является наличие вложенных операторов. При этом массив анализируемой процедуры или функции остается без изменений.

В последнюю очередь выделяются операторы развилки и переключатели. Для примера, в массиве анализируемой функции имеется сокращенный оператор развилки. Выделенный образец в виде матрицы инцидентности будет иметь вид:

```
('vvn4', 'DR', (5, 5), "", (-1, 0, 0, 0, 0, 0)),
('if1', 'UL', (5, 5), 'nn1[i-1]=elem', (1, 0, -1, 0, 0, -1)),
('sv_i4', 'DR', (5, 5), 'sv_i4', (0, -1, 0, 0, 1, 1)),
('zmn3', 'R', (5, 5), 'zmn3', (0, 0, 0, 1, -1, 0)),
('zmn2', 'R', (5, 5), 'zmn2', (0, 0, 1, -1, 0, 0)),
('iii4', 'DR', (5, 5), "", (0, 1, 0, 0, 0, 0)))
```

а сам массив анализируемой функции – ('zmn1', 'for', 'i:=1_to_length(nn1)', 'zmn4'). Как видно из этого массива, осталось выделить лишь один оператор цикла. Выделение закан-

чивается тогда, когда массив анализируемой функции будет состоять из нумерованных строк замены. После выделения оператора цикла «for», имеющего вид:

```
('vvn5', 'DR', (5, 5), "", (-1, 0, 0, 0, 0, 0)),
('for1', 'UL', (5, 5), 'i:=1_to_length(nn1)', (1, -2, 0, -1, 1)),
('sv_f5', 'DR', (5, 5), 'sv_f5', (0, 2, -1, 0, 0, 0)),
('zmn4', 'R', (5, 5), 'zmn4', (0, 0, 0, 1, -1, 0)),
('iii5', 'DR', (5, 5), "", (0, 0, 1, 0, 0, 0)))
он будет выглядеть как: ('zmn1', 'zmn5').
```

Начинается процесс восстановления. Про-сматривается массив анализируемой процедуры или функции, и в формат данных [4], описывающих граф-схему, добавляются образцы структур из массива выделенных структур. Индекс необходимого элемента равен индексу идентификатора строки замены, который опре-

деляется по элементу массива анализируемой процедуры или функции. Очередной фрагмент добавляется в конец структуры, описывающей будущую граф-схему; при этом вершина iii структуры связывается с вершиной vvn добавляемой структуры (от iii к vvn).

Для нашей функции можно записать:

```
('НАЧАЛО', 'U', (5, 5), 'НАЧАЛО', (-1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)),
('iii0', 'DR', (5, 5), "", (1, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)),
('vvn1', 'DR', (5, 5), "", (0, -1, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)),
('#1_seek_str:=0', 'R', (5, 5), 'seek_str:=0', (0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)),
('iii1', 'DR', (5, 5), "", (0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1, 0)),
('vvn5', 'DR', (5, 5), "", (0, 0, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 1)),
('for1', 'UL', (5, 5), 'i:=1_to_length(nn1)', (0, 0, 0, 0, 1, -2, 0, -1, 1, 0, 0)),
('sv_f5', 'DR', (5, 5), 'sv_f5', (0, 0, 0, 0, 0, 2, -1, 0, 0, 0, 0)),
('zmn4', 'R', (5, 5), 'zmn4', (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 0, 0)),
('iii5', 'DR', (5, 5), "", (0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0)))
```

Вершины с именем замены также заменяются структурами, только они вставляются вместо замещаемой вершины с сохранением входящих/исходящих связей. Добавляется вершина с именем «КОНЕЦ», соединенная входящей связью с вершиной «vvv0», обозначающей информационный вход некоторого блока и порядковый номер.

В окончательной версии структуры вершины, начинающиеся на «iii» и «vvv» замещаются связью для всей граф-схемы. Для более наглядного отображения каждой записи массива граф-схемы назначаются координаты по принципу расслоения от начала к концу.

После этого полученная структура данных отображается в наглядном представлении в редакторе графов [4, 6], где и можно ее редактировать. Граф-схема для функции **function seek_str(nn1 : arr; elem : string) : arr;** после редактирования будет иметь вид:

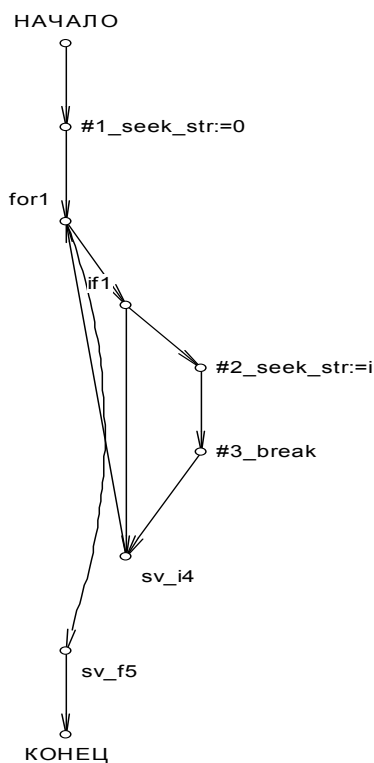


Рис. 5. Результат работы алгоритма по преобразованию функции в граф-схему

В графах блок-схем приняты следующие обозначения:

НАЧАЛО – имя вершины начала процедуры или функции;

КОНЕЦ – имя вершины конца процедуры или функции;

#<цел. число>_<строка> – имя оператора следования;

<строка1><цел. число> – имя операторов развилки или цикла;

sv_<строка1><цел. число> – имя вершины завершения оператора развилки или цикла.

Выводы:

1. Построение графа блок-схемы произвольной программной функции с использованием программной реализации данного алгоритма дало результаты, сходные с результатами при построении блок-схемы по существующим стандартам за исключением того, что в стандартных блок-схемах вершины – геометрические фигуры, выполненные по тому или иному стандарту.

2. Ребра графа, отождествляемые с информационными потоками, полностью совпадают со связями блок-схемы, построенной вручную.

3. Предложенный порядок выделения операторов (от простого – к сложному) является оптимальным.

4. Предложенный алгоритм может быть реализован и для других языков программирования, с учетом специфики их синтаксиса, причем язык реализации программы на основе предложенного алгоритма может быть любым, поддерживающим реализацию функций графических примитивов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Муха, Ю. П. Алгебраическая теория синтеза сложных систем / Ю. П. Муха, О. А. Авдюк, И. Ю. Королёва; ВолгГТУ. – Волгоград, 2003. – 320 с.
2. Новиков, Ф. А. Дискретная математика для программистов / Ф. А. Новиков. – СПб.: Питер, 2001. – 304 с.
3. Муха, Ю. П. Общая оценка погрешности медицинской измерительной системы на этапе создания ее структуры / Ю. П. Муха, В. А. Секачëв // Биомедицинские технологии и радиоэлектроника. – 2006. – № 4. – С. 47–53.
4. Секачëв, В. А. Специализированный программный пакет для автоматизации проектирования измерительных систем / В. А. Секачëв // Биомедицинские технологии и радиоэлектроника. – 2003. – № 6. – С. 59–61.
5. Секачëв, В. А. Структурно-иерархический метод на графах для проектирования информационно-измерительных систем / В. А. Секачëв // Вопросы физической метрологии. Вестн. Поволж. отд. Метрол. акад. России. – 2005. – № 2. – С. 3–12.
6. Функциональный оптимизатор структур измерительных систем : свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. ВНИИЦ № 2007613295 Российская Федерация / Ю. П. Муха, В. А. Секачëв; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 03.08.2007.
7. Модуль для оценки отклонений структур измерительных систем : свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. ВНИИЦ № 2007613259 Российская Федерация / Ю. П. Муха, В. А. Секачëв; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 03.08.2007

УДК 621.383(075.8)

*А. Н. Шилин, И. А. Коптелова, М. В. Гиркин***ИСПОЛЬЗОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ СОВМЕСТИМОСТИ ЭЛЕМЕНТОВ В МЕТОДИКЕ
МОРФОЛОГИЧЕСКОГО СИНТЕЗА ОПТИКО-ЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРОВ****Волгоградский государственный технический университет**

Статья посвящена проектированию оптоэлектронных приборов с помощью морфологического синтеза. Рассматривается применение спектрального коэффициента полезного действия для сокращения вариантов перебора, предлагается способ вычисления спектрального КПД оптоэлектронной системы с помощью нечетких множеств, описывается алгоритм вычисления для случая представления нечетких множеств трапецеидальными функциями принадлежности.

This article is devoted to the design of optoelectronic devices using morphological synthesis. This article discusses the use of spectral efficiency to reduce the options over, it is proposed method of calculating spectral efficiency of optoelectronic system using fuzzy sets, describes an computing algorithm for the case of fuzzy sets implemented by trapezoid supply functions.

**Проблема отсеечения вариантов технических
решений в морфологическом синтезе**

При морфологическом синтезе технических устройств в результате перебора всех возможных комбинаций элементов генерируется очень большое количество вариантов решений [1]. Основной проблемой морфологического синтеза является обоснованное отсеечение «нежизнеспособных» вариантов технических решений и выбор решений с наилучшими техническими характеристиками. Обычно отсеечение и выбор вариантов выполняется по критериям важности. Если возникает необходимость расстановки приоритетов важности, то используется метод парных сравнений [2] с привлечением экспертов-специалистов. В источнике [1] приведен пример синтеза оптоэлектронных приборов (ОЭП). Однако в данном примере не была использована особенность этих приборов, а именно, не учитывались уравнения спектральной совместимости основных элементов: источника, среды и приемника. При несоблюдении условий совместимости основных элементов оптоэлектронный прибор не является работоспособным. Поэтому условие совместимости должно быть первым и основным критерием важности.

Методику использования уравнений совместимости в морфологическом синтезе рассмотрим на примере проектирования оптоэлектронного прибора для контроля размеров нагретых деталей [2]. Источником информационного сигнала измерительного прибора является нагретое изделие.

Уравнения преобразования сигналов в ОЭП

Из технологического процесса формообразования деталей следует, что рабочий диапазон температур деталей от 600 до 1000 °С. Зависимость функции спектральной плотности энергетической светимости абсолютно черного тела подчиняется закону Планка [3]:

$$M_{\lambda}^{\circ}(\lambda, \Theta) = c_1 \lambda^{-5} (\exp(c_2 / (\lambda \Theta)) - 1)^{-1}, \quad (1)$$

где $c_1 = 2\pi hc^2$; $c_2 = hc/k$; $h = 6,625 \cdot 10^{-34}$ Дж/с – постоянная Планка; $c = 2,98 \cdot 10^{10}$ см/с – скорость света в вакууме; $k = 1,3805 \cdot 10^{-23}$ Дж/град – постоянная Больцмана; $c_1 = 3,74 \cdot 10^{-12}$ Вт·см²; $c_2 = 1,438 \cdot 10^4$ мкм·град.

Функция $M_{\lambda}^{\circ}(\lambda, \Theta)$ достигает своего максимального значения при длине волны λ_m , которая связана с температурой излучающей поверхности выражением закона смещения Вина [3]

$$\lambda_m \Theta = B = 2896 \text{ мкм} \cdot \text{град}. \quad (2)$$

Длины волн, соответствующие максимальным значениям функций для температур $\Theta_1 = 873$ К; $\Theta_2 = 1273$ К, имеют значения:

$$\begin{aligned} \lambda_{1m} &= 2896 / \Theta_1 = 3,32 \text{ мкм}; \\ \lambda_{2m} &= 2896 / \Theta_2 = 2,28 \text{ мкм}. \end{aligned} \quad (3)$$

Практически весь спектр излучения нагретого изделия при некоторой температуре находится в диапазоне от $0,5 \lambda_{2m}$ до $3 \lambda_{1m}$. На основании этого определяется спектральный диапазон измерительного преобразователя

$$\begin{aligned} \lambda_{\min} &= 0,5 \lambda_{2m} = 1,14 \text{ мкм}; \\ \lambda_{\max} &= 3 \lambda_{1m} = 9,96 \text{ мкм}. \end{aligned} \quad (4)$$

Функции спектральной плотности энергетической светимости позволяют определить

динамический диапазон системы при изменении температуры от Θ_1 до Θ_2 .

Все соотношения, представленные выше, справедливы для абсолютно черных тел. Выражение закона Планка для реального излучателя имеет следующий вид:

$$M_\lambda(\lambda, \Theta) = \varepsilon(\lambda, \Theta)M_\lambda^0(\lambda, \Theta). \quad (5)$$

Коэффициент излучения $\varepsilon(\lambda, \Theta)$ зависит от материала, температуры, состояния излучающей поверхности и степени ее окисления [3]. Однако у деталей с шероховатыми поверхностями коэффициент излучения не зависит от длины волны. Такие излучающие тела являются серыми.

Величина потока излучения, поступающего на вход фотоприемника, определяется выражением [4]

$$\Phi = \frac{q}{4} \left(\frac{D_{\text{вх}}}{f} \right)^2 \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \varepsilon(\lambda, \Theta) \tau(\lambda) M_\lambda^0(\lambda, \Theta) d\lambda, \quad (6)$$

где q – площадь щелевой диафрагмы; $D_{\text{вх}}$ – диаметр входного зрачка; f – фокусное расстояние объектива; $\tau(\lambda)$ – коэффициент пропускания оптики; $M_\lambda^0(\lambda, \Theta)$ – спектральная плотность энергетической светимости изделия.

Напряжение на выходе усилителя фототока вычисляется по формуле

$$U_\Phi = \frac{q}{4} \left(\frac{D_{\text{вх}}}{f} \right)^2 \frac{S_{\lambda, \text{max}} R_H R_i K_{\text{ус}}}{(R_H + R_i)} \times \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} s(\lambda) \varepsilon(\lambda, \Theta) \tau(\lambda) M_\lambda^0(\lambda, \Theta) d\lambda, \quad (7)$$

где R_i – внутреннее сопротивление фотоприемника; R_H – сопротивление нагрузки; $K_{\text{ус}}$ – коэффициент усиления усилителя фототока; $s(\lambda) = S_\lambda / S_{\lambda, \text{max}}$ – относительная спектральная чувствительность фотоприемника; S_λ – абсолютная спектральная чувствительность фотоприемника; $S_{\lambda, \text{max}}$ – максимальная спектральная чувствительность фотоприемника.

Абсолютная спектральная чувствительность фотоприемника S_λ зависит от материала чувствительного слоя и от отдельного экземпляра, а относительная спектральная чувствительность – только от материала, и эта характеристика является общей для большого количества фотоприемников [5]. Это обстоятельство значительно упрощает задачу отсеечения вариантов, поскольку выбираются или отсекаются не отдельные фотоприемники, а целые группы.

Спектральные коэффициенты $\varepsilon(\lambda, \Theta)$, $\tau(\lambda)$ и $s(\lambda)$ задаются в виде таблиц и графиков и по этой причине использовать аналитическое уравнение (7) в расчетах практически невозможно. Поэтому для вычисления напряжения (7) используются численные методы.

Уравнения спектральной совместимости элементов ОЭП

Критерии совместимости позволяют выбирать элементы с совместимыми характеристиками. В качестве основного критерия совместимости оптических элементов системы целесообразно использовать спектральный коэффициент полезного действия (КПД) χ преобразователя [6], определяющий какая часть из общего интегрального потока излучения может быть использована или преобразована

$$\chi = \frac{\int_0^\infty y(\lambda) \Phi_{e\lambda}(\lambda) d\lambda}{\int_0^\infty \Phi_{e\lambda}(\lambda) d\lambda} = \frac{\int_0^\infty y(\lambda) \varphi_{e\lambda}(\lambda) d\lambda}{\int_0^\infty \varphi_{e\lambda}(\lambda) d\lambda}, \quad (8)$$

где $\Phi_{e\lambda, \text{max}}$ – максимальная спектральная плотность входного потока излучения; $\Phi_{e\lambda}(\lambda)$ – спектральное распределение спектральной плотности входного потока излучения; $y(\lambda)$ – относительная спектральная характеристика пропускания или преобразования потока излучения элемента ОЭП; $\varphi_{e\lambda}(\lambda) = \Phi_{e\lambda}(\lambda) / \Phi_{e\lambda, \text{max}}$ – относительное распределение спектральной плотности входного потока излучения.

Этот критерий определяет работоспособность преобразователя, поскольку при значении $\chi = 0$ будет отсутствовать выходной сигнал при наличии входного оптического сигнала.

При вычислении выражения (6) спектральные характеристики оптических материалов, источников излучения и фотоприемников предварительно переводятся в электронный вид таблицы Excel. Затем дискретные значения спектральных характеристик аппроксимируются в аналитические зависимости с помощью MathCad.

Аналитический вид зависимости позволяет в численных методах расчета использовать практически любой шаг дискретизации. Наиболее трудоемкой операцией вычисления КПД χ является перевод графической информации в численную форму.

**Применение аппарата нечетких множеств
для определения
спектральных характеристик ОЭП**

Перспективным направлением разработки методов принятия решений при нечеткой исходной информации является лингвистический подход на базе теории нечетких множеств и лингвистической переменной. К настоящему времени в этом направлении получены конкретные практические и теоретические результаты. Основными вопросами, возникающими при разработке методов принятия решений при нечеткой исходной информации [7], являются следующие:

- построение функций принадлежности нечетких множеств;
- выполнение операций над нечеткими числами;

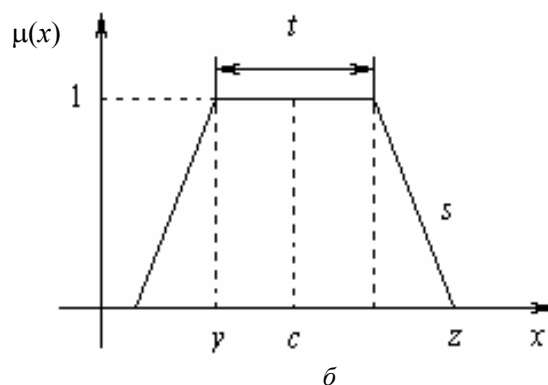
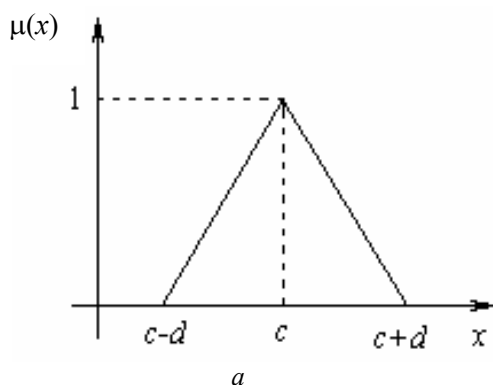


Рис. 1. Функции принадлежности:
а – треугольная; б – трапециевидальная

На нечетких множествах выполняются математические операции, которые являются обобщением аналогичных операций, выполняемых на «четких» множествах [7]. Основными из этих операций являются:

логическая сумма множеств $A \cup B$

$$\mu_{A \cup B}(x) = \mu_A(x) \cup \mu_B(x) = \max[A(x), B(x)]; \quad (10)$$

логическое произведение множеств $A \cap B$

$$\mu_{A \cap B}(x) = \mu_A(x) \cap \mu_B(x) = \min[A(x), B(x)]; \quad (11)$$

отрицание множества \bar{A}

$$\mu_{\bar{A}}(x) = 1 - \mu_A(x). \quad (12)$$

Все спектральные относительные характеристики определяются экспериментально, представлены в виде графиков и имеют сложную форму. Спектральные характеристики непостоянны и зависят от температуры, напряжения и других факторов. Таким образом, на графиках

– сравнение и упорядочение нечетких множеств и чисел.

Концептуальные и вычислительные особенности реализации перечисленных методов сильно отличаются от традиционных методов.

На практике, в основном, используется симметричная трапециевидальная функция принадлежности (рис. 1), которая описывается зависимостью

$$\mu_{A^{(i)}}(x_i) = \begin{cases} 0 & \text{для } x > z \text{ или } x < y \\ 1 & \text{для } c - \frac{t}{2} \leq x \leq c + \frac{t}{2} \\ s(z-x) & \text{для } c + \frac{t}{2} \leq x \leq z \\ s(z-y) & \text{для } y \leq x \leq c - \frac{t}{2} \end{cases} \quad (9)$$

представлены нечеткие функции в виде некоторых средних значений. Кроме того, из анализа большого числа спектральных характеристик элементов ОЭП следует, что практически все они могут быть аппроксимированы формой трапеции. Поэтому для описания спектральных характеристик были использованы данная форма и аппарат теории нечетких множеств, что позволило значительно сократить время перебора вариантов с учетом совместности элементов по оптическому коэффициенту полезного действия.

На рис. 2 представлены спектральные плотности потока излучения 1, оптического материала 2 и фотоприемника 3, и безразмерная спектральная характеристика потока излучения 4, которая может быть преобразована фотоприемником.

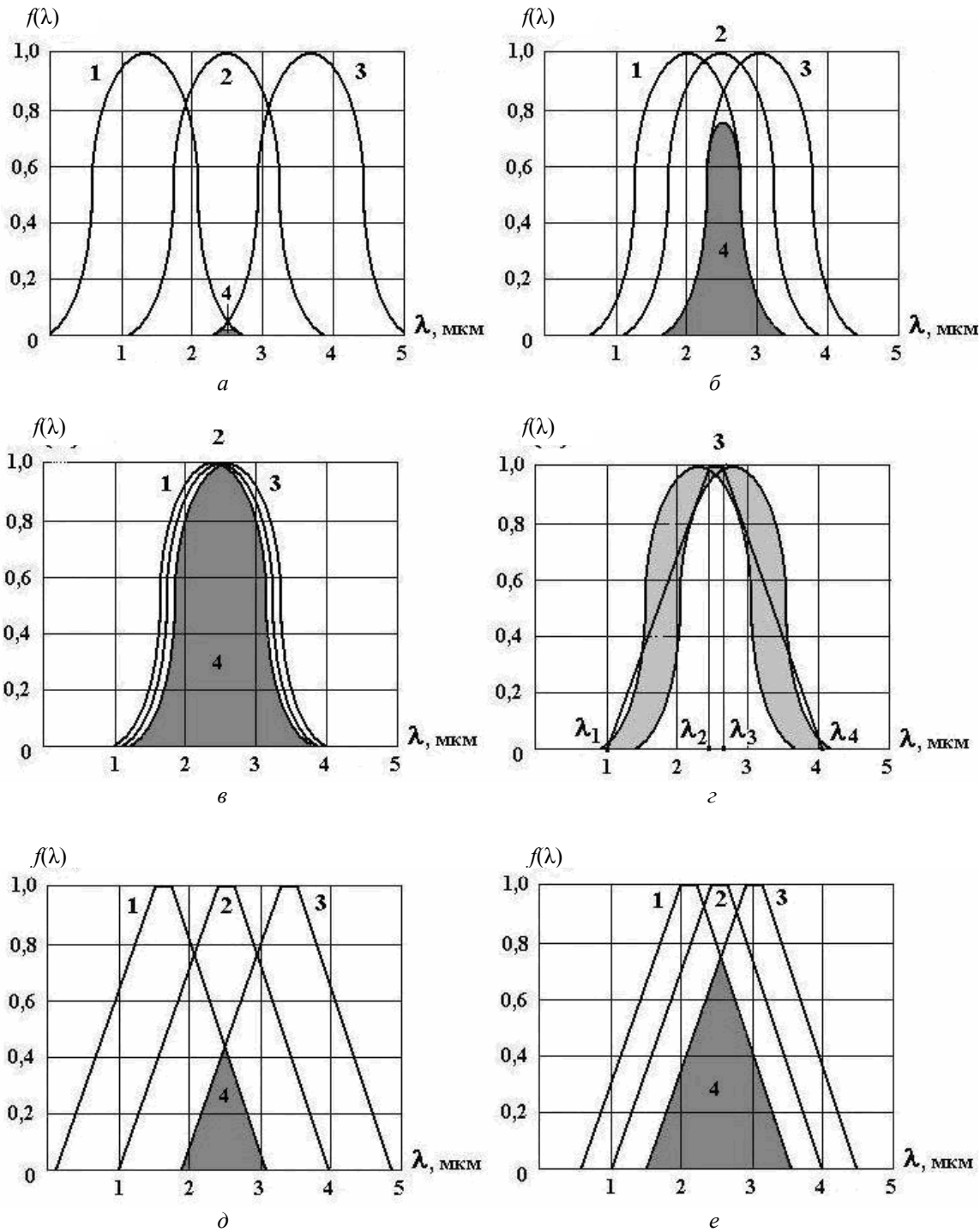


Рис. 2. Спектральные характеристики оптоэлектронного устройства:

a, б, в – варианты совместимости спектральных характеристик источника 1, оптического материала 2 и фотоприемника 3; *г* – аппроксимация спектральной характеристики фотоприемника с учетом нестабильности; *д, е* – варианты совместимости аппроксимированных спектральных характеристик

Отношение площадей под кривыми 4 и 1 – есть коэффициент полезного действия $\chi = S_4 / S_1$.

С помощью теории нечетких множеств площадь под кривой 4 (на рис. 2, *д* и *е*) определяется как логическое произведение множеств площадей под всеми трапецидальными харак-

теристиками. Этот способ вычисления использует всего несколько точек и поэтому позволяет повысить быстродействие вычислений. Вычисленные таким способом значения χ отличаются от вычисленных с помощью точной формулы значений, но на выбор варианта совмести-

мости эта погрешность не оказывает практического влияния. На основе этой методики была разработана программа вычисления коэффициента полезного действия χ .

Алгоритм вычисления χ

Поскольку исходными данными для вычисления χ являются трапециидальные описания нечетких множеств, то предварительно был разработан алгоритм определения площади пересечения двух и более трапеций. Для данной задачи существует значительное ограничение на трапеции, которое позволяет немного упростить алгоритм обработки – для всех трапеций одним из оснований является отрезок прямой, совпадающей с осью OX ; другим – отрезок, параллельный оси OX . Таким образом, у всех исходных трапеций основания параллельны оси OX .

При разработке алгоритма были введены некоторые определения. Опорной точкой названа та точка, которая является вершиной результирующего многоугольника, точками-кандидатами – те точки, которые являются вершинами исходных трапеций или точками пересечения отрезков, составляющих исходные трапеции. Поскольку в качестве вершин результирующего многоугольника могут выступать только точки-кандидаты, то множество точек-кандидатов C содержит множество опорных точек B ($B \subseteq C$). На первом шаге алгоритма определяется множество точек-кандидатов. Для этого, согласно приведенному выше определению, отыскиваются точки пересечения отрезков, составляющих исходные трапеции, а также дополняется множество точками, соответствующими вершинам исходных трапеций. На втором шаге алгоритма определяется множество опорных точек. Очевидно, что точка из множества C принадлежит множеству B тогда и только тогда, когда она принадлежит всем трем исходным трапециям одновременно. Таким образом, на выходе второго шага алгоритма определяется множество опорных точек.

Площадь произвольного многоугольника вычисляется по известной формуле:

$$S = \frac{1}{2} \left| \sum_{i=0}^{n-1} (x_i + x_{i+1})(y_i - y_{i+1}) \right|, \quad (13)$$

где (x_i, y_i) – координата i -й вершины в порядке обхода.

При этом считается, что $(x_0, y_0) = (x_n, y_n)$. Разработанный алгоритм может быть применен

для решения более сложных задач, так как не зависит от количества трапеций, и может использоваться для задач произвольной размерности. Следует учитывать, что вычислительная сложность алгоритма составляет $O(n^2)$, где n – число исходных трапеций. Также этот алгоритм может быть расширен для определения площади пересечения произвольно расположенных трапеций с основаниями, параллельными оси OX . На рис. 3 изображено окно программы для вычисления площадей.

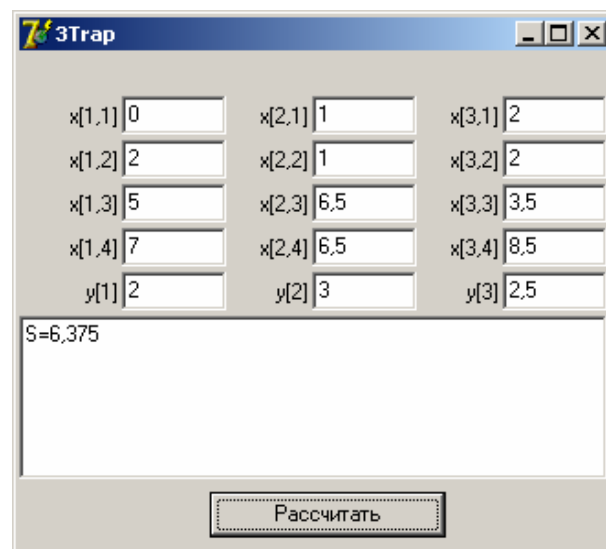


Рис. 3. Окно программы для вычисления площадей

Эта программа была использована при проектировании оптико-электронного прибора для контроля геометрических параметров крупногабаритных оболочек вращения при их формообразовании в нагретом состоянии.

Выводы. Использование аппарата нечетких множеств позволило значительно упростить операцию вычисления оптического КПД χ и принятие решений по отсечению «нежизнеспособных» вариантов оптоэлектронных датчиков, полученных при морфологическом синтезе.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Одрин, В. М.* Метод морфологического анализа технических систем / В. М. Одрин. – М.: ВНИИПИ, 1989. – 312 с.
2. *Шилин, А. Н.* Морфологический синтез оптико-электронных систем измерения размеров нагретых деталей / А. Н. Шилин, И. А. Шилина // Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика. – 2003. – № 3. – С. 51–61.
3. *Крискунов, Л. З.* Справочник по основам инфракрасной техники / Л. З. Крискунов. – М.: Советское радио, 1978. – 400 с.

4. Якушенков, Ю. Г. Теория и расчет оптико-электронных приборов / Ю. Г. Якушенков. – М.: Машиностроение, 1989. – 360 с.

5. Источники и приемники излучения / Г. Г. Ишанин [и др.]. – СПб.: Политехника, 1991. – 240 с.

6. Мирошников, М. М. Теоретические основы оптико-

электронных приборов / М. М. Мирошников. – Л.: Машиностроение, 1983. – 696 с.

7. Оссовский, С. Нейронные сети для обработки информации : перевод с польского / С. Оссовский. – М. : Финансы и статистика, 2004. – 344 с.

УДК 616.073

Д. Ю. Вопилов, Р. В. Литовкин, С. А. Русаков, В. С. Жалнина

АВТОМАТИЗАЦИЯ МОРФОЛОГИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ЭЛЕКТРОКАРДИОГРАФИЧЕСКОГО СИГНАЛА НА ОСНОВЕ ВЕЙВЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Волгоградский государственный технический университет

В данной работе рассматривается метод морфологического анализа электрокардиографического сигнала на основе вейвлет-анализа. Проанализированы особенности сигнала и сделан вывод о необходимости применения данного метода обработки сигнала. Разработан алгоритм пошагового поиска морфемы и фиксации ее числовых характеристик, на основе которого реализован программный продукт, позволяющий автоматизировать морфологический анализ и получить числовые характеристики морфем, что упростит процесс анализа и интерпретации кардиограммы при постановке диагноза.

In this paper the method of morphological analysis of electrocardiographic signal based on wavelet analysis is analyzed. We analyzed the features of the signal and found that it needs to apply this method of signal processing. We developed step-by-step algorithm of searching morpheme and locking its numerical characteristics. There was a software product based on the developed method which implemented to automate the analysis of morphological characteristics and obtain numerical morphemes that simplify the process of analyzing and interpreting the cardiogram at diagnosis.

Каждый сегмент электрокардиографического сигнала (ЭКГ) – морфема – несет в себе определенную информацию, поэтому морфологический анализ лежит в основе диагностики и анализа работы сердечно-сосудистой системы. При контурном анализе ЭКГ высокие частоты кардиосигнала не учитываются. Более того, при обработке кардиограммы высокочастотные составляющие обычно убирают при помощи фильтров. При этом теряется часть информации, зарегистрированная кардиографом. Высокие частоты кардиосигнала включают в себя аппаратные и физиологические шумы. В современных технических средствах аппаратные шумы практически незначительны по сравнению с физиологическими. По временным и амплитудным характеристикам пиков и интервалов можно определить наличие тех или иных заболеваний у исследуемого пациента.

Очевидно, что проблема качественного автоматизированного анализа и интерпретации ЭКГ сегодня очень актуальна. Потому цель данной работы заключалась в автоматизации морфологического анализа ЭКГ и получении амплитудных и временных соотношений, важных при диагностировании сердечно-сосудистых заболеваний. В ходе работы выполнено не-

посредственное выделение основных компонент в сигнале и получены числовые характеристики морфем.

Электрокардиограмма человека – сигнал, считываемый в результате распространения волны деполяризации и реполяризации по сердечной мышце. ЭКГ представляет собой некоторый сигнал, имеющий пять характерных пиков – *P*, *Q*, *R*, *S* и *T*. Обозначенные особенности (пики и интервалы) и являются стандартами описания ЭКГ человека. Традиционная электрокардиограмма анализируется по ее форме, длительности, ориентации, взаиморасположению зубцов и сегментов (морфем) [1].

Для анализа данных сигналов нужен метод, обеспечивающий хорошее разрешение по частоте и по времени. Первое требуется для локализации низкочастотных составляющих, второе – для разрешения компонентов высокой частоты.

В качестве такого метода избран метод вейвлет-преобразований. В этом случае нестационарный сигнал анализируется путем разложения по базисным функциям, полученным из некоторого прототипа за счет сжатий, растяжений и сдвигов. Разработка алгоритма для обнаружения *P*-пика, комплекса *QRS* и *T*-пика в

кардиограмме осложняется изменениями морфологии сигнала во времени, определенными физиологическими условиями и присутствием шума.

Основная проблема, возникающая при вейвлет-анализе кардиосигнала, заключается в выборе вейвлета и масштаба преобразования. Необходимо подобрать вейвлет, который позволит эффективно преобразовать сигнал и выделить нужные морфемы. Нет никакого абсолютного метода выбора того или иного вейвлета. Вейвлет Хаара имеет преимущество, поскольку прост в вычислении и легок в понимании. Вейвлет Добеши концептуально более сложен и имеет более высокие вычислительные затраты. Но анализ вейвлетом Добеши учитывает детали, которые упускаются вейвлетом Хаара. На рис. 1 представлены сигналы, преобразованные вейвлетом Добеши шестого порядка.

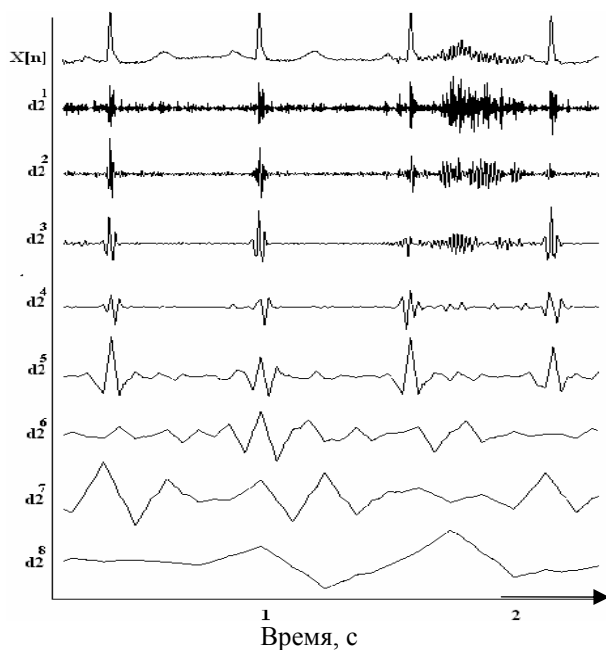


Рис. 1. Преобразование сигнала вейвлетом Добеши шестого порядка (D_6)

Оригинальный сигнал показан сверху рисунка. Ниже представлены сигналы, обработанные вейвлетами с различным масштабированием коэффициентом a . Преобразованные сигналы сильно напоминают оригинальный, но при этом явно выделяют интересные нас морфемы.

Большинство элементов сигнала разрешаются в масштабе 2^5 . Высоочастотные всплески шума фиксируются при наименьших масштабах, а именно, 2^2 и 2^1 . Использование Daubechies-

вейвлетов четвертого и пятого порядков (D_4 и D_5) позволяет вычислить функции при более крупных масштабах. D_6 , преобразовывающий комплекс QRS , больше схож с сигналом, чем D_4 , что видно из рисунка в масштабе 2^5 .

Очевидно, что использование вейвлета Добеши шестого порядка (D_6) дает лучшие результаты. Поэтому в данной работе применяется именно этот вейвлет.

Есть фактически четыре самостоятельных алгоритма, каждый из которых позволяет выделить определенные особенности ЭКГ (рис. 2).

R -морфема в сигнале имеет наибольшую амплитуду среди других пиков. Чтобы обнаружить пики, определенные детали сигнала были отброшены. Процедура обнаружения R -морфемы показана на рис. 3, b .

Элементы кардиосигнала 2^3 – 2^5 были сохранены, а все остальные детали удалены. Высокоамплитудные пики были легко обнаруживаемы в сигнале, даже если пики R искажены. Тогда фактически более низкий предел применен на удаление несвязанных шумовых пиков. Поскольку последующий удар произойдет не меньше, чем через 0,25 с, псевдоудары также удаляются. Обнаружение пиков R очень важно, потому что они определяют сердечный ритм, и точность из всех предстоящих обнаружений зависит от этого [2, 3].

Q - и S -морфемы находятся около R -пика через 0,1 с. Чтобы сделать пики примечательными, все детали сигнала были удалены до деталей 2^5 . Аппроксимированный сигнал, который получился, исследуется на экстремумы близ R -пика, который ранее был обнаружен. Слева зафиксированная точка экстремума обозначает пик Q и правая – пик S . Процедура выделения Q - и S -морфем показана на рис. 3, d .

Кардиограф должен зафиксировать нулевой уровень потенциала, соответствующий состоянию, когда по сердцу не течет ток. Однако в теле существуют электрические токи, возникающие из-за потенциалов кожи и от различий в ионных концентрациях в разных частях тела. Эти электрические токи не позволяют зафиксировать кардиографу так называемый нулевой уровень. В конце комплекса QRS ток внутри сердца не течет. Даже электрический ток смещения исчезает и потенциал электрокардиограммы нулевой. Этот элемент кардиограммы известен как J -морфема. Однако часто необходимо рассматривать в качестве информативной морфемы сегмент TP электрокардиограммы,

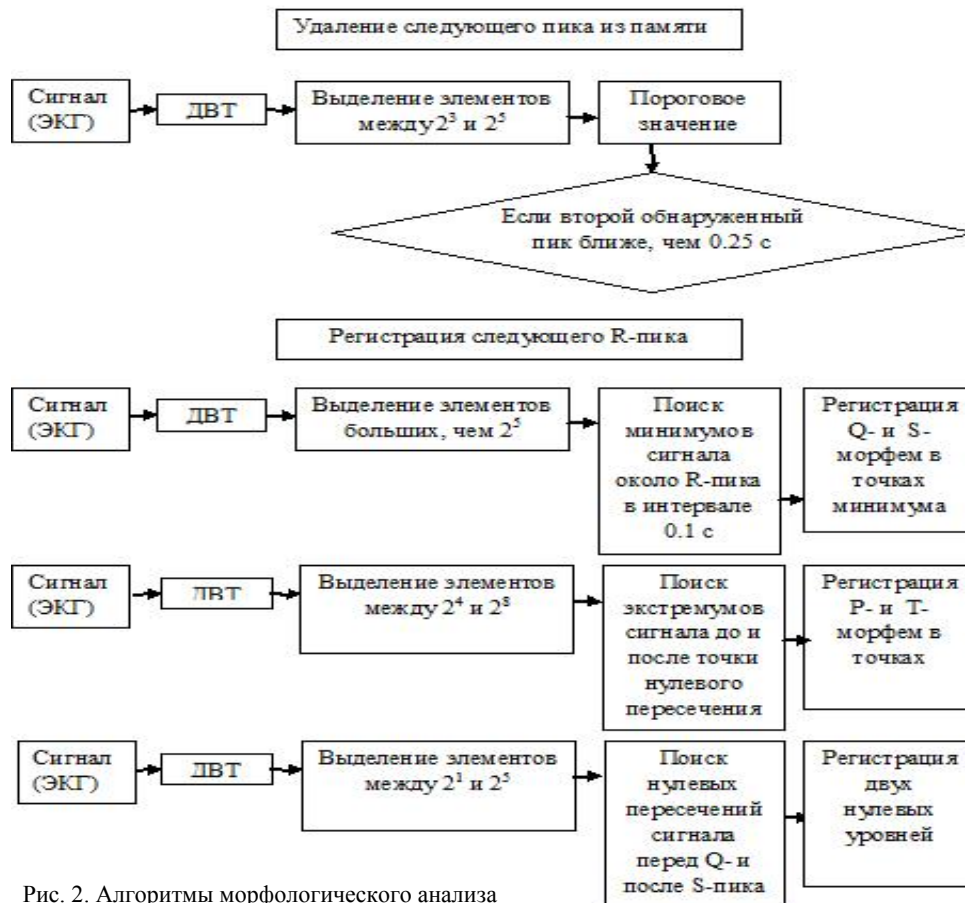


Рис. 2. Алгоритмы морфологического анализа

а не *J*-морфему, которую гораздо проще выделить. Экспериментально мы определили, что напряжение на этом уровне близко к нулевому пересечению и, сохраняя коэффициенты масштабирования 2^1-2^5 , перед пиком *Q* получаем другой нуль после пика *S*. Сравнение этих двух сегментов является основанием для того, чтобы обнаружить электрический ток смещения и *ST*-сегмент. Процедура выделения нулевого уровня показана на рис. 3, *с*.

P- и *T*-морфемы легче выделить при коэффициентах масштабирования 2^4-2^8 . На этих уровнях понижается частота и высокочастотные колебания сигнала удалены. Экстремумы сигнала до и после нулевого пересечения около каждого пика *R*, которые ранее обнаружены, обозначают пики *P* и *T*. Нулевые пересечения сигнала около пиков *P* и *T*, которые были обнаружены, – начало и погашение волн, соответственно. Процедура и алгоритм обнаружения *T*- и *P*-морфемы представлены на рис. 3, *е* [4].

Общая схема расшифровки кардиосигнала в кардиологии при постановке диагноза осуществляется поэтапно:

- а) анализ предсердного зубца *P*;

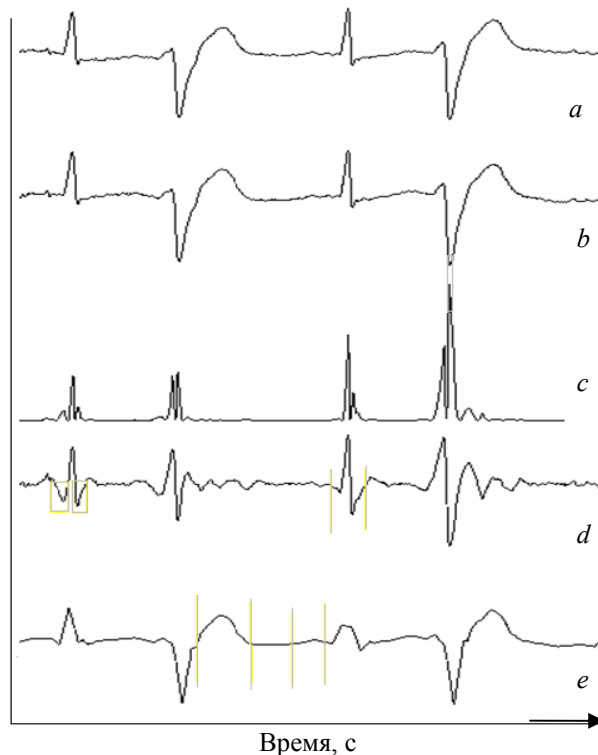


Рис. 3. Выделение морфем в кардиосигнале: *a* – исходный сигнал; *b* – обнаружение *R*-морфемы; *с* – обнаружение нулевого уровня; *d* – обнаружение *Q*- и *S*-морфем; *е* – обнаружение *P*- и *T*-морфем

б) анализ желудочкового комплекса $QRST$:

- 1) анализ комплекса QRS ;
- 2) анализ сегмента $RS-T$;
- 3) анализ зубца T ;
- 4) анализ интервала $Q-T$.

P - и T -морфемы легче выделить при коэффициентах масштабирования 2^4-2^8 . На этих уровнях понижается частота и высокочастотные колебания сигнала удалены. Экстремумы сигнала до и после нулевого пересечения около каждого пика R , которые ранее обнаружены, обозначают пики P и T . Нулевые пересечения

сигнала около пиков P и T представляют собой начало волны, либо ее полное затухание. Процедура и алгоритм обнаружения T - и P -морфемы представлены на рис. 3, е [5].

Приведенные выше исследования использованы при реализации процедуры автоматического определения характеристик морфем кардиосигнала. Для анализа берется одноканальная кардиограмма пациента, неидеальная, с определенными патологиями, изображенная на рис. 4.

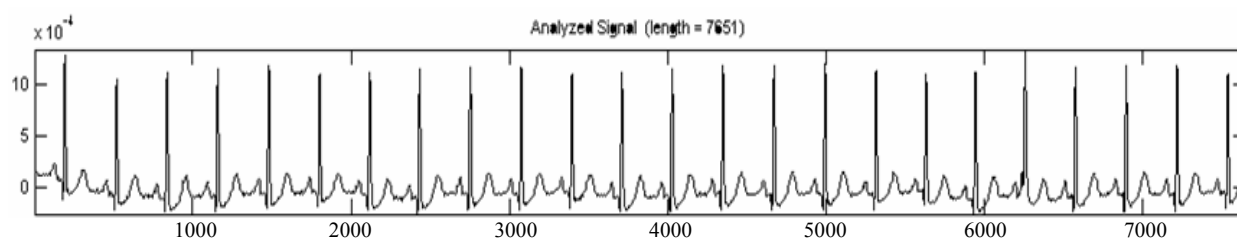


Рис. 4. Анализируемая электрокардиограмма

Затем используем вейвлет-преобразование, которое позволяет преобразовать сигнал, не смещая положения максимумов зубцов. Варьируя границы области масштабов, мы получили:

а) отсеечение посторонних шумов:

для этого произвели фильтрацию и усечение на масштабах выше некоторого уровня, который обычно легко выявить на спектре. Области скелета, соответствующие шумам, насыщены короткими искривленными линиями. Уровень отсеечения легко подбирается экспериментально;

б) восстановление изолинии:

это наиболее простая операция, не требующая никаких дополнительных манипуляций с фильтром. Восстановление изолинии является проявлением одного из свойств вейвлетов;

в) морфологический анализ:

подбором области масштабов преобразования можно добиться того, что комплекс QRS будет четко выделен на фоне значительно ослабленных остальных компонент сигнала ЭКГ.

В преобразованном сигнале с помощью программы выделяются морфемы и указываются их числовые характеристики.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Кавасма, Р. А. Автоматизированный анализ и обработка электрокардиографических сигналов. Методы и система : учеб. пособие для вузов / Р. А. Кавасма, А. А. Кузнецов, Л. Т. Сушкова ; под ред. Л. Т. Сушковой. – М.: Сайнс-пресс, 2006. – 144 с.
2. ECG feature extraction using Daubechies wavelets [Электронный ресурс]. – 2007. – Режим доступа : <http://shitov.com/sci/articles/ecg/r-index.djvu>.
3. T-Wave Detection Based on an Adjusted Wavelet Transform Modulus Maxima [Электронный ресурс] / International journal of Biomedical sciences volume 2006. – № 2. – р. 43. – Режим доступа : http://cm.bell-labs.com/wavelet/digest_05/digest_05.10.html.
4. Вычислительные системы и автоматическая диагностика заболеваний / под ред. Ц. Касереса и Л. Дрейфуса ; пер. с англ. канд. техн. наук Л. И. Титомира и канд. физ.-мат. наук В. В. Шакина. – М.: Мир, 1974. – 503 с.
5. Астафьева, Н. М. Вейвлет-анализ : основы теории и примеры применения / Н. М. Астафьева // Успехи физических наук. – 1996. – Т. 166. – № 11. – С. 1145–1170.

**ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЕ УСТРОЙСТВА В НАУКЕ,
ПРОМЫШЛЕННОСТИ, МЕДИЦИНЕ**

УДК 681.518.5:539.1.06

*Ю. В. Пастухов, О. П. Сидельникова***МЕТРОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЕРВИЧНЫХ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ
ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ, СОДЕРЖАЩИХ РАДИОНУКЛИДНУЮ МЕТКУ****ЗАО «Титан-Изотоп», ВолгГАСУ**

Рассмотрены содержащие радионуклидную метку образцы-свидетели (первичные измерительные преобразователи) для измерения коррозии в промышленности. Показано преобразование потока γ -квантов первичного преобразователя (образца-свидетеля) от его массы, радиоактивного распада радионуклида и взаимодействия γ -квантов с окружающей их средой. Чувствительность первичного преобразователя, его ресурс и погрешность выходной величины в значительной степени зависят от периода полураспада радионуклида, содержащегося в первичном преобразователе. Например, образцы-свидетели с радионуклидом Fe-59 (период полураспада – 45 дней) имеют ресурс менее 1 года, а при наличии в них радионуклида Co-60 (период полураспада – 5,27 года) позволяет проводить измерения коррозии около 10 лет. Приведены паразитные чувствительности, функционально не связанные с изменением массы образца-свидетеля.

Considered, containing a radionuklid mark, witness standard (primary measurings transformers) for measuring of corrosion in industry. Transformation of stream of quanta of primary transformer (witness standard) is rotined from his mass, radio-active disintegration of radionukleid and co-operation of quanta with a them environment. The sensitiveness of primary transformer, his resource and error of output size, largely depend on the period of half-decay of radionuklid contained in a primary transformer. For example, witness standard with radionuklid (period of half-decay -45 days) have a resource less than 1 year, and at presence of in them radionuklida (period of half-decay - 5,27 years) allows to conduct measurings of corrosion about 10 years. The parasite are resulted to the sensitiveness the functionally unconnected with a change masses of witness standard.

В настоящее время используются методы измерения коррозии с применением радионуклидной метки [1–4, 11–13]. В результате многолетних коррозионных испытаний в промышленных условиях, в химических и нефтеперерабатывающих технологических установках наработан положительный и перспективный экспериментальный материал [1, 5–7].

Измеренные скорости коррозии достигают высоких значений и доходят до 100 мм в год, превышая номинальные значения в сотни раз, сокращают ресурс оборудования и межремонтный пробег технологических установок. Отсутствие надежной и достоверной информации о коррозионной ситуации не позволяет оперативно принимать технологические, управленческие и технические решения для снижения скорости коррозии оборудования и предупреждения аварийных ситуаций, аварий и разрушающих воздействий на окружающую среду.

Физический износ трубопроводов и оборудования привел к росту числа аварийных разливов нефти, пик которых пришелся на начало 2000-х годов [8]. Доля аварий, произошедших из-за физического износа и коррозии металлов,

увеличилась на 60–70 %, а в ряде случаев являлась их единственной причиной. Ежегодно, из почти 500 млн т нефти, добываемой в России, в процессе транспортировки и хранения теряется 1,5–10 % [8].

В настоящее время разработаны датчики коррозии (образцы-свидетели в качестве первичных преобразователей), содержащие радионуклидную метку [9–14]. Они обладают определенной чувствительностью к измеряемому параметру (потерям массы образца-свидетеля, например, в результате его коррозии) и имеют свойственные им и применяемому методу погрешности. Известные и разработанные датчики и способы измерения коррозии принципиально отличаются от существующих радиоизотопных способов контроля других параметров, нуждаются в проведении анализа их специфики и метрологической оценке.

Чувствительность первичных измерительных преобразователей

Метрологические характеристики первичных преобразователей – чувствительность и погрешность – основные, и к ним предъявляются

высокие требования [15]. Образцы-свидетели для измерения коррозии, содержащие радионуклидную метку, не являются исключением.

Возможность осуществления измерения коррозии по образцам-свидетелям, содержащим радионуклидную метку, определяется главным образом, степенью изменения (уменьшения) потока γ -квантов от образца-свидетеля в зависимости от потери массы образцом-свидетелем, и является основой первичного сигнала.

Преобразователь должен обладать высокой чувствительностью к изменениям измеряемого параметра. Это определяется его свойством. Его выходная величина должна быть малочувствительна или нечувствительна к изменениям не измеряемых параметров, к мешающим факторам. Это определяется свойством первичного преобразователя и среды, с которой происходит взаимодействие γ -квантов, испускаемых образцом-свидетелем.

На рис. 1 приведена схема измерения коррозии с применением образцов-свидетелей с радионуклидной меткой.

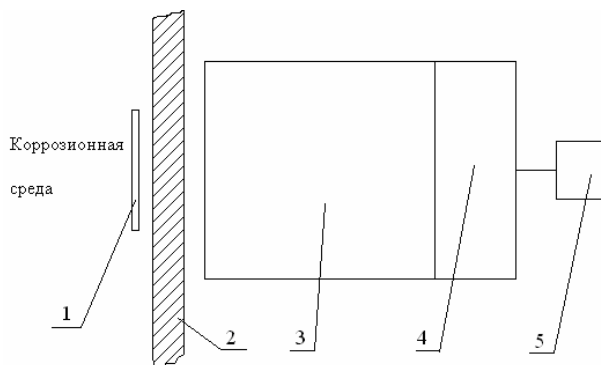


Рис. 1. Схема измерения коррозии с применением образцов-свидетелей, содержащих радионуклидную метку: 1 – образец-свидетель, содержащий радионуклидную метку (первичный преобразователь); 2 – стенка трубопровода; 3 – детектор, преобразующий поток γ -квантов в электрический сигнал; 4 – измерительная схема; 5 – измеритель

Измерение коррозии осуществляется следующим образом. Образец-свидетель, содержащий радионуклидную метку, помещается в коррозионную среду. Коррозионная среда, воздействуя на образец-свидетель, растворяет его. В результате чего материал образца-свидетеля совместно с радионуклидной меткой переходит в коррозионную среду и выносится последней из зоны контроля. Уменьшение массы m (толщины) образца-свидетеля приводит к снижению потока γ -квантов от него.

В первичном измерительном преобразователе происходит преобразование входной величины m в выходную величину ϕ (поток γ -квантов).

Чувствительностью S первичного измерительного преобразователя называется отношение изменения (снижения) выходной величины $\Delta\phi$ (потока γ -квантов) к вызвавшему это снижение изменению входной величины Δm (уменьшению массы образца-свидетеля):

$$S = \lim_{\Delta m \rightarrow 0} \frac{\Delta\phi}{\Delta m}. \quad (1)$$

Преобразование входной величины m в выходную величину ϕ первичным измерительным преобразователем (которым является образец-свидетель), содержащим радионуклидную метку, происходит в несколько стадий:

- уменьшение массы образца-свидетеля вызывает снижение в нем количества имеющихся (предварительно введенных) радиоактивных ядер ($\Delta N_{\text{кор}}$) Co-60 или Fe-59:

$$\Delta N_{\text{кор}} = \frac{N_0}{m_0} \Delta m, \quad (2)$$

где N_0 – количество имеющихся радиоактивных ядер в образце-свидетеле в начальный момент времени ($t = 0$); m_0 – масса образца-свидетеля в начальный момент времени ($t = 0$); Δm – уменьшение массы образца-свидетеля. Кроме того, уменьшение в образце-свидетеле количества имеющихся радиоактивных ядер за период от $t = 0$ до $t = t$ происходит за счет радиоактивного распада:

$$\Delta N_{pp} = N_0 - N_0 e^{-\lambda t}, \quad (3)$$

где N_0 – количество имеющихся радиоактивных ядер в образце-свидетеле в начальный момент времени ($t = 0$); λ – постоянная распада радионуклида, $\lambda = \frac{0,693}{T_{1/2}}$ [16]; $T_{1/2}$ – период полураспада радионуклида; t – промежуток времени от $t = 0$ до $t = t$;

- уменьшение в образце-свидетеле количества имеющихся радиоактивных ядер, как в результате уменьшения его массы, так и за счет радиоактивного распада, приводит к уменьшению его активности;

- уменьшение активности образца-свидетеля приводит к уменьшению выходной величины ϕ потока γ -квантов. Выходная величина ϕ зависит от: массы (m) образца-свидетеля; пе-

риода полураспада радионуклида ($T_{1/2}$); удельной активности радионуклида q и выхода n γ -квантов на распад. Поэтому:

$$\varphi = n\lambda \frac{N_0}{m_0} m e^{-\lambda t}. \quad (4)$$

Определим чувствительность S (абсолютную чувствительность) первичного измерительного преобразователя (образца-свидетеля, содержащего радионуклидную метку).

При равномерном распределении радионуклида в образце-свидетеле

$$\frac{\Delta N_{\text{кор}}}{\Delta m} = \frac{N_0}{m_0} = C, \quad (5)$$

где C – концентрация радиоактивных ядер в образце-свидетеле.

При наличии в образце-свидетеле единственного радионуклида

$$\frac{\Delta a_{\text{кор}}}{\Delta N_{\text{кор}}} = \frac{a_0}{N_0} = \lambda \quad \text{и} \quad \frac{\Delta \varphi_{\text{кор}}}{\Delta a_{\text{кор}}} = n. \quad (6)$$

Чувствительность первичного преобразователя (S) выражается как произведение чувствительностей всех его звеньев [15]:

$$S = S_1 \times S_2 \times \dots \times S_n, \quad (7)$$

тогда из (5), (6) получим:

$$S = C\lambda n = C \frac{0,693}{T_{1/2}} n = qn.$$

Чувствительность S первичного измерительного преобразователя зависит от удельной активности радионуклида q в образце-свидетеле и выхода γ -квантов на распад n .

Для наглядности сравним некоторые характеристики образцов-свидетелей, в составе которых имеются радионуклиды Co-60 и Fe-59.

Определим количество радиоактивных ядер Co-60 и Fe-59 в начальный момент времени $t = 0$ с заданной активностью, не превышающей минимально значимую активность (МЗА) [17, 18]. Для радионуклида Fe-59 МЗА = 10^6 Бк, для Co-60 МЗА = 10^5 Бк. При работе с образцами-свидетелями активностью менее МЗА не требуется получение специального разрешения (лицензии), санитарно-эпидемиологического заключения и другой разрешительной документации.

Количество ядер радионуклида в каждом образце-свидетеле: для Fe-59 $N_0 = \frac{a}{\lambda} = 5,6 \cdot 10^{12}$;

а для Co-60 $N_0 = \frac{a}{\lambda} = 23,98 \cdot 10^{12}$. Зададим массу

образца-свидетеля $m_0 = 10$ г. Период полураспада $T_{1/2}$ и выход γ -квантов на распад (n) для радионуклидов Co-60 и Fe-59, соответственно, 5,27 и 1,99 года; 45 и 1,0 дней.

Тогда абсолютная чувствительность первичного измерительного преобразователя S и его активность a будут равны:

$$S = C\lambda n e^{-\lambda t} = \frac{N_0}{m_0} \frac{0,693}{T_{1/2}} n e^{-\lambda t} = qn e^{-\lambda t},$$

$$a = N_0 \lambda e^{-\lambda t}; \quad (8)$$

для Co-60 при $t = 0$

$$S = 19,9 \cdot 10^3 \text{ с}^{-1} \text{ г}^{-1}, \quad a = 0,99992 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1},$$

а для Fe-59 при $t = 0$

$$S = 99,8 \cdot 10^3 \text{ с}^{-1} \text{ г}^{-1}, \quad a = 0,99815 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}.$$

Чувствительность первичного преобразователя (образца-свидетеля), содержащего радионуклид Fe-59, по причине малого периода полураспада в процессе испытаний заметно снижается.

Поток φ γ -квантов от образца-свидетеля, содержащего радионуклид Fe-59 активностью $\sim 10^6$ Бк, $\varphi = a n e^{-\lambda t} = 0,99815 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$, т. е. ~ 5 раз выше (на момент времени $t = 0$) потока φ γ -квантов от образца-свидетеля, содержащего радионуклид Co-60 активностью $\sim 10^5$ Бк.

Период полураспада радионуклида Fe-59 значительно меньше периода полураспада радионуклида Co-60; по этой причине чувствительность первичного преобразователя (образца-свидетеля), содержащего радионуклид Fe-59, в процессе испытаний будет заметно снижаться. И за время около 2,5 периодов полураспада чувствительность уменьшится более чем в 5 раз, т. е. чувствительности по Fe-59 и по Co-60 сравниваются.

Поток φ γ -квантов от образца-свидетеля распространяется в сферу, в центре которой он находится. На пути от образца-свидетеля до измерителя происходят преобразования информации о свойствах этого образца. В детектор попадает только часть γ -квантов, излучаемых образцом-свидетелем, что вызвано конечными размерами детектора и расстоянием между детектором и образцом-свидетелем. Все это называется геометрическим фактором. Геометрический фактор и период полураспада в чувствительности метода, основанного на применении образцов-свидетелей, содержащих радионуклиды, являются значимыми в сравнении с другими факторами. Очевидно, реальная чув-

ствительность значительно отличается от теоретической, которая получена расчетным путем для первичного измерительного преобразователя, содержащего радионуклидную метку.

Для наглядности покажем $S_1(t)$ и $S_2(t)$ на графике (рис. 2) изменение абсолютной чувст-

вительности первичных преобразователей (содержащих радионуклиды Fe-59 и Co-60) в процессе проведения испытаний в течение 1 года:

$$S_1 = 99,8 \cdot 10^3 \cdot e^{-\lambda_1 t} \text{ с}^{-1} \Gamma^{-1},$$

$$S_2 = 19,9 \cdot 10^3 \cdot e^{-\lambda_2 t} \text{ с}^{-1} \Gamma^{-1}.$$

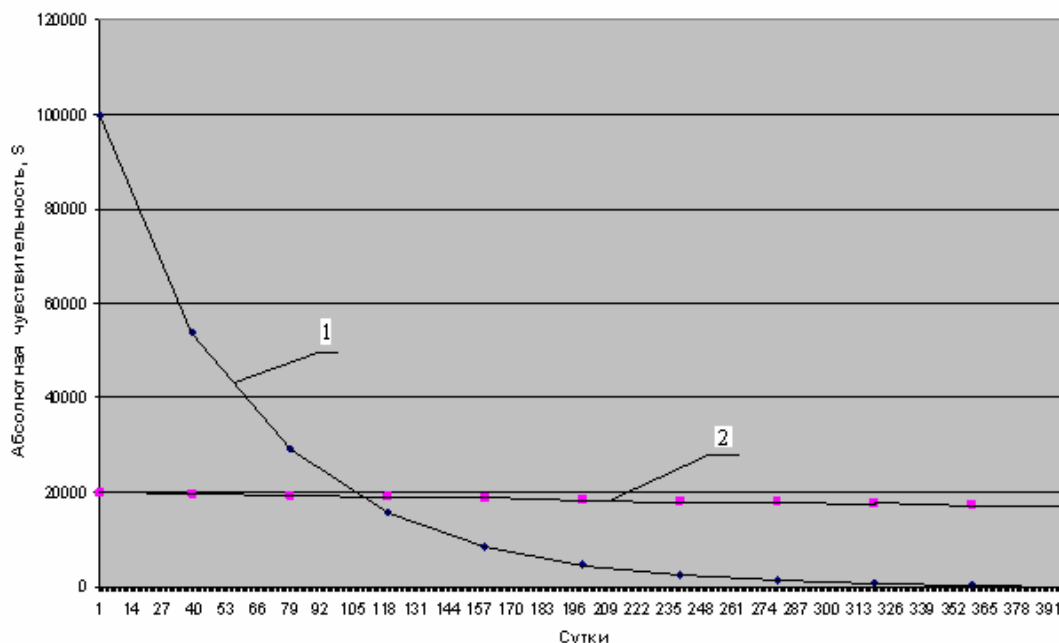


Рис. 2. Абсолютная чувствительность первичных преобразователей (содержащих радионуклиды Co-60 и Fe-59) в процессе проведения испытаний в течение 1 года:
1 – образец-свидетель с радионуклидом Fe-59; 2 – образец-свидетель с радионуклидом Co-60

На пути от образца-свидетеля до измерителя происходят преобразования: свойств образца-свидетеля в свойства источника γ -квантов; свойств источника γ -квантов в свойства первичного потока γ -квантов; свойств первичного потока γ -квантов в свойства вторичного потока γ -квантов; свойств вторичного потока γ -квантов в свойства плотности потока вторичных γ -квантов; свойств плотности потока вторичных γ -квантов в свойства выходного сигнала – интенсивность, регистрируемую детектором излучения (скорость счета импульсов).

Измеряемым параметром образца-свидетеля является его масса, функционально связанная со свойством: источника γ -квантов (количеством ядер радионуклида в образце-свидетеле и их активностью); первичного потока γ -квантов (количеством γ -квантов в единицу времени); вторичного потока γ -квантов (количеством γ -квантов в единицу времени); плотности потока γ -квантов (количеством γ -квантов на единицу площади в единицу времени); выходного

сигнала – интенсивностью, регистрируемой детектором излучения (скоростью счета импульсов – количеством электрических импульсов в единицу времени). В реальных условиях возможна регистрация некоторой доли от потока γ -квантов образца-свидетеля в зависимости от геометрического фактора, объема детектора и его эффективности.

Регистрируемая активность I (скорость счета) и плотность потока ρ ($\text{с}^{-2} \text{с}^{-1}$) γ -квантов в точке детектирования определяется по формулам [16].

Статистическая погрешность выходной величины первичных измерительных преобразователей

Работа радиоизотопного прибора основана на функциональной связи интенсивности регистрируемого детектором излучения (скорости счета импульсов) с измеряемым параметром объекта контроля [19]. В настоящем методе измерения коррозии объектом контроля служит образец-свидетель. Измеряемым параметром

образца-свидетеля является его масса, функционально связанная с потоком γ -квантов от него (плотностью потока), а в результате всех преобразований с интенсивностью, регистрируемой детектором излучения (скоростью счета импульсов). Случайный характер следования γ -квантов, а соответственно, электрических импульсов от детектора во времени, вызванный статистическим характером распада ядер источника излучения (образца-свидетеля, содержащего радионуклидную метку), ведет к разбросу значений числа импульсов, зарегистри-

рованных в течение одного и того же интервала времени t . Средняя квадратическая статистическая погрешность числа зарегистрированных импульсов определяется по соответствующей формуле [19].

Зададим значения параметров для сцинтилляционного детектора с кристаллом NaI(Tl): $d = 63$, $h = 63$, $\varepsilon = 0,2$. Детектор находится на расстоянии $R = 10$ см от образца-свидетеля. Тогда определим скорости счета импульсов от образцов-свидетелей с радионуклидами Co-60 и Fe-59 (рис. 3).

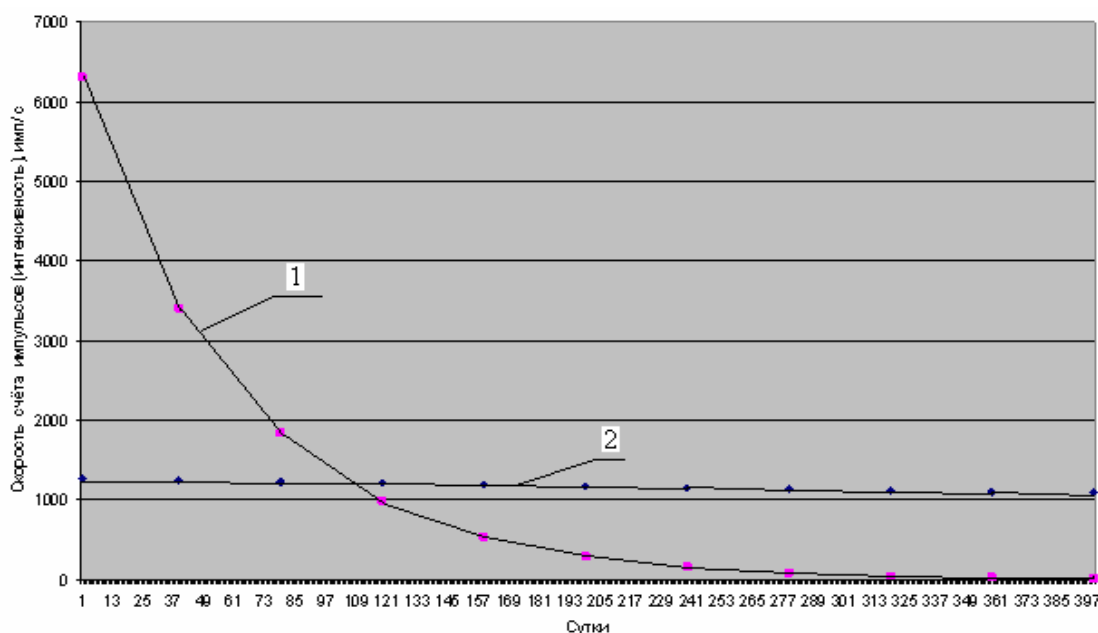


Рис. 3. Скорость счета импульсов (интенсивность) от образцов-свидетелей (содержащих радионуклиды Co-60 и Fe-59) в процессе проведения испытаний в течение 1 года:
 1 – образец-свидетель с радионуклидом Fe-59; 2 – образец-свидетель с радионуклидом Co-60

Относительная погрешность измерения скорости счета импульсов (интенсивности) от образцов-свидетелей (содержащих радионуклиды Co-60 и Fe-59) представлена на рис. 4.

Ослабление потока ϕ γ -квантов при прохождении через слой вещества плотностью ρ и толщиной d происходит по экспоненциальному закону.

Коррозионная среда, в которую устанавливаются образцы-свидетели, является технологической средой и в зависимости от параметров технологического процесса, качества сырья и других факторов может иметь различную плотность, что вызывает нежелательные (не связанные с коррозией образца) изменения потока γ -квантов и вносит погрешность в результа-

ты измерения коррозии. Чувствительность S_p к изменению плотности ρ определяется по известной формуле [16, 19].

Материал стенки технологического оборудования или трубопровода ослабляет поток γ -квантов. Толщина стенки (ослабляющей поток γ -квантов) в результате коррозии уменьшается, вызывая увеличение потока ϕ γ -квантов, и вносит погрешность со знаком «+» в измерение коррозии.

Чувствительность к изменению измеряемого параметра Δt является полезной или рабочей чувствительностью. Остальные чувствительности называются паразитными и функционально не связаны с изменением массы образца-свидетеля.

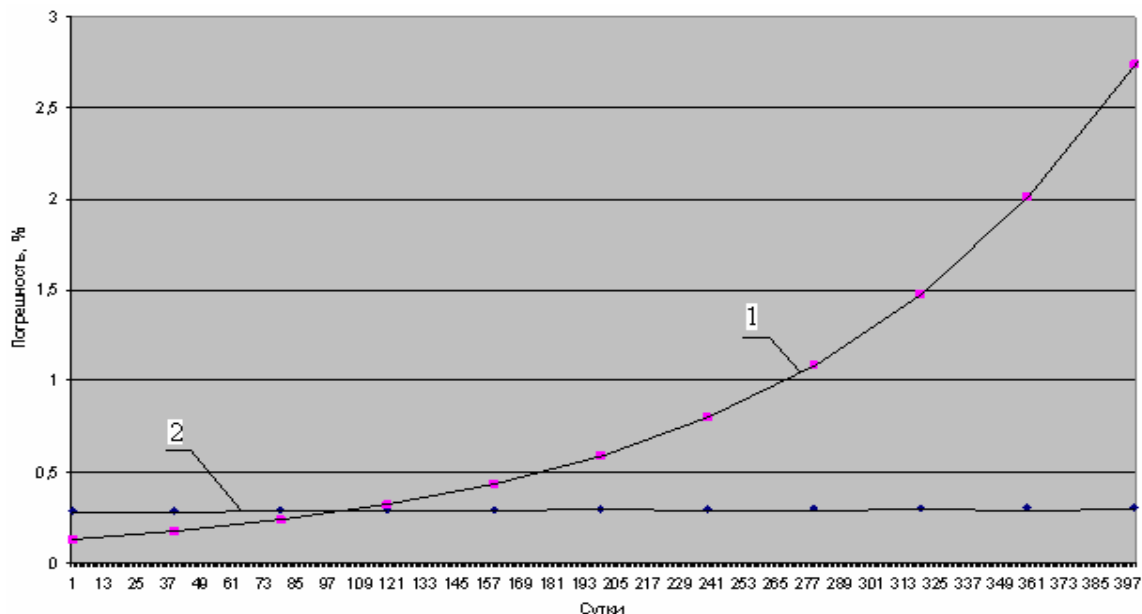


Рис. 4. Относительная погрешность измерения скорости счета импульсов (интенсивности) от образцов-свидетелей (содержащих радионуклиды Co-60 и F-59) в процессе проведения испытаний в течение 1 года:
1 — образец-свидетель с радионуклидом F-59; 2 — образец-свидетель с радионуклидом Co-60

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Экономика черных металлов в промышленности : тез. докл. обл. науч.-техн. конф., Волгоград, 1978.
2. Торопчинов, А. Н. Радиоактивные индикаторы в исследованиях на железнодорожном транспорте / А. Н. Торопчинов, Г. М. Тихонов. — М.: Энергоиздат, 1981. — 84 с.
3. Контроль коррозии промышленного оборудования. Серия «Борьба с коррозией в нефтегазовой промышленности». ВНИИОЭНГ. Москва, 1971.
4. Константинов, И. О. Дистанционный радиометрический способ контроля коррозии оборудования в производственных условиях / И. О. Константинов, В. В. Малухин, В. М. Новаковский, В. М. Брусенцова, В. Н. Сумец // Защита металлов. — 1977. — № 5. — С. 523.
5. Пастухов, Ю. В. Контроль скорости коррозии стального образца (ст. 3) в условиях нефтепромысла методом радиоактивных индикаторов / Ю. В. Пастухов, М. А. Дембровский // Информационный листок. — 1978. — № 518-78. ЦНТИ. Волгоград, 1978.
6. Пастухов, Ю. В. Применение метода радиоактивных индикаторов в контроле коррозии / Ю. В. Пастухов, А. М. Гуревич, В. Ф. Кириш // Росинг. — 2007. — № 3 (051). — С. 7.
7. Пастухов, Ю. В. Применение метода радиоактивных индикаторов в контроле коррозии / Ю. В. Пастухов, А. М. Гуревич, В. Ф. Кириш // Интервал. — 2007. — № 3. — С. 71–73.
8. Гребенников, М. Перспективы производства и потребления ингибиторов коррозии / М. Гребенников // Нефтегазовая вертикаль. — 2008. — № 13. — С. 92.
9. А.с. 1353094, кл. G01 N 17/00. Способ определения скорости коррозии / Ю. В. Пастухов, М. А. Дембровский, А. Н. Татаркин, О. А. Захаров, Б. Б. Кадралиев (СССР). — 1986.
10. А.с. 1400261, кл. G01N 23/00. Способ контроля процесса коррозии / Ю. В. Пастухов, В. Ф. Кириш (СССР). — 1986.
11. А.с. 1603261, кл. G01N 23/00. Способ определения скорости коррозии / Ю. В. Пастухов, В. Н. Салов (СССР). — 1988.
12. Пастухов, Ю. В. Оценка скорости коррозии в промышленных условиях / Ю. В. Пастухов // Химическая промышленность. — 1992. — № 10. — С. 57.
13. А.с. № 1611072, кл. G01N 23/00. Устройство для определения скорости коррозии сварных соединений / Ю. В. Пастухов, Ю. А. Бондарев (СССР). — 1988.
14. А.с. № 1753374, кл. G 01N 17/00. Устройство для определения скорости коррозии / Ю. В. Пастухов (СССР). — 1990.
15. Пугачёв, А. В. Чувствительность радиоизотопных способов контроля / А. В. Пугачёв. — М.: Атомиздат. — 1976. — С. 96.
16. Лукьянов, В. Б. Радиоактивные индикаторы в химии. Основы метода: учеб. пособие / В. Б. Лукьянов, С. С. Бердоносков, И. О. Богатырёв, К. Б. Заборенко, Б. З. Иофа. — 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Высшая школа, — 1975. — С. 327.
17. Гигиенические требования к проведению работ с активированными материалами и изделиями при определении их износа и коррозии. СП 2.6.4. 1115–02. Минздрав РФ. 1999.
18. Нормы радиационной безопасности НРБ-99 СП 2.6.1.758–99. Минздрав РФ. 1999.
19. Онищенко, А. М. Методы повышения точности приборов с источниками ионизирующего излучения / А. М. Онищенко. — М.: Изд-во стандартов. — 1987. — С. 272.

УДК 681.518.3

*А. Н. Шилин, С. В. Макартичян***ИНСТРУМЕНТАЛЬНАЯ ПОГРЕШНОСТЬ ЦИФРОВОГО
ДИЭЛЬКОМЕТРИЧЕСКОГО ВЛАГОМЕРА ДРЕВЕСИНЫ****Волгоградский государственный технический университет**

В статье рассмотрены основные способы измерения влажности в деревообрабатывающей промышленности. Выявлены основные источники погрешностей предложенного цифрового влагомера древесины. Дана оценка инструментальной погрешности измерительной части влагомера.

This article is devoted to the basic ways of humidity measurement in woodworking industry. The basic error sources of the offered digital hydrometer are revealed. The instrumental error estimation of a scheme measuring part is given.

Одним из основных технологических процессов в деревообрабатывающей промышленности является сушка материала – древесины. Это объясняется тем, что детали или части изделия, изготовленные из сырой или недостаточно просушенной древесины, неизбежно будут высыхать в эксплуатации. При этом будут изменяться их размеры и форма, в результате чего уменьшится плотность их соединений, нарушится прочность и внешний вид изделия, а в худшем случае оно может разрушиться. Таким образом, несоблюдение технологии сушки материалов оказывает отрицательное влияние на качество выпускаемой продукции. Очевидно, что для обеспечения требуемых режимов сушки необходим контроль основных параметров материала и режимов технологического процесса, т. е. технологическое оборудование должно быть оснащено контрольно-измерительными устройствами. Главным измерительным устройством технологического процесса сушки является измеритель влажности.

Технологический процесс сушки

Основной промышленный способ сушки пиломатериалов в настоящее время – конвективно-тепловая камерная сушка, осуществляемая в лесосушильных камерах, куда пиломатериалы загружают штабелями. Тепло древесине передается за счет обтекания ее нагретым воздухом или другим газом. Для нагревания воздуха и его циркуляции в штабелях сушильные камеры снабжают нагревательными и циркуляционными устройствами. При камерной сушке гарантируются сравнительно короткие сроки просыхания пиломатериалов – от десятков часов до нескольких суток, вполне надежное регулирование процесса, доведение древесины до любой конечной влажности и получение задан-

ного ее качества, отвечающего тому или иному назначению пиломатериалов.

В промышленности, в основном, используются два способа контроля влажности: прямой термогравиметрический (весовой) и косвенный электрический, основанный на зависимости электропроводности древесины от ее влажности. Эти способы определения влажности применяются для разового ее контроля на различных этапах производственного потока деревообрабатывающих предприятий.

Весовой способ определения влажности основан на взвешивании и высушивании образцов (проб), отбираемых из партии сортиментов, влажность которых подлежит определению. Он обладает достаточно высокой точностью (относительная погрешность измерений порядка 0,5 %), но требует длительного времени на измерение и не поддается автоматизации.

Для определения влажности древесины электрическим способом используются кондуктометрические влагомеры, основанные на измерении электропроводности древесины контактным способом, и диэлькометрические влагомеры, основанные на измерении диэлектрической проницаемости древесины или ее диэлектрических потерь.

Зависимость электропроводности древесины от ее влажности такова, что кондуктометрические влагомеры надежно измеряют влажность лишь в диапазоне от 7 до 30 %. Влажность выше 30 % измеряется с очень большой погрешностью. Преимуществом диэлькометрических влагомеров является более широкий диапазон измерения, достаточно высокая точность и быстроедействие, бесконтактность и возможность автоматизации процесса измерений. Поэтому в настоящее время актуальна задача разработки диэлькометрических влагоме-

ров, использующих для обработки информации современные программируемые микроконтроллерные устройства. Преимуществом современных микроконтроллеров является надежность, компактность и быстродействие. Очень важное их достоинство – возможность программирования. Так, например, вероятно использование одного влагомера на базе микроконтроллера для измерения влажности широкого круга веществ и материалов.

На рис. 1 изображена структурная функциональная схема цифрового диэлектрического влагомера.

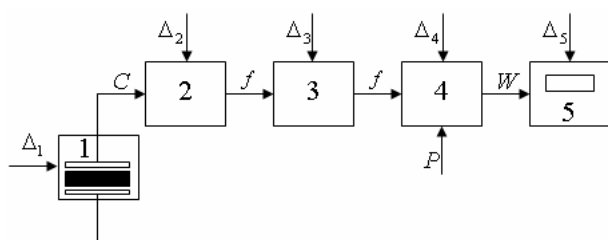


Рис. 1. Структурная схема цифрового влагомера

Звено 1 описывает связь «состав – свойство», т. е. преобразование влажности W в конденсаторную емкость датчика C с контролируемым образцом, которая прямо пропорционально связана с диэлектрической проницаемостью ϵ образца. Звено 2 – первичный измерительный преобразователь, который представляет собой автоколебательный мультивибратор, собранный на операционном усилителе [1] (рис. 2), на выходе которого получают импульсы прямоугольной формы с частотой f , связанной с емкостью C обратно пропорциональной зависимостью. Звеном 3 является аналого-цифровой преобразователь частоты, которая поступает на цифровой вход микроконтроллера 4. Программа работы микроконтроллера базируется на экспериментально определенной зависимости $W(f)$ по образцам с известной влажностью. Режимом P задается сортимент образцов. Выходным сигналом микроконтроллера является влажность W в цифровом виде, которая поступает на цифровой индикатор 5.

Источниками погрешностей цифрового влагомера Δ являются: для звена 1 – изменение состояния и свойств материала, помимо влажности (температура, плотность и т. д.); для звена 2 – нестабильность параметров пассивных элементов R и C в составе автоколебательного мультивибратора; для звена 3 – неточность установки номинала частоты f_0 опорного гене-

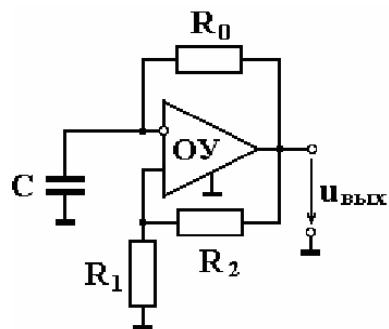


Рис. 2. Автоколебательный мультивибратор

ратора, временная и температурная нестабильность, отсутствие синхронизации сигнала частоты f с сигналом частоты f_0 , преобразование непрерывной величины, а именно частоты f , в дискретную величину, т. е. погрешность дискретности; для звена 4 – погрешность алгоритма работы микроконтроллера, обусловленная расчетами с плавающей запятой; для звена 5 – помехи, воздействующие на измерительное устройство.

Проанализируем инструментальную погрешность цифрового влагомера, т. е. погрешности звеньев 2, 3 и 4 структурной схемы.

Звено 2 содержит в своем составе пассивные элементы R и C , которые являются источниками погрешности. Поэтому необходима оценка влияния нестабильности параметров пассивных элементов на погрешность измерения частоты, поскольку необоснованный выбор типов пассивных компонентов может привести к ухудшению характеристик схемы в целом. Влияние пассивных компонентов на работу устройства может проявляться в виде дрейфа, отклонения их параметров от расчетных значений и т. д. Например, для резисторов это вызвано влиянием температуры, индуктивности, емкости и контактной ЭДС выводов; для конденсаторов – влиянием сопротивления диэлектрика, явлением диэлектрической абсорбции, сопротивлением и индуктивностью выводов и обкладок конденсатора.

Оценить разброс частоты выходного сигнала мультивибратора

$$f = \frac{1}{2R_0C \ln\left(1 + \frac{2R_1}{R_2}\right)}, \quad (1)$$

вызванный отклонением параметров элементов R_0 , R_1 , R_2 и C от расчетных значений, можно с помощью метода «полного дифференциала»,

пренебрегая членами второго порядка малости. Для вычисления среднеквадратического отклонения частоты при отсутствии корреляционной

зависимости между среднеквадратическими отклонениями параметров пассивных элементов целесообразно использовать формулу [2]

$$\sigma[f_{RC}] \approx \sqrt{\left[\frac{\partial f}{\partial R_0} \sigma[R_0]\right]^2 + \left[\frac{\partial f}{\partial R_1} \sigma[R_1]\right]^2 + \left[\frac{\partial f}{\partial R_2} \sigma[R_2]\right]^2 + \left[\frac{\partial f}{\partial C} \sigma[C]\right]^2}, \quad (2)$$

где $\sigma[R_0]$, $\sigma[R_1]$, $\sigma[R_2]$, $\sigma[C]$ – оценки дисперсии параметров пассивных элементов мультивибратора.

Для вычисления доверительного интервала погрешности результата измерения необходима информация о законах распределения случайных величин, входящих в уравнение измерения. Однако в измерительной технике существует уникальное свойство [3], которое заключается в том, что для широкого класса наиболее употребительных законов распределения вероятностей (равномерного, треугольного, трапе-

цеидальных, нормального, экспоненциальных) имеется однозначное соотношение погрешности со средним квадратичным отклонением в виде $\tilde{\Delta}_{0,9} = 1,6\sigma$. Поэтому, если отсутствуют данные о законе распределения погрешностей, то в качестве доверительной вероятности необходимо использовать $P_d = 0,9$ с квантильным коэффициентом $K(P_d) = 1,6$. Таким образом, выражение для суммарной погрешности измерения частоты, вызванной изменением параметров пассивных элементов, с доверительной вероятностью $P_d = 0,9$ имеет следующий вид:

$$\tilde{\Delta}f_{RC} \approx \sqrt{\left[\frac{\partial f}{\partial R_0} \tilde{\Delta}R_0\right]^2 + \left[\frac{\partial f}{\partial R_1} \tilde{\Delta}R_1\right]^2 + \left[\frac{\partial f}{\partial R_2} \tilde{\Delta}R_2\right]^2 + \left[\frac{\partial f}{\partial C} \tilde{\Delta}C\right]^2}, \quad (3)$$

где
$$\frac{\partial f}{\partial R_0} = -\frac{1}{2R_0^2 C \ln\left(1 + \frac{2R_1}{R_2}\right)}; \quad (4)$$

$$\frac{\partial f}{\partial R_2} = \frac{R_1}{R_0 R_2^2 C \left(1 + \frac{2R_1}{R_2}\right) \ln^2\left(1 + \frac{2R_1}{R_2}\right)}; \quad (6)$$

$$\frac{\partial f}{\partial R_1} = -\frac{1}{R_0 R_2 C \left(1 + \frac{2R_1}{R_2}\right) \ln^2\left(1 + \frac{2R_1}{R_2}\right)}; \quad (5)$$

$$\frac{\partial f}{\partial C} = -\frac{1}{2R_0 C^2 \ln\left(1 + \frac{2R_1}{R_2}\right)}. \quad (7)$$

Для выявления погрешностей звена 3 рассмотрим аналого-цифровой преобразователь частоты [4] (рис. 3).

Сигнал прямоугольной формы частоты f подается с выхода мультивибратора на один из двух входов логического элемента DD . На другой вход подается импульс, имеющий заданную длительность Δt_0 . Он получается на выходе делителя частоты FR , который делит в k раз опорную частоту сигнала прямоугольной формы, вырабатываемого генератором импульсов G . На выходе логического элемента DD образуется сигнал, переходы которого от состояния 0 к 1 на интервале Δt_0 подсчитываются счетчиком импульсов CT .

Без учета погрешностей в соответствии с рис. 3, б можно записать

$$N = \Delta t_0 / T = \Delta t_0 f = kf / 2f_0, \quad (8)$$

где T – период входного сигнала. Отсюда

$$f = N / \Delta t_0 = 2f_0 N / k = qN, \quad (9)$$

где q – квант, т. е. значение единицы дискретности преобразователя.

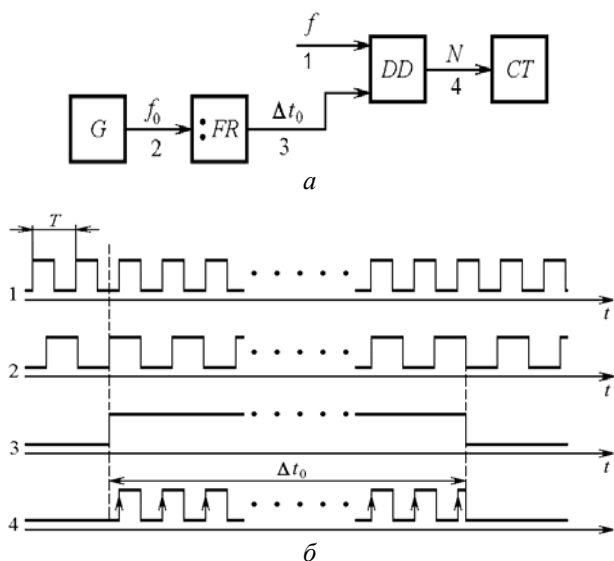


Рис. 3. Структурная схема (а) и временные диаграммы сигналов (б) аналого-цифрового преобразователя частоты

Можно выделить три источника погрешностей аналого-цифрового преобразователя частоты:

а) отличие Δq кванта от номинального значения $q_{\text{ном}}$ из-за ухода частоты f_0 от номинального значения $f_{0\text{ном}}$ на Δf_0 (неточность установки номинала, временная и температурная нестабильность), т. е.

$$q = q_{\text{ном}}(1 + \delta_{f_0}), \quad (10)$$

где $\delta_{f_0} = \Delta q / q_{\text{ном}} = \Delta f_0 / f_{0\text{ном}}$ – относительная погрешность генератора импульсов.

Если известно среднеквадратичное отклонение и доверительный интервал погрешности частоты опорного генератора $\sigma[f_0]$ и $\tilde{\Delta}f_0$, то среднеквадратичное отклонение и доверительный интервал погрешности измеряемой частоты, обусловленные этой причиной, составят соответственно

$$\sigma[f_{f_0}] = \frac{f}{f_0} \sigma[f_0], \quad (11)$$

$$\tilde{\Delta}f_{f_0} = \frac{f}{f_0} \tilde{\Delta}f_0. \quad (12)$$

Эта погрешность является мультипликативной составляющей, поскольку зависит от измеряемой величины f .

б) отсутствие синхронизации сигнала частоты f с сигналом частоты f_0 ; максимальная абсолютная погрешность, обусловленная этим фактором, составляет $\pm 0,5q$;

в) преобразование непрерывной величины, а именно частоты f , в дискретную величину qN , т. е. погрешность дискретности, максимальное абсолютное значение которой также составляет $\pm 0,5q$.

Последние два фактора вместе обуславливают максимальное абсолютное значение погрешности $\Delta_N = \pm q$. Погрешности, вызванные этими факторами, имеют равномерный закон распределения при нулевом математическом ожидании, а дисперсия, средняя квадратичная погрешность и доверительный интервал погрешности определяются выражениями:

$$D[f_N] = \int_{-q}^{+q} \Delta_N^2 \frac{1}{2q} d(\Delta_N) = \frac{q^2}{3}; \quad \sigma[f_N] = \frac{q}{\sqrt{3}}; \quad \tilde{\Delta}f_N = 1,6 \cdot \frac{q}{\sqrt{3}}. \quad (13)$$

Суммарная средняя квадратичная погрешность и доверительный интервал суммарной

погрешности аналого-цифрового преобразователя частоты определяются с помощью выражений (11), (12), (13):

$$\sigma[f_{\text{АЦП}}] \approx \sqrt{\sigma^2[f_{f_0}] + \sigma^2[f_N]}, \quad (14)$$

$$\tilde{\Delta}f_{\text{АЦП}} \approx \sqrt{\tilde{\Delta}^2 f_{f_0} + \tilde{\Delta}^2 f_N}. \quad (15)$$

Поскольку на вход микроконтроллера частота f поступает в виде цифрового кода N , то его погрешность $\tilde{\Delta}f_M$ обусловлена только операциями программы с плавающей запятой при расчете влажности по экспериментальной зависимости $W(f)$.

Тогда инструментальная погрешность цифрового влагомера с учетом выражений (3) и (15), а также погрешности микроконтроллера, имеет вид:

$$\tilde{\Delta}f \approx \sqrt{\tilde{\Delta}^2 f_{RC} + \tilde{\Delta}^2 f_{\text{АЦП}} + \tilde{\Delta}^2 f_M}. \quad (16)$$

Пример. Оценить инструментальную погрешность цифрового влагомера при следующих параметрах:

$$R_0 = 100 \text{ кОм}, \quad R_1 = 10 \text{ кОм}, \quad R_2 = 1,6 \text{ кОм},$$

$$C = 20 \text{ пФ}, \quad \tilde{\Delta}R_0 / R_0 = 0,01 \%, \quad \tilde{\Delta}R_1 / R_1 = 0,01 \%,$$

$$\tilde{\Delta}R_2 / R_2 = 0,01 \%, \quad \tilde{\Delta}C / C = 0,01 \%,$$

$$f_0 = 50 \text{ Гц}, \quad \tilde{\Delta}f_0 / f_0 = 2 \cdot 10^{-6} \%, \quad k = 10.$$

Используя формулы (1), (3), (4), (5), (6), (7), (12), (13), (15), (16), получим: $f = 96054,48 \text{ Гц}$, $\tilde{\Delta}f_{RC} = 14,42 \text{ Гц}$, $\tilde{\Delta}f_{f_0} = 0,19 \text{ Гц}$, $\tilde{\Delta}f_N = 9,24 \text{ Гц}$, $\tilde{\Delta}f_{\text{АЦП}} = 9,24 \text{ Гц}$, $\tilde{\Delta}f = 17,13 \text{ Гц}$. Относительная инструментальная погрешность составляет $\tilde{\Delta}f / f = 0,018 \%$.

Таким образом, задаваясь параметрами и доверительными интервалами погрешностей параметров звеньев 2, 3 и 4 структурной схемы, по приведенной методике возможно оценить инструментальную погрешность влагомера.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Гальперин, М. В. Практическая схемотехника в промышленной автоматике / М. В. Гальперин. – М. : Энергоатомиздат, 1987. – 320 с.

2. Новицкий, П. В. Оценка погрешностей результатов измерений / П. В. Новицкий, И. А. Зограф. – Л. : Энергоатомиздат, 1985. – 248 с.

3. Левшина, Е. С. Электрические измерения физических величин (измерительные преобразователи) / Е. С. Левшина, П. В. Новицкий. – Л. : Энергоатомиздат, 1983. – 320 с.

4. Кончаловский, В. Ю. Цифровые измерительные устройства / В. Ю. Кончаловский. – М. : Энергоатомиздат, 1985. – 304 с.

УДК 615.47:519.95

Р. С. Богатырёв, К. А. Лавеева

ОЦЕНКА ФУНКЦИОНАЛЬНОСТИ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ
ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИМ ПРОТЕЗОМ

Волгоградский государственный технический университет

В данной статье поставлена задача построения схемы управления электромеханическим протезом руки человека, причем методика построения схемы управления универсальна относительно любого положения линии ампутации. Проанализированы множества измеряемых сигналов и множества возможных движений протеза. На основе анализа получены матрицы качественного и количественного влияния измеряемых биопотенциалов.

In this article we consider a task of constructing the scheme of electromechanical artificial hand control, and, the technique of control scheme constructing is suitable for any location of amputation line. We analyzed the sets of signals measured and the sets of all possible artificial limb movements. On the basis of the analysis the matrixes of qualitative and quantitative measured biopotentials influence are received.

Еще со времен окончания Второй мировой войны остро, на уровне государства, ставился вопрос о замене конечностей, потерянных в боевых действиях или на производстве, искусственными протезами. Развитие науки и техники позволило советским ученым уже в 1957 году разработать первый биоправляемый протез руки [1]. Но с тех пор наука и технологии продвинулись вперед, что позволило решить поставленную задачу иными, более дешевыми способами, приводящими, тем не менее, к более комфортному для инвалидов результату. В нашей стране данная проблема по-прежнему актуальна в связи с возникновением медико-социальных проблем из-за всплеска количества инвалидов после военных операций конца 90-х годов XX века. Кроме этого, не стоит забывать о подъеме экономики и производства в России начала XXI века, и в связи с этим, о росте травматизма на рабочих местах.

Решая задачу управления движением электромеханического протеза, учтем, что зависимость между суммарным мышечным усилием и мощностью биопотенциалов в определенных пределах можно считать линейной [2], [3], [4]. Как известно, биоэлектрическое воздействие, передаваемое от центральной нервной системы к мышцам, отражается на поверхности кожи человека повышением амплитуды суммарного биопотенциала. Особенно ярко выражено это явление в двигательных точках [2]. Область двигательной точки является максимально возбуждимым участком мышцы, и с нее можно снимать биопотенциал с максимальной на всей мышце амплитудой. Для определения положения двигательных точек рассмотрим схему

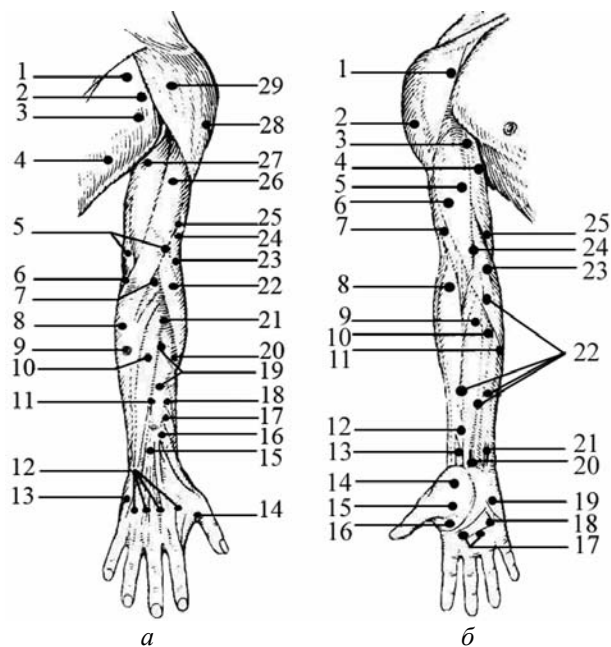


Рис. 1. Схема Альтенбургера:
а – тыльная сторона; б – ладонная сторона

Альтенбургера (рис. 1) как одну из самых удачных [2].

На данном рисунке на *тыльной стороне*: 1 – *infraspinatus* – подостная мышца; 2 – *teres minor* – малая круглая мышца; 3 – *teres major* – большая круглая мышца; 4 – *latissimus dorsi*; 5 – *triceps caput mediale* – медиальная головка трехглавой мышцы плеча; 6 – *n. ulnaris* – локтевой нерв; 7 – *anconaeus* – локтевая мышца; 8 – *flexor carpi ulnaris* – локтевой сгибатель запястья; 9 – *flexor digitorum profundus* – глубокий сгибатель пальцев; 10 – *extensor carpi ulnaris* – локтевой разгибатель запястья; 11 – *extensor digiti minimi* – разгибатель мизинца; 12 – *interossei* – межкост-

ные мышцы; 13 – abductor digiti minimi – мышца, отводящая мизинец; 14 – adductor pollicis – мышца приводящая большой палец кисти; 15 – extensor indicis proprius – разгибатель указательного пальца; 16 – extensor pollicis longus – длинный разгибатель большого пальца; 17 – extensor pollicis brevis – короткий разгибатель большого пальца кисти; 18 – abductor pollicis longus – длинная мышца отводящая большой палец; 19 – extensor digitorum – разгибатель пальцев; 20 – extensor carpi radialis brevis – короткий лучевой разгибатель запястья; 21 – supinator – супинатор; 22 – extensor carpi radialis longus – длинный лучевой разгибатель запястья; 23 – brachioradialis – плечелучевая мышца; 24 – brachialis – плечевая мышца; 25 – n. radialis – лучевой нерв; 26 – caput laterale tricipitis – латеральная головка трехглавой мышцы плеча; 27 – caput longum tricipitis – длинная головка трехглавой мышцы плеча; 28 – pars lat. deltoidei; – часть дельтовидной мышцы; 29 – pars post. deltoidei – часть дельтовидной мышцы.

Ладонная сторона: 1 – pars ant. deltoidei – часть дельтовидной мышцы; 2 – pars lat. deltoidei – часть дельтовидной мышцы; 3 – coracobrachialis – клювовидно – плечевая мышца; 4 – triceps caput longum – длинная головка трехглавой мышцы плеча; 5 – biceps brachii cap. breve – короткая головка двуглавой мышцы плеча; 6 – biceps brachii cap. longum – длинная головка двуглавой мышцы плеча; 7 – brachialis – плечевая мышца; 8 – brachioradialis – плечелучевая мышца; 9 – flexor c. radialis (flexor carpi radialis) – лучевой сгибатель запястья; 10 – palmaris longus – длинная ладонная мышца; 11 – flexor c. ulnaris (flexor carpi ulnaris) – локтевой сгибатель запястья; 12 – flexor pollicis longus – длинный сгибатель большого пальца; 13 – pronator quadratus – квадратный пронатор; 14 – abductor pollicis brevis – короткая мышца отводящая большой палец кисти; 15 – flexor pollicis brevis – короткий сгибатель большого пальца кисти; 16 – adductor pollicis – мышца приводящая большой палец кисти; 17 – interosseus volaris I und II et lumbricalis – межкостные мышцы; 18 – interosseus volaris III – межкостная мышца; 19 – abductor digiti minimi – мышца отводящая мизинец; 20 – n. ulnaris – локтевой нерв; 21 – n. medianus – срединный нерв; 22 – flexor digitorum superficialis – поверхностный сгибатель пальцев; 23 – pronator teres – круглый пронатор; 24 – n. medianus – срединный нерв; 25 – n. ulnaris – локтевой нерв.

Эту схему можно представить иначе, если рассматривать не конкретные двигательные точки, а их множество в целом. Необходимо также учесть биоэлектрический механизм формирования интерференционной ЭМГ, ведь сигнал, снимаемый с каждой двигательной точки, связан с движением костных рычагов и сокращением мышц так, как показано на рис. 2.

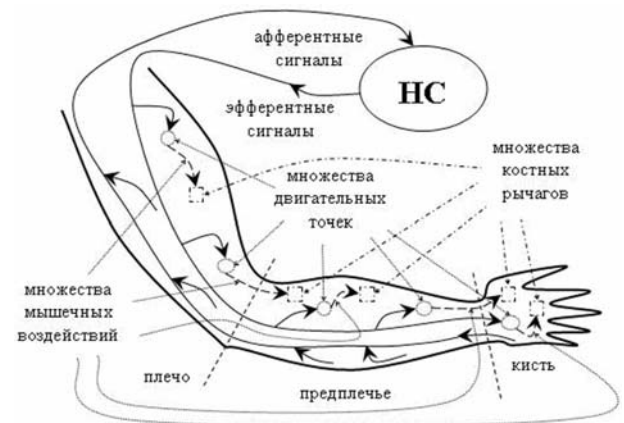


Рис. 2. Схема преобразования мотонейронных воздействий в движения костных рычагов. НС – нервная система

Исходя из этого, можно построить схему управления электромеханическим протезом руки человека. При этом методика построения схемы управления может быть достаточно универсальной относительно любого положения линии ампутации. Чтобы обеспечить универсальность методики расчета и оценить функциональность протеза, проанализируем руку человека с точки зрения множеств измеряемых сигналов и множеств возможных движений протеза.

В результате ампутации, в зависимости от положения линии ампутации, все множество мышц руки (назовем его M_{μ}) можно разбить на три подмножества: $M_{\mu 1}$ – усеченные мышцы; $M_{\mu 2}$ – ампутированные мышцы; $M_{\mu 3}$ – неповрежденные мышцы.

Множество $M_{\mu 3}$, с точки зрения управления протезом, неинформативно, так как если мышца не повреждена, то она нормально перемещает соответствующий костный рычаг. Множество $M_{\mu 2}$ тоже малоинформативно, так как в случае утраты мышцы теряется двигательная точка, а с ней и возможность снять сигнал. Множество $M_{\mu 1}$ следует разбить еще на два подмножества:

$M_{\mu 1.1}$ – эффективные усеченные мышцы – мышцы, у которых двигательная точка расположена до линии ампутации, то есть с них можно снять ЭМГ-сигнал;

$M_{\mu 1.2}$ – неэффективные усеченные мышцы – мышцы, у которых в результате ампутации утрачена двигательная точка.

Предположим, что линия ампутации проходит так же, как пунктир на рис. 2, отделяющий кисть от предплечья. Зная положение линии ампутации, легко определяем все подмножества M_{μ} . Так как с точки зрения управления интересно лишь подмножество $M_{\mu 1.1}$, выделим названия его элементов (табл. 1).

Таблица 1

Множество эффективных усеченных мышц при ампутации кисти

Элемент множества M_{μ}	Название и функция мышцы
μ_1	flexor digitorum profundus – глубокий сгибатель пальцев
μ_2	flexor digitorum superficialis – поверхностный сгибатель пальцев
μ_3	extensor digitorum – разгибатель пальцев
μ_4	extensor indicis proprius – разгибатель указательного пальца
μ_5	extensor digiti minimi – разгибатель мизинца
μ_6	flexor pollicis longus – длинный сгибатель большого пальца
μ_7	extensor pollicis longus – длинный разгибатель большого пальца
μ_8	extensor pollicis brevis – короткий разгибатель большого пальца
μ_9	abductor pollicis longus – длинная мышца, отводящая большой палец
μ_{10}	flexor carpi radialis – лучевой сгибатель запястья
μ_{11}	palmaris longus – длинная ладонная мышца
μ_{12}	flexor carpi ulnaris – локтевой сгибатель запястья
μ_{13}	extensor carpi radialis longus – длинный лучевой разгибатель запястья
μ_{14}	extensor carpi radialis brevis – короткий лучевой разгибатель запястья
μ_{15}	extensor carpi ulnaris – локтевой разгибатель запястья

Из всего множества M_{μ} были выделены только те элементы, с которых можно снять сигнал. Зная это множество, оценим функциональность системы управления протезом.

Анализируя табл. 1, можно подсчитать количество степеней свободы протеза, которые поддадутся управлению. Если каждому приводу протеза поставить в соответствие два возможных направления движения, то получим описание всех степеней свободы, которое приведено в табл. 2. При этом все множество приводов назовем $M_{\gamma} = \{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{17}\}$.

Таблица 2

Приводы, участвующие в осуществлении движений протеза

Привод	Назначение привода
γ_1	Приведение и отведение большого пальца
γ_2	Сгибание и разгибание проксимальной фаланги большого пальца
γ_3	Сгибание и разгибание дистальной фаланги большого пальца
γ_4	Сгибание и разгибание проксимальной фаланги указательного пальца
γ_5	Сгибание и разгибание средней фаланги указательного пальца
γ_6	Сгибание и разгибание дистальной фаланги указательного пальца
γ_7	Сгибание и разгибание проксимальной фаланги среднего пальца
γ_8	Сгибание и разгибание средней фаланги среднего пальца
γ_9	Сгибание и разгибание дистальной фаланги среднего пальца
γ_{10}	Сгибание и разгибание проксимальной фаланги безымянного пальца
γ_{11}	Сгибание и разгибание средней фаланги безымянного пальца
γ_{12}	Сгибание и разгибание дистальной фаланги безымянного пальца
γ_{13}	Сгибание и разгибание проксимальной фаланги мизинца
γ_{14}	Сгибание и разгибание средней фаланги мизинца
γ_{15}	Сгибание и разгибание дистальной фаланги мизинца
γ_{16}	Сгибание и разгибание запястья
γ_{17}	Приведение и отведение запястья

Как следует из табл. 1, измерительная система при данном положении линии ампутации должна фиксировать сигнал с 15-ти точек. При этом происходит управление 17-ю приводами (табл. 2). Влияние сигналов на приводы протеза имеет довольно сложную закономерность, которую трудно формализовать. Поэтому для предварительной обработки сигнала и преобразования его к виду, определяемому требованиями системы управления приводами протеза, следует использовать нейронную сеть. Но для ускорения процесса обучения сети можно выбрать начальные значения весовых коэффициентов нейронов слоя, который отвечает за интеграцию сигналов с различных мышц, управляющих одним приводом, таким образом, чтобы учесть качественную оценку их участия в различных движениях.

Введем некоторые обозначения. Пусть $M_\lambda = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{15}\}$ – все множество биопотенциалов, измеряемых на двигательных точках, расположенных на мышцах множества $M_{\mu.1.1}$. $M_\varepsilon = \{\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{15}\}$ – множество измеренных,

предварительно обработанных и оцифрованных сигналов. То есть можно записать измерительное уравнение вида:

$$\varepsilon_j = E[\lambda_j(t)],$$

где $\lambda_j(t)$ – биопотенциал как функция от времени, измеряемый на двигательной точке мышцы μ_j ; E – оператор, представляющий преобразование λ_j к виду ε_j .

Используя анатомические знания о расположении и функциях мышц [3], качественно опишем влияние $M_{\mu.1.1}$ на M_γ . Составим матрицу, в заголовках столбцов которой будут элементы множества M_γ , а в заголовках строк – M_ε . На пересечении строк и столбцов запишем 1, если соответствующая мышца участвует в движении сгибания или приведения, осуществляемого соответствующим приводом; –1, если происходит разгибание или отведение, и 0, если данная мышца не влияет на движение привода, соответствующего данному столбцу. Назовем ее матрицей качественного влияния.

	γ_1	γ_2	γ_3	γ_4	γ_5	γ_6	γ_7	γ_8	γ_9	γ_{10}	γ_{11}	γ_{12}	γ_{13}	γ_{14}	γ_{15}	γ_{16}	γ_{17}
ε_1	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0
ε_2	0	0	0	1	1	0	1	1	0	1	1	0	1	1	0	0	0
ε_3	0	0	0	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
ε_4	0	0	0	-1	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0
ε_5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	-1	-1	-1	0
ε_6	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ε_7	1	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ε_8	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ε_9	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ε_{10}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1
ε_{11}	0	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0
ε_{12}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1
ε_{13}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	-1
ε_{14}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	-1
ε_{15}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	1

Как видно, на один и тот же привод влияют различные мышцы, поэтому возникает дисбаланс сил, прикладываемых к соответствующим рычагам. Чтобы это учесть, матрицу необходимо нормировать. Определим правила нормировки.

Основное правило нормировки матрицы качественного влияния – суммы элементов столбцов матрицы должны быть равны нулю.

Это правило позволяет достичь динамического равновесия (состояния покоя) управляемого привода. То есть моделируется ситуация,

когда костные рычаги живой кисти при сокращенных мышцах не перемещаются – мышцы-агонисты уравниваются мышцами-антагонистами.

Дополнительное правило нормировки матрицы качественного влияния – суммы элементов столбцов матрицы с положительными знаками должны быть равны суммам элементов тех же столбцов с отрицательными знаками.

	γ_1	γ_2	γ_3	γ_4	γ_5	γ_6	γ_7	γ_8	γ_9	γ_{10}	γ_{11}	γ_{12}	γ_{13}	γ_{14}	γ_{15}	γ_{16}	γ_{17}	
ε_1	0	0	0	0,33	0,5	1	0,33	0,5	1	0,33	0,5	1	0,33	0,5	1	0	0	
ε_2	0	0	0	0,33	0,5	0	0,33	0,5	0	0,33	0,5	0	0,33	0,5	0	0	0	
ε_3	0	0	0	-0,5	-0,5	-0,5	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-0,5	-0,5	-0,5	-0,17	0	
ε_4	0	0	0	-0,5	-0,5	-0,5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0,17	0
ε_5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0,5	-0,5	-0,5	-0,17	0	
ε_6	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
ε_7	1	-0,5	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
ε_8	-0,5	-0,5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
ε_9	-0,5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
ε_{10}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,33	0,33
ε_{11}	0	0	0	0,33	0	0	0,33	0	0	0,33	0	0	0,33	0	0	0	0,33	0
ε_{12}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,33	0,33
ε_{13}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0,17	-0,5
ε_{14}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0,17	-0,5
ε_{15}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0,17	0,33

Как видно из этой матрицы, ее элементы взяты с округлением. Отсюда можно получить максимальную погрешность выполнения основного правила нормировки, равную $3 \cdot 10^{-2}$, что соответствует относительной погрешности в 3 %. Так как это вычислительная погрешность, то в случае необходимости ее можно существенно уменьшить.

Получение последней матрицы позволяет не только качественно, но и предварительно количественно оценить влияние сигналов с различных мышц на соответствующие приводы протеза. Эту матрицу можно использовать как матрицу начальных значений весовых коэффициентов одного из слоев нейронной сети, используемой для управления приводами протеза. Этот слой, как отмечалось выше, отвечает за интеграцию сигналов, подаваемых на приводы

При этом элементы с одинаковыми знаками в столбце равны между собой.

Дополнительное правило позволяет определить механизм выполнения основного правила.

Используя дополнительное правило нормировки матрицы качественного влияния, получим матрицу, которую назовем матрицей количественного влияния.

протеза. Получение матрицы количественного влияния – это важный этап в расчете системы управления электромеханическим протезом. Ее использование существенно сократит время, затрачиваемое на процесс обучения управляющей нейронной сети.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Кобринский, А. А. Манипуляционные системы роботов: основы устройства, элементы теории / А. А. Кобринский, А. Е. Кобринский. – М.: Наука, 1985. – 344 с.
2. Юсевич, Ю. С. Очерки по клинической миографии / Ю. С. Юсевич. – М.: Наука, 1972. – 94 с.
3. Персон, Р. С. Мышцы – антагонисты в движениях человека / Р. С. Персон. – М.: Наука, 1965. – 108 с.
4. Поляков, А. В. Соотношение ЭМГ – сила при потенциации / А. В. Поляков // Бюллетень экспериментальной биологии и медицины. – 1987. – Т. 104. – № 11. – С. 521–523.

УДК 621.396.96 : 621.373

Г. Г. Личков, А. Я. Паринский

ИНФОРМАЦИОННО-ИЗМЕРИТЕЛЬНАЯ СИСТЕМА ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ НА ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ РАДИОЛОКАЦИОННЫХ ДАТЧИКАХ

г. Тула, ЗАО «Лимако»; ТулГУ

Рассматривается информационно-измерительная система, позволяющая дистанционно измерять форму поверхности и оценивать состав слоев диэлектрических объектов. Система может применяться для распознавания диэлектрических объектов.

We consider the information and measuring system that measure a surface form distantly and assess the composition of dielectric layers. The system can be used for dielectric objects detection.

Информационно-измерительная система (ИИС) структуры и свойств диэлектрических объектов является комплексным решением для автоматизации производственно-технологических процессов на предприятиях химической, нефтяной, атомной и ряда других отраслей. Система состоит из измерительных модулей, которые осуществляют дистанционное измерение структуры и параметров диэлектрических объектов. Измерительные модули соединяются посредством информационной линии с устройством отображения. Измерительный модуль состоит из радиолокационных датчиков уровня, таких как УЛМ-11 производства ЗАО «Лимако» (www.limaco.ru), объединенных в измерительную решетку. Датчики УЛМ-11 производятся серийно с 1997 года. Каждый датчик УЛМ-11 имеет взрывонепроницаемую оболочку 1ExdПВТ6, что позволяет монтировать его на резервуарах, содержащих взрывоопасные продукты. Датчик УЛМ-11 представляет собой радар с линейной частотной модуляцией (ЛЧМ), центральной частотой 94 ГГц и девиацией 1 ГГц. УМЛ-11 является интеллектуальным радиолокационным датчиком (ИРЛД), осуществляющим радиолокацию, расчет измеряемого параметра и коммуникацию по информационной линии. Данные функции осуществляются программным обеспечением ИРЛД параллельно. Структурная схема измерительного модуля, состоящего из датчиков УЛМ-11, приведена на рис. 1.

Измерительный модуль позволяет производить измерение структуры и оценивать состав слоев многослойного диэлектрического объекта. Таким объектом может быть нефть, образующая вследствие процессов разделения фракции даже при непродолжительном хранении. Измерительный модуль производит измерение толщины слоев и оценку их состава. Еще один тип измеряемого объекта – это сыпучий продукт, образующий неровную поверхность.

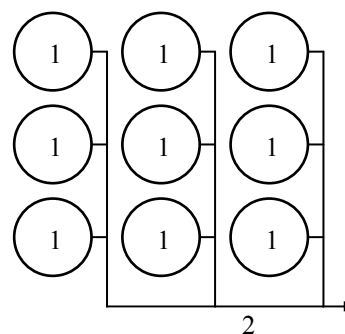


Рис. 1. Структурная схема измерительного модуля: 1 – датчик УЛМ-11; 2 – информационная линия

Таким типом продуктов являются различные порошкообразные соединения и зерно.

Топология измерительного модуля представляет собой сетку ИРЛД, регулярную, для измерения однородных поверхностей, и поверхностей, нерегулярность которых нестационарна во времени, либо нерегулярную для поверхностей, имеющих стационарные во времени нерегулярности. Для резервуара с сыпучим продуктом, имеющего область для загрузки продукта, в данной области необходимо более плотное размещение ИРЛД; сетка для данного применения должна быть нерегулярной.

Для точного измерения пространственной структуры слоя, имеющего неровные поверхности, необходимо выполнение условия линейности для участка поверхности границы раздела в области луча [1]:

$$\text{grad}(S) \cong \text{const} \quad (1)$$

где S – функция расстояния до области поверхности измерения, ограниченной лучом.

В случае, если условие (1) невыполнимо, необходимо использовать более высокочастотные ИРЛД с более узкой диаграммой направленности.

Информация о расстоянии до границы раздела слоев извлекается в процессе цифровой обработки принятого сигнала, спектр которого содержит информацию о каждой границе раз-

дела. Дистанции до первой границы (воздух – объект измерения) вычисляются непосредственно каждым ИРЛД. Данное значение сохраняется во внутреннем регистре и может быть получено в любой момент времени. Множество данного измерения всех ИРЛД измерительного модуля дает аппроксимацию внешней поверхности измеряемого объекта. Расстояние до следующей границы раздела может быть рассчитано, если известны параметры слоя, диэлектрическая проницаемость ϵ_r и тангенс угла потерь $\text{tg}\delta$ для рабочего диапазона частот ИРЛД. Если состав слоя заранее неизвестен и стоит задача распознавания состава слоя, в ИРЛД записывают параметры веществ (ϵ_r и $\text{tg}\delta$) в рабочем диапазоне частот ИРЛД, к множеству которых относится вещество слоя. Данное множество может быть изменено удаленно с помощью интерфейсной программы ИРЛД. По эталонным параметрам вещества ИРЛД рассчитывает принимаемый сигнал слоя для эталонного материала в ходе выполнения программы сравнения с эталоном.

Принимаемый сигнал имеет вид:

$$u_R(t) = \dot{U}_0 \exp\left(\left(-\frac{2\pi j}{\lambda_0} \sqrt{\epsilon_r \mu_r} \cdot L\right)(\text{tg}\delta + 2j)\right), \quad (2)$$

где λ_0 – длина рабочей волны в вакууме; L – толщина измеряемого слоя; параметры ϵ_r , μ_r и $\text{tg}\delta$ являются частотно-зависимыми.

Программа обработки ИРЛД вычисляет спектральное преобразование принятого сигнала согласно (3) и дальнейшее выделение из принятого спектра информации о границах раздела слоев измеряемого объекта:

$$U_R(k) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} u_R(n) \cdot w(n) \cdot e^{-j \frac{2\pi n}{N} k}, \quad (3)$$

где $w(n)$ – оконная функция (в текущей реализации ИРЛД используется функция Хемминга); N – число выборок сигнала.

Для задачи распознавания материала слоя, ИРЛД с помощью алгоритма адаптивной фильтрации осуществляет выделение спектральной части U'_R , соответствующей анализируемому слою. Затем ИРЛД рассчитывает корреляцию U'_K с синтезируемыми сигналами для эталонных слоев U_{REF} :

$$h_i = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} U'_R(n) \cdot U_{REF_i}(n), \quad (4)$$

где h_i – корреляция с эталоном i ; U_{REF_i} – синтезируемый эталонный сигнал для эталонного материала i .

Из рассчитанного множества значений ИРЛД выбирает максимальное значение h_i и

устанавливает во внутреннем регистре слоя соответствующий номер слоя i .

Для увеличения достоверности распознавания сходных веществ необходимо увеличивать девиацию ИРЛД, либо использовать в измерительном модуле модели ИРЛД, работающие в различных частотных диапазонах, что позволяет увеличить информацию, получаемую измерительной системой.

Еще одна задача, которую позволяет решать ИИС – это задача идентификации диэлектрических объектов. Для различающихся объектов спектр отраженного сигнала различен.

Для измерения n диэлектрических объектов одновременно необходимо использование n числа измерительных модулей. Измерительные модули соединяются с устройством управления посредством информационной линии. Функции устройства управления выполняет компьютер, PLC-контроллер, либо другое устройство, реализующее Modbus протокол, используемый ИРЛД для информационного обмена.

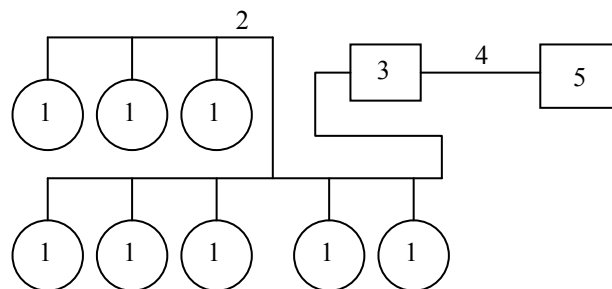


Рис. 2. Измерительная система с компьютером в качестве устройства управления:

1 – измерительный модуль; 2 – информационная линия; 3 – преобразователь RS-485/RS-232; 4 – соединительный кабель RS-232; 5 – компьютер

Соединение измерительных модулей и компьютера, используемого в качестве устройства управления в ИИС, показано на рис. 2. Каждый измерительный модуль может размещаться на отдельном объекте измерения. Также на одном объекте измерения может размещаться несколько модулей. Преобразователь интерфейсов 3 и соединительный кабель 4 используются в случае отсутствия у компьютера входа RS-485. Преобразователь интерфейсов 3 прозрачен для программного обеспечения ИРЛД и компьютера. Для сложной топологии информационной сети дополнительно могут использоваться повторители, позволяющие увеличить длину соединительных линий более 1200 м. Сегменты информационной линии могут соединяться последовательно, звездой, либо – комбинированно.

Устройство управления осуществляет конфигурирование ИРЛД, получение от них измеряемой информации, ее визуализацию (например, вывод на экран изображения поверхности измеряемого объекта) и хранение.

Спектральная информация о первой границе раздела связана с дальностью до границы следующим уравнением [2]:

$$L = \frac{c \cdot f_B \cdot T_S}{2 \cdot f_S}, \quad (5)$$

где f_S – частота девиации; T_S – время формирования частотной развертки; f_B – частота биений, выделяемая на смесителе.

В соответствии с (5), погрешность измерения составляет:

$$\delta L = \frac{1}{2f_S} \times \left(\delta c \cdot f_B T_S + c \cdot \delta f_B \cdot T_B + c f_B \cdot \delta T_B - c f_B T_B \cdot \frac{\delta f_S}{f_S} \right). \quad (6)$$

Поскольку нестабильность скорости света $\delta c \equiv 0$,

$$\delta L = \frac{c}{2f_S} \left(\delta f_B \cdot T_B + f_B \cdot \delta T_B - f_B T_B \cdot \frac{\delta f_S}{f_S} \right). \quad (7)$$

В связи с гаусовским распределением величин, входящих в (7),

$$\sigma_L = \sqrt{\delta f_B^2 + \delta T_B^2 + \delta f_S^2}. \quad (8)$$

При проведении измерений последующих границ раздела, в погрешность измерений включается ошибка измерения параметров слоев ε_r и $\text{tg} \delta$.

Абсолютная точность измерения ИРЛД УЛМ-11 расстояния до первой границы раздела составляет ± 1 мм; относительная точность ± 50 мкм для рабочего диапазон расстояний 30 м [3].

Благодаря высоким точностным характеристикам, надежности, возможности работать в

температурном диапазоне от -50 до $+50$ °С и своим экономическим характеристикам, ИРЛД получили широкое распространения на территории России и стран СНГ. Использование частотного диапазона 94 ГГц позволило уменьшить конструктивные размеры антенно-волноводного тракта. Благодаря чему уменьшилось значение составляющей ошибки измерения, связанной с изменением геометрических размеров антенно-волноводного тракта вследствие изменения температуры и эффекта старения материалов конструкции. Для повышения точности измерения ИРЛД содержит программу компенсации доплеровской помехи, возникающей, к примеру, при загрузке жидкости в резервуар. Данная программа может подстраиваться дистанционно устройством управления для различной динамики процесса изменения границы раздела.

Предлагаемая ИИС позволяет повысить точность выполняемых измерений и производить дополнительные дистанционные измерения внешних и внутренних поверхностей диэлектрических объектов, и состав образующих их слоев. Также ИИС позволяет производить измерение формы проводящей поверхности объекта. ИИС встраивается в существующие системы контроля технологических процессов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Новоселов, О. Н. Основы теории и расчета информационно-измерительных систем / О. Н. Новоселов. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Машиностроение, 1991. – 331 с.
2. Личков, Г. Г. Информационные проблемы передачи и повышения точности в системах измерения параметров многослойных сред на основе интеллектуальных радиолокационных датчиков. / Г. Г. Личков, А. Я. Паринский. – Москва, Труды РНТОРЭС им. А. С. Попова, выпуск LXII 2007 г. – С. 112–113.
3. Личков, Г. Г. Точностные характеристики информационно-измерительной системы параметров сред / Г. Г. Личков, А. Я. Паринский. Вестник ТулГУ. Сер. Радиотехника и радиооптика. Т. IX. – Тула: Изд-во ТулГУ, 2007. – С. 99–101.

УДК 621.372

М. В. Грецов, Н. В. Грецова

**РАСЧЕТ ВОЛНОВЫХ ЧИСЕЛ СЕГМЕНТНОГО ВОЛНОВОДА
С ДВУХСЛОЙНЫМ ЗАПОЛНЕНИЕМ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ**

Волгоградский государственный технический университет

С помощью метода конечных разностей и разбиения на частичные области получены дисперсионные кривые сегментного волновода с двухслойным заполнением.

With the help of a method of finite differences and the splittings into partial areas are obtained dispersion curves of the segment waveguide with two-layer filling.

Для практического применения любого волновода: правильного размещения возбуждающих, а также приемных элементов, правильного выбора спектра пространственных гармоник, необходимо знать дисперсионную характеристику волновода, структуру полей в его поперечном сечении и распределение мощности. С данной точки зрения больший интерес представляет не полый или полностью заполненный волновод, а волновод с частичным заполнением. Это связано с тем, что слои диэлектрика вводятся в волновод с целью формирования необходимой структуры поля и фазовой скорости волны. В электронных приборах слои диэлектрика часто используются в качестве замедляющей системы.

Рассмотрим волновод с подобным (слоистым) заполнением (рис. 1). Диэлектрические слои располагаются таким образом, что граница между ними параллельна плоской стенке волновода. Их параметры – ϵ_1, μ_1 и ϵ_2, μ_2 – абсолютные диэлектрические и магнитные проницаемости:

$$\epsilon_{1,2} = \epsilon_0 \epsilon_{r1,2}, \quad \mu_{1,2} = \mu_0 \mu_{r1,2}, \quad (1)$$

где $\epsilon_{r1,2}$ – относительная диэлектрическая проницаемость первого или второго слоя; $\mu_{r1,2}$ – относительная магнитная проницаемость; ϵ_0 – электрическая постоянная; μ_0 – магнитная постоянная.

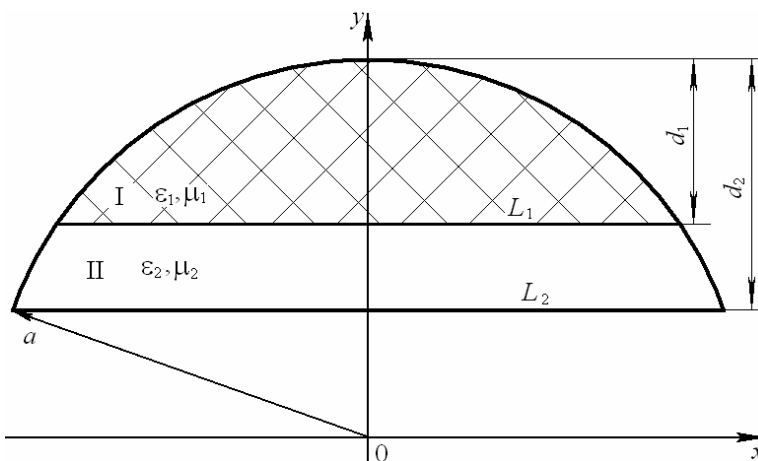


Рис. 1. Поперечное сечение сегментного волновода с двухслойным заполнением

Для решения задачи о распространении электромагнитных волн в сегментном волноводе с двухслойным заполнением воспользуемся методом частичных областей [1]. Выберем области, как показано на рис. 1, включающие в себя целиком один из слоев. В каждой области

необходимо решить двумерные уравнения Гельмгольца

$$\nabla_{\perp}^2 E_{z1,2} + g_{1,2}^2 E_{z1,2} = 0, \quad (2)$$

$$\nabla_{\perp}^2 H_{z1,2} + g_{1,2}^2 H_{z1,2} = 0, \quad (3)$$

дополненные граничными условиями – равенство нулю тангенциальных компонент напряженности электрического поля на металлическом контуре (полагаем проводник идеальным) и непрерывность тангенциальных компонент напряженностей электрического и магнитного полей на границе раздела диэлектрических сред [2]. Эти условия можно записать в виде:

$$E_{z1,2} = 0, \quad \frac{\partial H_{z1,2}}{\partial n} = 0, \quad \text{при } x^2 + y^2 = a^2 \quad \text{и} \quad y = a - d_2, \quad (4)$$

$$E_{z1} = E_{z2}, \quad H_{z1} = H_{z2}, \quad E_{x1} = E_{x2}, \quad H_{x1} = H_{x2} \quad \text{при } y = a - d_1. \quad (5)$$

Необходимые здесь поперечные компоненты полей $E_{x1,2}$ и $H_{x1,2}$ могут быть выражены через продольные компоненты $E_{z1,2}$ и $H_{z1,2}$ соотношениями

$$E_x = \frac{-i}{g^2} \left(h \frac{\partial E_z}{\partial x} + \omega \mu \frac{\partial H_z}{\partial y} \right), \quad (6)$$

$$H_x = \frac{i}{g^2} \left(\omega \varepsilon \frac{\partial E_z}{\partial y} - h \frac{\partial H_z}{\partial x} \right). \quad (7)$$

Здесь i – мнимая единица; ε , μ – абсолютные диэлектрическая и магнитная проницаемости соответствующей среды; ω – циклическая частота волны; g – поперечное волновое число (свое для каждой области); h – продольное вол-

новое число (одинаково в обеих областях, что следует из необходимости выполнения граничных условий при любом z). Продольное и поперечное волновые числа связаны между собой и с частотой ω следующим образом:

$$h^2 = \varepsilon_1 \mu_1 \omega^2 - g_1^2 = \varepsilon_2 \mu_2 \omega^2 - g_2^2. \quad (8)$$

Как видно из уравнений (6), (7), для выполнения граничных условий (5) необходимы одновременно отличные от нуля компоненты E_z и H_z . То есть, необходимо совместно решать уравнения (2) и (3), и решение будет иметь вид гибридной волны.

Разделение переменных можно произвести только при записи уравнений в ортогональной системе координат, но невозможно подобрать такую ортогональную систему координат, в которой поверхность волновода совпала бы с ее координатными поверхностями. Вследствие этого аналитическое решение задачи оказывается невозможным и возникает необходимость использования численных методов.

Используем для решения метод конечных разностей [3]. Воспользуемся нерегулярной сеткой. Разобьем вдоль оси y область II на N_{y2} отрезков, а область I – на N_{y1} отрезков (рис. 2). Тогда узлы с номерами $j = N_{y2}$ имеют координаты $y = a - d_1$ и попадают на границу раздела слоев, что удобно при записи граничных условий.

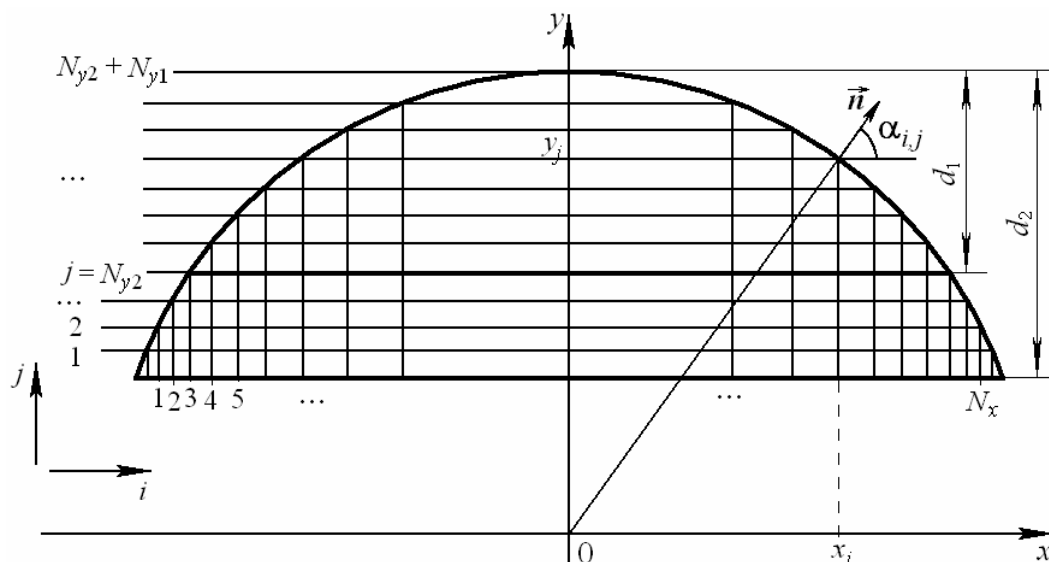


Рис. 2. Сетка и нумерация узлов для разностного метода в случае двухслойного заполнения

Конечно-разностная аппроксимация уравнений Гельмгольца для внутренних узлов областей I и II на нерегулярной сетке (пятиточеч-

ный крест) для напряженностей электрического и магнитного полей имеет вид:

в области I –

$$E_{i,j}^1 \left(g_1^2 - \frac{1}{(x_{i+1} - x_i)^2} - \frac{1}{(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})} - \frac{1}{(y_{j+1} - y_j)^2} - \frac{1}{(y_{j+1} - y_j)(y_j - y_{j-1})} \right) + \frac{E_{i-1,j}^1}{(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})} + \frac{E_{i+1,j}^1}{(x_{i+1} - x_i)^2} + \frac{E_{i,j-1}^1}{(y_{j+1} - y_j)(y_j - y_{j-1})} + \frac{E_{i,j+1}^1}{(y_{j+1} - y_j)^2} = 0, \quad (9)$$

$$H_{i,j}^1 \left(g_1^2 - \frac{1}{(x_{i+1} - x_i)^2} - \frac{1}{(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})} - \frac{1}{(y_{j+1} - y_j)^2} - \frac{1}{(y_{j+1} - y_j)(y_j - y_{j-1})} \right) + \frac{H_{i-1,j}^1}{(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})} + \frac{H_{i+1,j}^1}{(x_{i+1} - x_i)^2} + \frac{H_{i,j-1}^1}{(y_{j+1} - y_j)(y_j - y_{j-1})} + \frac{H_{i,j+1}^1}{(y_{j+1} - y_j)^2} = 0; \quad (10)$$

в области II –

$$E_{i,j}^2 \left(g_2^2 - \frac{1}{(x_{i+1} - x_i)^2} - \frac{1}{(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})} - \frac{1}{(y_{j+1} - y_j)^2} - \frac{1}{(y_{j+1} - y_j)(y_j - y_{j-1})} \right) + \frac{E_{i-1,j}^2}{(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})} + \frac{E_{i+1,j}^2}{(x_{i+1} - x_i)^2} + \frac{E_{i,j-1}^2}{(y_{j+1} - y_j)(y_j - y_{j-1})} + \frac{E_{i,j+1}^2}{(y_{j+1} - y_j)^2} = 0, \quad (11)$$

$$H_{i,j}^2 \left(g_2^2 - \frac{1}{(x_{i+1} - x_i)^2} - \frac{1}{(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})} - \frac{1}{(y_{j+1} - y_j)^2} - \frac{1}{(y_{j+1} - y_j)(y_j - y_{j-1})} \right) + \frac{H_{i-1,j}^2}{(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})} + \frac{H_{i+1,j}^2}{(x_{i+1} - x_i)^2} + \frac{H_{i,j-1}^2}{(y_{j+1} - y_j)(y_j - y_{j-1})} + \frac{H_{i,j+1}^2}{(y_{j+1} - y_j)^2} = 0. \quad (12)$$

Здесь E^k, H^k ($k = 1, 2$) – сеточные функции, соответствующие продольным компонентам напряженности электрического и магнитного поля, индексы 1 и 2 введены для удобства и обозначают область, к которой относятся эти значения сеточной функции; $g_{1,2}$ – поперечное волновое число в соответствующей области. Для узла (i, j) , лежащего на границе, из уравнения (4) можно записать:

$$E_{i,j}^{1,2} = 0 \quad (13)$$

на всем контуре поперечного сечения;

$$\frac{H_{i,j+1}^2 - H_{i,j}^2}{y_{j+1} - y_j} = 0 \quad (14)$$

на границе L_2 ;

$$\frac{H_{i+1,j}^{1,2} - H_{i,j}^{1,2}}{x_{i+1} - x_i} \cos(\alpha_{i,j}) + \frac{H_{i,j}^{1,2} - H_{i,j-1}^{1,2}}{y_j - y_{j-1}} \sin(\alpha_{i,j}) = 0 \quad (15)$$

при $x^2 + y^2 = a^2$ и $x \geq 0$;

$$\frac{H_{i,j}^{1,2} - H_{i-1,j}^{1,2}}{x_i - x_{i-1}} \cos(\alpha_{i,j}) + \frac{H_{i,j}^{1,2} - H_{i,j-1}^{1,2}}{y_j - y_{j-1}} \sin(\alpha_{i,j}) = 0 \quad (16)$$

при $x^2 + y^2 = a^2$ и $x < 0$.

Здесь $\alpha_{i,j}$ – угол между ортом внешней нормали к контуру и осью x в узле с номером i, j (рис. 2). С учетом выбранного, как показано на рисунке, начала отсчета, можно записать:

$$\cos(\alpha_{i,j}) = \frac{x_i}{a}, \quad \sin(\alpha_{i,j}) = \frac{y_j}{a}. \quad (17)$$

На границе L_1 из (5) с учетом (6), (7) получим:

$$E_{i,j}^1 = E_{i,j}^2, \quad H_{i,j}^1 = H_{i,j}^2, \quad \text{при } j = N_{y2}; \quad (18)$$

$$\frac{1}{g_1^2} \left(h \frac{E_{i+1,j}^1 - E_{i,j}^1}{x_{i+1} - x_i} + \omega \mu_1 \frac{H_{i,j+1}^1 - H_{i,j}^1}{y_{j+1} - y_j} \right) = \frac{1}{g_2^2} \left(h \frac{E_{i+1,j}^2 - E_{i,j}^2}{x_{i+1} - x_i} + \omega \mu_2 \frac{H_{i,j}^2 - H_{i,j-1}^2}{y_j - y_{j-1}} \right), \quad (19)$$

при $j = N_{y2}, i < N_y - 1$;

$$\begin{aligned} & \frac{1}{g_1^2} \left(h \frac{E_{i,j}^1 - E_{i-1,j}^1}{x_i - x_{i-1}} + \omega \mu_1 \frac{H_{i,j+1}^1 - H_{i,j}^1}{y_{j+1} - y_j} \right) = \\ & = \frac{1}{g_2^2} \left(h \frac{E_{i,j}^2 - E_{i-1,j}^2}{x_i - x_{i-1}} + \omega \mu_2 \frac{H_{i,j}^2 - H_{i,j-1}^2}{y_j - y_{j-1}} \right), \quad (20) \end{aligned}$$

при $j = N_{y2}$, $i > N_y - 1$;

$$\begin{aligned} & \frac{1}{g_1^2} \left(h \frac{E_{i+1,j}^1 - E_{i-1,j}^1}{x_{i+1} - x_{i-1}} + \omega \mu_1 \frac{H_{i,j+1}^1 - H_{i,j}^1}{y_{j+1} - y_j} \right) = \\ & = \frac{1}{g_2^2} \left(h \frac{E_{i+1,j}^2 - E_{i-1,j}^2}{x_{i+1} - x_{i-1}} + \omega \mu_2 \frac{H_{i,j}^2 - H_{i,j-1}^2}{y_j - y_{j-1}} \right), \quad (21) \end{aligned}$$

при $j = N_{y2}$, $i = N_y - 1$;

$$\begin{aligned} & \frac{1}{g_1^2} \left(\omega \varepsilon_1 \frac{E_{i,j+1}^1 - E_{i,j}^1}{y_{j+1} - y_j} - h \frac{H_{i+1,j}^1 - H_{i,j}^1}{x_{i+1} - x_i} \right) = \\ & = \frac{1}{g_2^2} \left(\omega \varepsilon_2 \frac{E_{i,j}^2 - E_{i,j-1}^2}{y_j - y_{j-1}} - h \frac{H_{i+1,j}^2 - H_{i,j}^2}{x_{i+1} - x_i} \right), \quad (22) \end{aligned}$$

при $j = N_{y2}$, $i < N_y - 1$;

$$\begin{aligned} & \frac{1}{g_1^2} \left(\omega \varepsilon_1 \frac{E_{i,j+1}^1 - E_{i,j}^1}{y_{j+1} - y_j} - h \frac{H_{i,j}^1 - H_{i-1,j}^1}{x_i - x_{i-1}} \right) = \\ & = \frac{1}{g_2^2} \left(\omega \varepsilon_2 \frac{E_{i,j}^2 - E_{i,j-1}^2}{y_j - y_{j-1}} - h \frac{H_{i,j}^2 - H_{i-1,j}^2}{x_i - x_{i-1}} \right), \quad (23) \end{aligned}$$

при $j = N_{y2}$, $i > N_y - 1$;

$$\begin{aligned} & \frac{1}{g_1^2} \left(\omega \varepsilon_1 \frac{E_{i,j+1}^1 - E_{i,j}^1}{y_{j+1} - y_j} - h \frac{H_{i+1,j}^1 - H_{i-1,j}^1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) = \\ & = \frac{1}{g_2^2} \left(\omega \varepsilon_2 \frac{E_{i,j}^2 - E_{i,j-1}^2}{y_j - y_{j-1}} - h \frac{H_{i+1,j}^2 - H_{i-1,j}^2}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right), \quad (24) \end{aligned}$$

при $j = N_{y2}$, $i = N_y - 1$.

Здесь $N_y = N_{y1} + N_{y2}$; уравнения (19)–(21) записаны, исходя из условия непрерывности тангенциальной компоненты напряженности электрического поля; уравнения (22)–(24) – магнитного поля. Используя (18), из выражений (19)–(21) и (22)–(24) удобно выразить $H_{i,j}^{1,2}$ и $E_{i,j}^{1,2}$ – продольные компоненты напряженностей электрического и магнитного полей в узлах, лежащих на границе диэлектрических слоев. Система уравнений (9)–(24) представляет собой конечно-разностную аппроксимацию краевой задачи (2)–(5).

Таким образом, можно исключить узлы, лежащие на границе, и получить выражения

для внутренних узлов, которые не приводятся в силу их громоздкости.

Обозначим через N_x максимальный номер i внутреннего узла вдоль координатной оси x . Он вычисляется согласно выражению

$$N_x = 2N_y - 3. \quad (25)$$

Координаты узлов x_i и y_j вычисляются следующим образом:

$$y_j = a - d_2 + \frac{d_2 - d_1}{N_{y2}} j, \quad \text{при } j \leq N_{y2},$$

$$y_j = a - d_1 + \frac{d_1}{N_{y1}} (j - N_{y2}), \quad \text{при } j > N_{y2},$$

$$x_i = -\sqrt{a^2 - y_{i+1}^2}, \quad \text{при } i \leq (N_y - 1),$$

$$x_i = \sqrt{a^2 - y_{N_x - i + 1}^2}, \quad \text{при } i > (N_y - 1). \quad (26)$$

Здесь d_1 , d_2 – высоты сегмента и его части, заполненной первой средой.

Введем нормированные координаты, волновые числа, частоту:

$$\begin{aligned} \bar{x}_i &= \frac{x_i}{a}, \quad \bar{y}_j = \frac{y_j}{a}, \quad \bar{g} = g \cdot a, \quad \bar{h} = h \cdot a, \\ \bar{\omega} &= a \cdot \omega \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}. \quad (27) \end{aligned}$$

Это позволяет перейти к уравнениям с нормированными коэффициентами при сеточной функции, что удобно также в том плане, что значимыми для расчета становятся только пропорции исследуемого устройства, а не его реальные размеры.

Вводя сквозную нумерацию внутренних узлов, получаем однородную систему из $2N$ уравнений для гибридных волн относительно значений сеточных функций E_k и H_{k+N} ($N = (N_y - 1)^2 - N_y - N_{y1} + 3$ – количество внутренних узлов). Нетривиальные решения возможны только тогда, когда главный определитель этой системы равен нулю. Отсюда находится зависимость нормированного продольного волнового числа \bar{h} от нормированной частоты $\bar{\omega}$.

На рис. 3–5 приведены дисперсионные кривые сегментного волновода с различными значениями относительной диэлектрической проницаемости первой области. При этом относительная диэлектрическая проницаемость второй области остается постоянной и равной единице. На рис. 4–5 заметен большой изгиб дисперсионных кривых по сравнению с рис. 3, на котором, по сути, представлены дисперсионные кривые полого волновода. Кроме того, на рис. 4–5 видно пересечение некоторых кри-

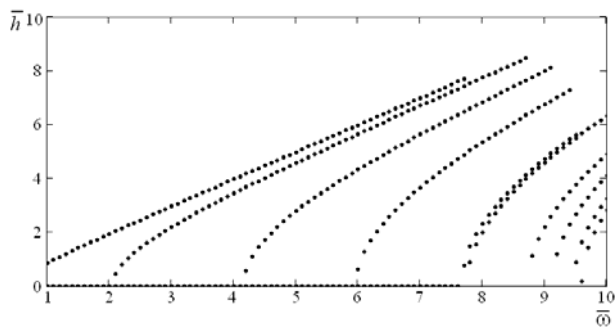


Рис. 3. Дисперсионные кривые сегментного волновода при $\epsilon_{r1} = 1,0$

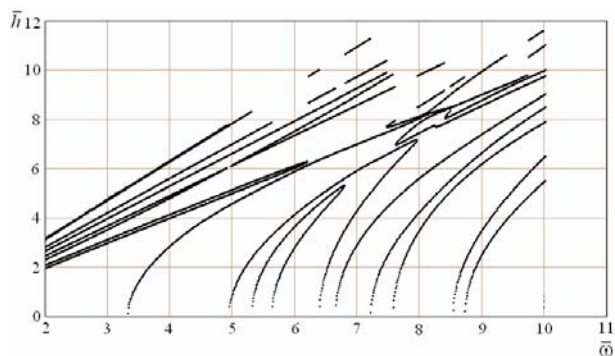


Рис. 4. Дисперсионные кривые сегментного волновода при $\epsilon_{r1} = 3,0$

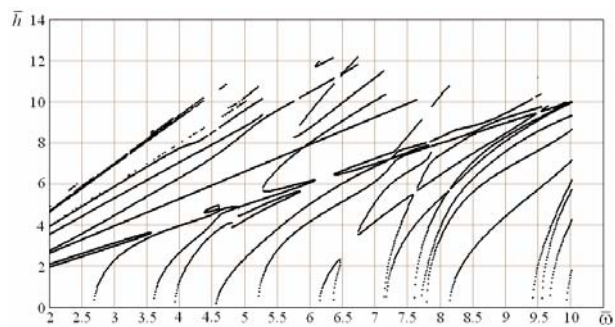


Рис. 5. Дисперсионные кривые сегментного волновода при $\epsilon_{r1} = 7,0$

вых, чего нет на рис. 3. Это говорит о том, что наличие диэлектрического слоя приводит к появлению диапазонов частот, при которых наблюдается вырождение некоторых типов волн. Из сравнения рис. 3–5 следует, что общая картина смещается влево, то есть в сторону уменьшения частоты. С точки зрения физики процесса, такой результат является ожидаемым, следовательно, можно сделать вывод, что разработанный алгоритм корректно описывает поставленную задачу и позволяет получить достоверные данные о системе. Кроме того, на рис. 4–5 видны области параметров, при которых в системе существуют быстрые и медленные волны (быстрые – в случае $\bar{\omega} > \bar{h}$, медленные – при $\bar{\omega} < \bar{h}$), что представляется очень важным для использования сегментного волновода с двухслойным заполнением в качестве замедляющей системы.

Таким образом, представленная методика расчета сегментного волновода с двухслойным заполнением с использованием метода конечных разностей и разбиением на частичные области позволяет произвести расчет режима работы волновода; на основании анализа дисперсионных кривых определить фазовую скорость волны (см. рис. 4–5); осуществить подбор толщины слоя диэлектрика и его диэлектрической проницаемости с целью получения требуемого режима работы.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Волноводы с поперечным сечением сложной формы [Текст] / под ред. В. М. Седых. – Харьков: Вища школа, 1979. – 128 с.
2. Никольский, В. В. Электродинамика и распространение радиоволн [Текст] / В. В. Никольский, Т. И. Никольская. – М.: Наука, 1989. – 544 с.
3. Самарский, А. А. Численные методы [Текст] / А. А. Самарский, А. В. Гулин. – М.: Наука, 1989. – 420 с.

УДК 681.7.068:621.391.63

Н. В. Стерлигов, В. В. Кальников, В. В. Малов, А. П. Максимов

ВЫСОКОСКОРОСТНАЯ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКАЯ ЛИНИЯ ПЕРЕДАЧИ С КОМПЕНСАЦИЕЙ ВНУТРИКАНАЛЬНЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ ЭФФЕКТОВ

Ульяновское высшее военное инженерное училище связи (военный институт)

Для компенсации внутриканальной помехи в высокоскоростной волоконно-оптической линии передачи с применением систем спектрального мультиплексирования предложен новый метод, основанный на использовании методики формирования и обработки кодо-временных сложных сигналов на основе E-кодов (кодов Велти). Предлагаемый метод осуществляется за счет выделения и компенсации внутриканальной помехи при условии применения ортогональных по кодовой структуре четверично-кодированных последовательностей.

To indemnify an intra-channel interference in a high-speed fibre-optical line of transfer with application of spectral multiplexing systems a new method based on the use of a technique of formation and processing of code-time complex signals on the basis of E-codes (Welty codes) is suggested. A suggested method is carried out due to allocation and indemnity of an intra-channel interference under the condition of the quaternary-coded sequences application which are orthogonal on code structure.

Единая сеть связи Российской Федерации является одной из самых динамично развивающихся отраслей экономики. В настоящее время кабельная составляющая сети, в особенности магистральные и зональные ее участки, полностью выполнена на основе оптических кабелей. Для удовлетворения непрерывно растущих потребностей в увеличении пропускной способности сетей связи РФ интенсивно внедряются системы передачи с временным уплотнением – системы синхронной цифровой иерархии различных ступеней – СТМ-1, СТМ-4, СТМ-16, СТМ-64, а также СТМ-256 (40 Гбит/с), являющейся предельной для электронных методов обработки сигналов. В этих системах перечисленные цифровые потоки передаются на одной оптической несущей с определенной длиной волны.

Дальнейшее повышение скорости передачи возможно с помощью технологии спектрального мультиплексирования WDM (мультиплексирование с разделением по длине волны) и ее дальнейшего развития – DWDM (плотное мультиплексирование с разделением по длине волны). При DWDM-технологии возникают нелинейные искажения, и большое значение приобретает дисперсия. Поэтому для технологии DWDM необходимо весьма дорогостоящее оптическое волокно (ОВ) с нулевой смещенной дисперсией. Также, при одновременном использовании многих источников их выходная суммарная мощность не может превысить допустимого для ОВ порога (19 дБм), следовательно, мощность сигнала на каждой несущей снижается пропорционально числу источников. Поэтому для магистральных линий DWDM точки усиления необходимо располагать гораздо чаще (через 40–80 км), чем при одноволновой передаче (через 100 км). Для этого применяются оптические усилители (ОУ) на основе ОВ, легированного эрбием. Они могут усиливать сигнал на 10–30 дБ, но неизбежно ухудшают соотношение сигнал/шум в ОВ. Шумы накапливаются от ОУ к ОУ, в результате соотношение сигнал/шум падает после каждого усилителя и примерно через 1000 км оказывается на уровне порогового значения фотопри-

емника при заданной вероятности ошибок, и сигнал необходимо регенерировать.

Таким образом, возникает проблема проектирования высокоскоростной волоконно-оптической линии передачи (ВОЛП) с увеличенной длиной регенерационного участка. Одним из перспективных направлений решения этой проблемы является внедрение алгоритмов и методик, основанных на кодо-временном формировании и обработке сложных сигналов.

Увеличение длины регенерационного участка и повышение помехоустойчивости ВОЛП предлагается за счет применения сложных сигналов на основе E-кодов (кодов Велти) [1]. При этом основным достоинством предлагаемых сложных сигналов является то, что они не имеют боковых выбросов в апериодической автокорреляционной функции.

Техническая реализация линии передачи высокоскоростного цифрового оптического сигнала [2] может быть построена на основе циклических сдвигов информационной последовательности и наложении на них одного и того же E-кода, в виде фазоманипулированной (ФМ) последовательности, в которой начальные фазы элементов E-кода принимают значения: $\Delta\varphi_\alpha=0$; $\Delta\varphi_\beta=\pi$; $\Delta\varphi_\gamma=\pi/2$; $\Delta\varphi_\delta=3\pi/2$.

Линия передачи [2] состоит из двух каналов формирования оптических сигналов, которые объединяются на выходе передающей части. Сложный сигнал на выходе передающей части можно представить в следующем виде:

$$U = \sum_{j=1}^N u_j \cos(2\pi ft + \Delta\varphi_\alpha) + \sum_{j=1}^N u_j \cos(2\pi ft + \Delta\varphi_\beta) + \sum_{j=1}^N u_j \cos(2\pi ft + \Delta\varphi_\gamma) + \sum_{j=1}^N u_j \cos(2\pi ft + \Delta\varphi_\delta),$$

где N – длина кодирующей комбинации E-кода; u_j – амплитуда j -го элемента информационной последовательности.

Данный метод формирования позволяет сформировать сложный сигнал без расширения его спектра.

На приемной части в согласованном фильтре происходит когерентная свертка элементов сложного сигнала на оптическом уровне, что позволяет увеличить амплитуду оптического сигнала на входе фотодетектора в N раз.

Свернутые оптические сигналы на входах каналов обработки можно представить в следующем виде:

$$U = U_c \cos(2\pi ft + \Delta\varphi_\alpha) + U_c \cos(2\pi ft + \Delta\varphi_\beta).$$

Вследствие того, что элементы Е-кода α и β ортогональны γ и δ то на выходах соответствующих каналов обработки оптического сигнала отклики на «чужие» сигналы равны нулю, то есть на выходе первого канала обработки $U_\beta=0$, $U_\gamma=0$, $U_\delta=0$, а на выходе второго канала обработки $U_\alpha=0$, $U_\gamma=0$, $U_\delta=0$.

Анализ технической реализации линии передачи высокоскоростного цифрового оптического сигнала [2] показывает, что возможно формирование и обработка сложного сигнала с использованием спектрального разделения: $\alpha=\lambda_1$; $\beta=\lambda_2$; $\gamma=\lambda_3$; $\delta=\lambda_4$.

Таким образом, проведенная оценка показала, что при применении сложных сигналов на основе Е-кодов (кодов Велти) возможно увеличение длины регенерационной секции ВОЛП или повышение помехоустойчивости ВОЛП при заданной длине линии.

Однако при использовании предлагаемой ВОЛП совместно с технологией мультиплексирования с разделением по длине волны (даже при сравнительно малых мощностях в каждом из спектральных каналов) начинают проявляться основные типы нелинейных эффектов [3]:

- вынужденное рассеяние излучения на акустических волнах (в зависимости от вида колебаний – Манделъштама – Бриллюэна или Рамана); нелинейное преломление, и как результат его действия – фазовая само- и кросс-модуляция;

- модуляционная неустойчивость, проявляющаяся во временном представлении в виде «световых нитей» на импульсах, а в спектральном представлении – как уширение спектра импульсов;

- нелинейное поглощение, с одной стороны, характеризующееся многофотонным затуханием на резонансах, с другой – просветлением среды в интенсивном световом поле;

- параметрические процессы, связанные с возможной генерацией кратных гармоник по отношению к частоте входного излучения.

Совместно их негативное проявление в приложении к телекоммуникационным задачам приводит:

- к откатке энергии от частоты входного излучения, что уменьшает динамический диапа-

зон сигнала. Вследствие этого происходит снижение отношения «сигнал/шум» в цифровой системе передачи в данном канале;

- засорению соседних каналов, уплотненных по длине волны, гармониками на близких частотах к частоте излучения, в результате чего появляется тот или иной нелинейный эффект. Имеет место снижение отношения «сигнал/шум» в смежных каналах;

- искажению формы информационного сигнала, передаваемого на частоте входного излучения (вызывающего нелинейный эффект) или в соседних WDM-каналах. Появляющиеся искажения ведут к нарушению работы устройства принятия решения в приемнике из-за неправильного считывания цифрового импульса, соответственно, увеличивают вероятность битовой ошибки.

Наибольшее негативное воздействие из перечисленных нелинейных эффектов на достоверность передаваемых сообщений оказывает модуляционная неустойчивость и четырехволновое смешение. При этом результатом модуляционной неустойчивости во временной области являются короткоживущие (время жизни $10^{-11} \dots 10^{-13}$ с) узкие области весьма сильного светового поля, в которых напряженность электрического поля достигает величин порядка 10^9 В/м – так называемые световые нити. Для высокоскоростной передачи цифровой информации время жизни этих нитей оказывается сравнимо с длительностью сигнального импульса [3].

Результатом четырехволнового смешения является появление излучения на близкой длине волны по отношению к смешиваемым длинам волн. В системах плотного спектрального мультиплексирования DWDM, обладающих широким спектром группового сигнала, генерируемое в результате нелинейного эффекта излучение может оказаться в каком-либо информационном канале, что и вызывает внутриканальную помеху. Такие помехи, как правило, обладают свойством кумулятивности, т. е. их уровень, как по амплитуде, так и по ширине спектра, может накапливаться по мере распространения сигнала вдоль световодной системы.

При передаче сложных оптических сигналов на основе четверично-кодированных последовательностей в системах мультиплексирования с разделением по длинам волн за счет проявления нелинейных эффектов может возникнуть снижение достоверности передавае-

мых сообщений. Следовательно, для обеспечения работоспособности волоконно-оптической линии передачи и расширения области ее применения необходимо повысить ее помехозащищенность от нелинейных эффектов методом компенсации помех.

В настоящее время в оптических сетях связи, с применением систем спектрального мультиплексирования DWDM, для подавления внутриканальной помехи используют WDM-фильтры на основе двухрезонаторного интерферометра Фабри – Перо с узкой спектральной характеристикой – заметно уже (в 5...10 раз) ширины спектрального канала. Последнее требование связано с тем, что подавлению подлечит не весь сигнал спектрального канала, а лишь узкая его часть [4].

Однако данный метод компенсации внутриканальной помехи имеет следующие недостатки:

- при компенсации помехи происходит уменьшение энергетика полезного сигнала за счет того, что при этой процедуре вместе с помехой «вырезается» и часть полезного сигнала;
- компенсация помехи возможна только в случае, когда помеха накладывается на часть спектра полезного сигнала, а в случае, когда она перекрывает центральную часть спектра сигнала, компенсация невозможна;
- требуется точная подстройка под помеху, а в случае плавающей помехи и изменения ширины ее спектра – управляемая перестройка компенсатора.

Для компенсации внутриканальной помехи предлагается использовать новый метод, основанный на использовании методики формирования и обработки кодо-временных сложных сигналов на основе E-кодов (кодов Велти) [5].

Предлагаемый метод осуществляется за счет выделения и компенсации внутриканальной помехи на оптическом уровне при условии применения ортогональных по кодовой структуре четверично-кодированных последовательностей. При этом предлагается на приемной стороне после формирования первой и второй дополнительных последовательностей, осуществлять одновременную, независимую корреляционную свертку суммы сложного сигнала и внутриканальной помехи, что обеспечивает декорреляцию внутриканальной помехи и ее компенсацию из суммарного значения четверично-кодированной информационной последовательности и внутриканальной помехи.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Welti, G. R.* Quaternary Codes for Pulsed Radar / *G. R. Welti* // *IRE Trans.* – 1960. – Vol. 6, № 3. – P. 400–408.
2. Пат. 2286647 Российская Федерация, МПК⁸ Н 04 В 10/00. Линия передачи цифрового оптического сигнала / Бережной С. Л., Кальников В. В., Калинычев О. В., Агеев С. А., Бодров С. А., Егоров Ю. П.; заявитель и патентообладатель ФГУП НПО «Марс». – № 2005110724/09; заявл. 12.04.05; опубл. 27.10.06, Бюл. № 30. – 16 с.
3. *Султанов, А. Х.* Волоконно-оптические системы передачи: вопросы оценки работоспособности / *А. Х. Султанов, Р. Г. Усманов, И. А. Шарифгалиев, И. Л. Виноградова.* – М.: Радио и связь, 2005. – 373 с.
4. *Султанов, А. Х.* Фильтр для сетей плотного волнового мультиплексирования на основе двухрезонаторного интерферометра Фабри-Перо / *А. Х. Султанов, Р. Г. Усманов, И. Л. Виноградова* // *Датчики и системы.* – 2002. – № 7. – С. 10–18.
5. Пат. 2273961 Российская Федерация, МПК⁸ Н 04 L 27/26. Устройство для приема четверично-кодированных последовательностей / *С. Л. Бережной, В. В. Кальников, О. В. Калинычев, С. А. Агеев, С. А. Бодров, Ю. П. Егоров;* заявитель и патентообладатель ФГУП НПО «Марс». – № 2004124331/09; заявл. 09.08.04; опубл. 10.04.06, Бюл. № 10. – 22 с.

Научное издание

ИЗВЕСТИЯ
Волгоградского государственного технического университета
№ 3(51), 2009 г.

С е р и я «ЭЛЕКТРОНИКА, ИЗМЕРИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА, РАДИОТЕХНИКА И СВЯЗЬ»
(Выпуск 3)

Межвузовский сборник научных статей

Редактор *Л. Н. Рыжих*
Техн. редактор *В. И. Фишер*
Компьютерная верстка *Е. В. Макаровой*

Темплан 2009 г. Поз. № 72.
Подписано в печать 18.05.2009. Формат 60×84 1/8. Бумага офсетная.
Гарнитура Times. Печать офсетная. Усл. печ. л. 11,63. Уч.-изд. л. 9,38.
Тираж 200 экз. Заказ

Волгоградский государственный технический университет.
400131, Волгоград, просп. им. В. И. Ленина, 28, корп. 1.

Отпечатано в типографии ВолгГТУ.
40013, Волгоград, просп. им. В. И. Ленина, 28, корп. 7.

В сборнике научных статей "Известия ВолгГТУ", серии "Электроника, измерительная техника, радиотехника и связь" публикуются статьи, которые содержат результаты теоретических и экспериментальных исследований и представляют научный и практический интерес для широкого круга специалистов в области электродинамики, электроники, измерительной техники.

Вопрос об опубликовании статьи или ее отклонении решает редакционная коллегия сборника, которая утверждается ректором университета, ее решение является окончательным. Редакция направляет представленный для издания материал на рецензирование.

Рукопись должна быть набрана и сверстана в текстовом редакторе Word и распечатана на лазерном принтере в режиме полной загрузки тонера. Формат бумаги А4 (210×297 мм).

Для ускорения подготовки издания необходимо представлять файлы статей на дискетах или компакт-дисках (CD) в полном соответствии с распечатанным оригиналом. Дискета должна быть вложена в отдельный конверт, на этикетке дискеты указываются фамилии авторов статьи.

При наборе текста следует соблюдать следующие требования: поля – верхнее – 2,0 см, нижнее – 3,0 см, левое – 2,5 см, правое – 2,5 см; шрифт Times, кегль 14, интервал полуторный.

Текст набирается с применением автоматического переноса слов, перед знаками препинания (в том числе внутри скобок) пробелы не допускаются, после них ставится один пробел. Разрядка слов не допускается, следует избегать перегрузки статей большим количеством формул, рисунков, таблиц. Для набора символов в формульном редакторе MS Equation (MS Word) использовать установки (Стиль/Размеры) только по умолчанию; рисунки должны быть выполнены в редакторах векторной графики, таких как CorelDRAW или в любом приложении к Word. Допускается сканирование рисунков в программе Microsoft Photo Editor.

Инициалы и фамилия автора (авторов) пишутся над заглавием статьи. Ниже заглавия, перед основным текстом, указывается организация или предприятие, в котором работает автор статьи. В конце статьи ставится полное название учреждения, которое рекомендует статью для публикации, дата и подпись автора (всех авторов).

Литературные ссылки должны быть оформлены в соответствии с ГОСТ 7.1–2003 "Библиографическая запись. Библиографическое описание. Общие требования и правила составления". Библиографический список использованной литературы, составленный в порядке упоминания в тексте, дается в конце статьи; связь с основным текстом осуществляется цифровым порядковым номером в квадратных скобках в строке. Подстрочные ссылки не допускаются.

Иностранные фамилии и термины в тексте следует приводить в русском переводе. В библиографическом списке фамилии авторов, полное название книг и журналов приводится на языке оригинала.

Ссылки на неопубликованные работы не допускаются.

При обозначении единиц физических величин должна применяться Международная система единиц (СИ).

Объем статьи не должен превышать 8 страниц бумаги формата А4, включая таблицы и библиографический список; число рисунков – не более четырех, включая рисунки, помеченные буквами *a*, *b*, и т. д. Рекомендуется включать в сборник статьи с авторским коллективом не более четырех человек с участием каждого автора в одной–двух статьях.

Статьи должны представлять сжатое четкое изложение результатов, полученных автором без повторов приводимых данных в тексте статьи, таблицах и рисунках. К статье должны быть приложены: сведения об авторах (полное имя, отчество, фамилия, ученая степень, звание, домашний адрес, номер телефона служебный, домашний, E-mail), документация, подтверждающая возможность ее открытого опубликования.