

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ УКРАЇНИ

ISSN 0453-8048

Вісник
Харківського
державного
університету

№440

Серія "Фізика"

Харків 1999

Вестник Харьковского государственного университета
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ УКРАЇНИ

серия "Физика", выпуск 3, 1999

ISSN 0453-8048

Вісник
Харківського
державного
університету

№440

Серія "Фізика"

Випуск 3

Харків 1999

УДК 530.1/539.8

Вісник містить статті, присвячені сучасному стану в галузі фізики.

Для науковців, викладачів ВУЗів, аспірантів та студентів фізичних спеціальностей.

Редакційна колегія:

докт. фіз.-мат. наук, проф. Лебедев В.П. (головний редактор)
докт. фіз.-мат. наук, проф. Гладких М.Т. (заступник головного редактора)
докт. фіз.-мат. наук, проф. Ульянов В.В. (заступник головного редактора)
докт. фіз.-мат. наук, проф. Мацокін В.П. (відповідальний секретар)
докт. фіз.-мат. наук, проф. Андронов В.М.
докт. фіз.-мат. наук, проф. Агеев Л.О.
докт. фіз.-мат. наук, проф. Бойко Ю.І.
докт. фіз.-мат. наук, проф. Зиман З.З.
докт. фіз.-мат. наук, проф. Єрмолаєв О.М.
докт. фіз.-мат. наук, проф. Мерісов Б.О.
докт. фіз.-мат. наук, проф. Мілославський В.К.
докт. фіз.-мат. наук, проф. Оболенський М.О.
докт. фіз.-мат. наук, проф. Попков Ю.А.
докт. фіз.-мат. наук, проф. Сіренко А.Ф.

Друкується за рішенням Вченої Ради університету від 24.09.99.
Протокол №7.

Адреса редакції:

Україна, 310077, Харків, майдан Свободи, 4,
Харківський державний університет,
фізичний факультет.

Ж-14038

ХНУ ім. В.Н.Каразіна

17327791

© Харківський державний університет

Содержание

Посвящается 80-летию со дня рождения Бориса Иеремиевича Веркина.....	5
Ю.В. Василевская, В.В. Ульянов. К теории квантовых ангармонических осцилляторов	7
Н.В. Глейзер, А.М. Ермолаев, Г.И. Рашиба, Бабак Хакики. Поглощение плазмонов заряженными частицами в двумерном электронном газе	13
В.В. Слёзов, Ю.И. Бойко, В.М. Апальков, Х. Ворх. Температура магнитного упорядочения в тонких магнитных плёнках.	16
А.М. Ермолаев, Н.В. Ульянов. Коллективные и одночастичные возбуждения спиновой системы неферромагнитных металлов с квазилокальными состояниями электронов	22
А.С. Ковалёв, Я.Е. Прилепский. Нормальные моды конечномерной спиновой системы со свободной границей в вихревой конфигурации	25
И.В. Герасимчук, А.С. Ковалёв. Локализация оптических пучков в системе нелинейных волноводов	32
А.П. Волченко. К вопросу о реализации четырёхмерного псевдоевклидова пространства $E_{(1,3)}^4$	36
Л.А. Агеев, В.К. Милославский, Арашмид Нагал. Запись поляризации света, создаваемой анизотропными кристаллами, посредством фотоиндуцированного дихроизма в светочувствительных плёнках	43
А.П. Овчаренко. Согласование интерференционных систем с обрамляющими средами.....	48
А.В. Ванькевич, Ю.А. Попков, И.А. Таранова. Комбинационное рассеяние света в смешанных кристаллах $K_{1-x}(NH_4)_xH_2PO_4$: анализ колебательного спектра в параэлектрической фазе	52
Ю.В. Рубін. Спектроскопічні властивості та електронна структура 6-тіопурину	58
В.Г. Сенчишин. Фундаментальные оптические потери в прозрачных полимерных матрицах	62
М.В. Ткаченко, І.Г. Іванов, З.З. Зиман. Синтез гідроксиапатиту поєднанням хімічної та твердофазної реакцій.....	67
В.С. Криловський, В.П. Лебедєв, В.М. Пінто Сімоєс. Деформуюче напруження і дефектна структура сплавів системи Pb-In при навантаженні у нормальному і надпровідному станах	70
В.Ф. Коршак, В.М. Аржавітін, О.С. Розумний. Зміна модуля Юнга надпластичного сплаву Pb-62%Sn в умовах деформування	76
В.П. Пойда, В.В. Брюховецький, Р.И. Кузнецова. Влияние исходной волокнистой структуры на структурную сверхпластичность сплава 1420	80
В.В. Брюховецький, В.П. Пойда, Р.И. Кузнецова, В.М. Андронов. Высокоскоростная сверхпластичность крупнозернистого сплава Al - 4 мас.% Cu	85
Е.Е. Бадиян, А.Г. Тонкопряд, Н.А. Сахарова, О.В. Шеховцов. О форме и протяжённости тройных стыков границ зёрен в поликристаллах	89
В.П. Мацюкин, Г.А. Петченко. Задемпфированный дислокационный резонанс в монокристаллах бромистого калия	93
В.М. Андронов, Н.Я. Рохманов. Неупругость ОЦК твёрдых растворов внедрения с примесями замещения	97
Н.Я. Рохманов, В.М. Андронов. Механизм λ -пика внутреннего трения в упорядочивающихся сплавах Fe-Al и инваре	103
М.М. Касьян, А.Ф. Сиренко. Высокотемпературное внутреннее трение монокристаллов с различной субструктурой	110
А.С. Камзин, Л.П. Ольховик, З.И. Сизова. Специфика магнитной структуры малых частиц.....	115

Н.М. Сфімова, В.Б. Валійов, С.Р. Куфтеріна, М.Б. Устименкова В.А. Десненко, А.С. Панфілов.	
Механізми релаксації намагніченості в розбавлених феримагнітних оксидах	
$\text{Li}_{0.5}\text{Fe}_{2.5-x}\text{Ga}_x\text{O}_4$	119
С.П. Кунцевич. Подрешётчные вклады ионов Fe^{3+} в константы энергии анизотропии	
$\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$	125
О.Г.Петренко. Структура і властивості оксидного скла в магнітному полі.....	129
Г.Я. Хаджай. Электро- та теплопроводність двофазної системи TaH_x в області надпровідного	
переходу.....	132
О.И. Пурский, Н.Н. Жолонко. Изобарная теплопроводность твёрдой SF_6 в пластической фазе	135
В.В. Цыбулин, Н.Н. Жолонко. Экспериментальные исследования теплового расширения	
объёмных образцов твёрдой SF_6	138
В.М. Андронов, И.П. Гребенник, С.В. Дукаров. Анализ концентрационных зависимостей в	
трёхкомпонентных вакуумных конденсатах.....	142
И.П. Гребенник. Фазообразование в тонкоплёночной системе медь-селен	146
А.А. Козьма, Е.А. Соболев, О.В. Соболев. Особенности термической стабильности структуры	
слоёв, полученных магнетронным распылением карбида вольфрама	149
Н.М. Пелихатый. Влияние гамма и нейтронного облучения на параметры пассивных элемен-	
тов интегральных схем.....	155
Н.Н. Рожницкий. Электрооптические характеристики электролизной радикал-	
рекомбинационной люминесценции.....	161
Владимир Константинович Милославский (к 70-летию со дня рождения).....	169
Правила для авторів	170

из первых физиков, который на основе экспериментальных данных построил поверхность Ферми цинка. В 1951 году Б.И.Веркин защитил кандидатскую и в 1958 году - докторскую диссертации.

Борис Иеремиевич был прекрасным физиком, с широким кругом интересов, для него был характерен неустанный поиск новых идей. В университете он с группой молодых физиков исследовал криогенные жидкости, читал лекции по общей физике.

Настоящим научным и гражданским подвигом Б.И.Веркина было создание Физико-технического института низких температур, бессменным руководителем которого он оставался на протяжении 28 лет. Здесь наиболее ярко проявились его талант ученого, выдающиеся организаторские способности, глубокое понимание проблем современной науки, интуиция в выборе перспективных направлений исследований.

По инициативе и при поддержке Бориса Иеремиевича в институте возникали и развивались порой самые неожиданные и плодотворные союзы различных наук и направлений. Атмосфера творчества, всегда и безраздельно царившая в его обществе, привлекла в институт много способных людей, с которыми ФТИНТ в короткий срок завоевал международный авторитет.

Говоря о Б.И.Веркине, нельзя не вспомнить о прекрасной институтской библиотеке, формирование которой он начал еще в 1959 году из фондов библиотек Москвы и Ленинграда.

Значительное место в жизни Б.И.Веркина занимала преподавательская работа и заботы о совершенствовании преподавания, о создании новых кафедр и специализаций. Так, Борис Иеремиевич создал три физических отдела в составе института механики в Днепропетровске, специализацию "физика низких температур" и кафедру молекулярной биологии в ХГУ, физико-технический факультет и в его составе - кафедру криогеники в ХПИ, криогенный центр при Якутском государственном университете.

Б.И.Веркин был создателем и до конца своих дней главным редактором журнала "Физика низких температур", который издается с 1975 года, а также членом редколлегии международного журнала "Cryogenics" и активным участником многих союзных и республиканских научных советов.

Творческие замыслы Бориса Иеремиевича, многогранность таланта и интересов вызывали и будут вызывать у всех, кто его знал, почтительное удивление и глубочайшее уважение.

Редакционная коллегия

К теории квантовых ангармонических осцилляторов

Ю.В. Василевская, В.В. Ульянов

Харьковский государственный университет,

Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы 4

E-mail: Vladimir.V.Ulyanov@univer.kharkov.ua

Предложен новый метод расчёта уровней энергии для четверного осциллятора с помощью точных решений для спиновых эффективных потенциалов с минимумом 4-го порядка.

Запропоновано новий метод розрахунку рівнів енергії для четверного осцилятора за допомогою точних розв'язків для спінових ефективних потенціалів з мінімумом 4-го порядку.

PACS: 03.65.-w

Во многих вопросах квантовой теории [1-5] возникает задача об энергетическом спектре одночастичного гамильтониана с потенциальной энергией

$$U(x) = Cx^4 + Wx^2, \quad (C > 0), \quad (1)$$

где основным является четверной член, а квадратичный играет второстепенную роль, хотя и приводит при $W < 0$ к наличию двух минимумов (двойная потенциальная яма).

Известно, что даже для чисто четверного осциллятора уравнение Шредингера не имеет точного решения, не говоря уже о смешанном осциляторе. Среди методов вычисления уровней энергии таких систем можно отметить квазиклассическое приближение, диагонализацию усечённой матрицы гамильтониана в представлении гармонического осциллятора, разложение в ряды, теорию возмущений и др. [2-5].

Предлагаемый нами новый способ получения уровней энергии основывается на найденных недавно [6, 7] с помощью теории спиновых систем точных решениях для гамильтонианов с потенциалом, построенным из гиперболических функций:

$$U(x) = \frac{B^2}{4} \operatorname{sh}^2 x - B(S + \frac{1}{2}) \operatorname{ch} x, \quad (2)$$

где величина $B > 0$ может изменяться непрерывно, а S принимает целые и полуцелые неотрицательные значения. Как будет видно из дальнейшего, при соответ-

ствующем выборе параметров можно аппроксимировать потенциал степенного осциллятора (1) таким "спиновым" потенциалом.

Заметим, что во всех формулах без ограничения общности используются безразмерные величины, которые в стационарном уравнении Шредингера

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \psi = 0$$

для рассматриваемых задач соответствуют значению $\frac{2m}{\hbar^2} = 1$.

В случае чисто четверного осциллятора

$$U^{(q)}(x) = x^4 \quad (3)$$

(в дальнейшем будем называть эту модель 4-степенной и отмечать индексом "q" – от "quartic"), где для упрощения выкладок опускаем возможный коэффициент C перед x^4 , при наличии которого уровни энергии будут умножаться на $C^{1/3}$, целесообразно установив полезные для наших целей связи между средними значениями степеней координат $\langle x^k \rangle_n^{(q)}$ в стационарных состояниях с номером n и соответствующими уровнями энергии $E_n^{(q)}$ в виде так называемых вириальных рекуррентных соотношений [8]:

$$\langle x^{k+4} \rangle_n^{(q)} = \frac{k+1}{k+3} E_n^{(q)} \langle x^k \rangle_n^{(q)} + \frac{k(k^2-1)}{4(k+3)} \langle x^{k-2} \rangle_n^{(q)}. \quad (4)$$

В частности, при $k = 0$ получаем теорему вириала

$$\langle x^4 \rangle_n^{(q)} = \frac{1}{3} E_n^{(q)}, \quad (5)$$

при $k = 2$ согласно (4) имеем выражение

$$\langle x^6 \rangle_n^{(q)} = \frac{3}{5} E_n^{(q)} \langle x^2 \rangle_n^{(q)} + \frac{3}{10}, \quad (6)$$

которое будет использовано при расчётах по теории возмущений, а при $k = 4$ приходим к аналогичному соотношению для приближений более высокого порядка:

$$\langle x^8 \rangle_n^{(q)} = \frac{5}{7} E_n^{(q)} \langle x^4 \rangle_n^{(q)} + \frac{15}{7} \langle x^2 \rangle_n^{(q)}, \quad (7)$$

где величина $\langle x^4 \rangle_n^{(q)}$ определяется из (5).

Для справок и оценок погрешностей при расчётах по теории возмущений приводим численные значения основного уровня энергии и дисперсии координат в основном состоянии 4-степенного осциллятора:

$$E_0^{(q)} = 1.06036; \quad \langle x^2 \rangle_0^{(q)} = 0.362023. \quad (8)$$

Спиновый потенциал (2) можно записать, перестроив гиперболические функции:

$$U(x) = -B_0 B / 2 + B^2 \operatorname{sh}^4(x/2) + B(B - B_0) \operatorname{sh}^2(x/2), \quad (9)$$

$$B_0 = 2S + 1.$$

Замечаем, что при $B = B_0$ он также имеет минимум 4-го порядка в начале координат:

$$U^{(h)}(x) = -B_0^2 / 2 + B_0^2 \operatorname{sh}^4(x/2), \quad (10)$$

так что будем называть эту модель 4-гиперболической (индекс "h" – от "hyperbolic"). Как будет показано, она хорошо аппроксимирует 4-степенной потенциал (3).

Используемые точные решения имеют тесную связь со спиновыми системами и отвечают собственным значениям гамильтониана $H = -S_z^2 - BS_x$, представленного также в безразмерном виде и описывающего так называемый легкоосный парамагнетик во внешнем магнитном поле B , направленном перпендикулярно оси анизотропии z [6, 7]. При этом собственные значения такого гамильтониана совпадают с нижними $2S+1$ уровнями энергии для потенциала (2). Точные значения уровней энергии (здесь мы ограничимся примерами только для основного уровня) 4-гиперболического потенциала (10) имеют особенно простой вид в случае небольших значений S : при $S = 0$ имеем $E_0^{(h)} = 0$, при $S = \frac{1}{2}$ получается

$$E_0^{(h)} = -\frac{5}{4}, \quad \text{при } S = 0 \text{ основной уровень равен}$$

$$E_0^{(h)} = -\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{37}}{2}, \quad \text{а при } S = \frac{3}{2} \text{ он равен}$$

$$E_0^{(h)} = -\frac{13}{4} - \sqrt{13}. \quad \text{При "средних" значениях } S \text{ формулы для уровней энергии содержат тригонометриче-}$$

ские и обратные им функции: при $S = 2$ для основного уровня энергии получается выражение

$$E_0^{(h)} = -\frac{5}{3} + \frac{2}{3} \sqrt{313} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{1765}{313^{3/2}} + \frac{2\pi}{3} \right],$$

а при $S = \frac{5}{2}$ имеется формула с подобной структурой

$$E_0^{(h)} = -\frac{71}{12} + \frac{4}{3} \sqrt{97} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{601}{194\sqrt{97}} + \frac{2\pi}{3} \right],$$

при $S = 3$ приходим к несколько более сложной форме

$$E_0^{(h)} = -\frac{7}{2} - \sqrt{y} - \sqrt{\frac{1029}{4} - y - \frac{383}{\sqrt{y}}},$$

где

$$y = \frac{343}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{59465} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{11591451}{59465^{3/2}} \right],$$

а при $S = \frac{7}{2}$ получаем также аналогичное выражение

$$E_0^{(h)} = -\frac{37}{4} - \sqrt{y} - \sqrt{301 - y - \frac{480}{\sqrt{y}}},$$

где

$$y = \frac{301}{3} + \frac{2}{3} \sqrt{45853} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{7844779}{45853^{3/2}} \right].$$

При $S > 7/2$ уровни энергии являются корнями полиномов соответствующей степени, которые можно построить, например на основе метода конечных цепных дробей в виде рекуррентных соотношений [6].

Представив 4-гиперболическую модель (10) в форме разложения по степеням x :

$$U^{(h)}(x) = -\frac{1}{2} B_0^2 + \frac{1}{16} B_0^2 x^4 + \frac{1}{96} B_0^2 x^6 + O(x^8), \quad (11)$$

произведем преобразование $x \rightarrow G^{-(1/6)} x$ с $G = B_0^2 / 16$ в уравнении Шредингера:

$$\frac{d^2 \psi_n}{dx^2} + \left[\frac{E_n^{(h)} + B_0^2 / 2}{G^{1/3}} - x^4 - \frac{x^6}{6G^{1/3}} - \dots \right] \psi_n = 0. \quad (12)$$

Отсюда на основании теории возмущений устанавливаем связь энергетических уровней 4-гиперболического и 4-степенного потенциалов:

$$\frac{E_n^{(h)} + B_0^2 / 2}{G^{1/3}} = E_n^{(q)} + \frac{\langle x^6 \rangle_n^{(q)}}{6G^{1/3}} + \dots \quad (13)$$

В первом приближении, при отбрасывании поправочных членов, для соответствующих уровней энергии четверного осциллятора из (13) вытекает соотношение

$$E_n^{(q)(1)} = \frac{E_n^{(h)} + B_0^2 / 2}{G^{1/3}}. \quad (14)$$

Первый поправочный член в (13) с помощью вириального соотношения (6) дает возможность оценить

относительную ошибку, к которой приводит приближение (14):

$$\delta_n \equiv \frac{E_n^{(q)} - E_n^{(q)}}{E_n^{(q)}} = \frac{\langle x^6 \rangle_n^{(q)}}{6G^{1/3}E_n^{(q)}} = \frac{E_n^{(q)} \langle x^2 \rangle_n^{(q)} / 10 + 1/20}{G^{1/3}E_n^{(q)}} \quad (15)$$

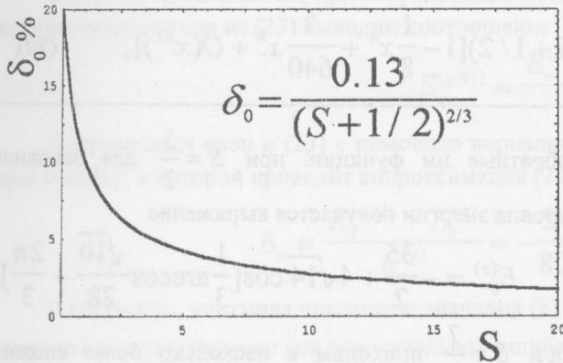


Рис. 1. Зависимость относительной ошибки первого приближения от спинового параметра S при расчете основного уровня энергии четверного осциллятора на основе 4-гиперболической модели потенциала.

В частности, для основного уровня с учетом численных значений (8) ошибка равна

$$\delta_0 = \frac{0.132}{(S + 1/2)^{2/3}} \quad (16)$$

Таким образом, даже в самом грубом приближении обеспечивается достаточно высокая точность уже при небольших значениях параметра S (см. рис. 1). Так, если при $S = 2$ относительная ошибка составляет 7%, а при $S = 10$ она равна 3%, то уже при $S = 50$ имеем 1%. Для возбужденных состояний ошибка (15) больше, так как 4-гиперболический потенциал растет быстрее 4-степенного (см. рис. 2).

Если же воспользоваться следующим приближением теории возмущений на основе (13), то приходим к формуле, уточняющей соотношение (14):

$$E_n^{(q)(2)} = \frac{E_n^{(h)} + B_0^2/2 - 1/20}{G^{1/3} + \langle x^2 \rangle_n^{(q)} / 10} \quad (17)$$

при применении которой относительная ошибка по сравнению с таковой для первого приближения уменьшается по абсолютной величине на порядок и более.

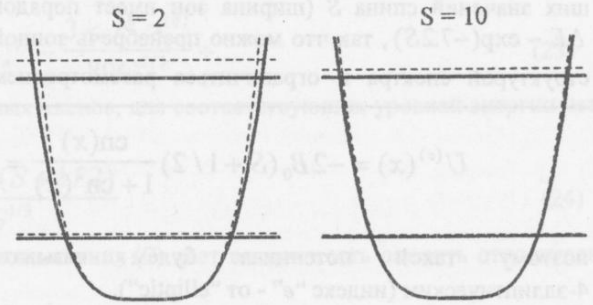


Рис. 2. Иллюстрация к аппроксимации 4-степенного потенциала (сплошные линии) с помощью 4-гиперболической модели (штриховые линии).

Таким образом, предложенный метод расчета энергетического спектра 4-степенного осциллятора на основе точных уровней энергии соответствующей 4-гиперболической модели оказывается весьма эффективным. При этом повышение точности расчета может производиться как путем использования больших значений параметра S в формуле (14), так и на основе уточненной формулы (17).

Еще лучшие результаты дает аналогичный подход, основанный на точных решениях, соответствующих периодической модели спинового потенциала с минимумом 4-го порядка, построенной из эллиптических функций [6, 7], поскольку разложение типа (11) для такого потенциала не содержит члена с x^6 , в связи с чем относительная ошибка определяется вкладом порядка x^8 (как для ее оценки, так и для уточненного расчета вириальное соотношение (7) здесь оказывается весьма кстати).

Далее и перейдем к использованию такой модели эффективного потенциала, соответствующей спиновой системе с гамильтонианом $H = \alpha S_z^2 - \beta S_y^2 - BS_x$, отвечающим так называемому двухосному парамагнетику в магнитном поле, перпендикулярном осям анизотропии:

$$U(x) = \frac{[B^2/4 - \alpha\beta S(S+1)]\text{sn}^2(x) - (\alpha + \beta)B(S+1/2)\text{cn}(x)}{\alpha + \beta \text{cn}^2(x)} \quad (18)$$

где эллиптические функции Якоби $\text{sn}(x)$ и $\text{cn}(x)$ имеют модуль $\sqrt{\beta/(\alpha + \beta)}$. При этом соответствующее уравнение Шредингера записывается в виде

$$(\alpha + \beta) \frac{d^2\psi}{dx^2} + [E - U(x)]\psi = 0 \quad (19)$$

Собственные значения спин-гамильтониана совпадают с $2S+1$ крайними уровнями энергии низших

энергетических зон (чередующимися дном и потолком зоны) в потенциальном поле (18), однако при рассматриваемых далее параметрах потенциала зоны оказываются чрезвычайно узкими даже для небольших значений спина S (ширина зон имеет порядок $\Delta E \sim \exp(-7.2S)$), так что можно пренебречь зонной структурой спектра и ограничиться рассмотрением

отдельной ячейки периодического потенциала.

В случае одинаковых констант анизотропии $\alpha = \beta$, которые положим равными единице, при значении магнитного поля $B = B_0 = 2\sqrt{S(S+1)}$ периодический потенциал (18) имеет ячейки с минимумом 4-го порядка:

$$U^{(e)}(x) = -2B_0(S+1/2) \frac{\text{cn}(x)}{1+\text{cn}^2(x)} = -B_0(S+1/2) \left[1 - \frac{1}{8}x^4 + \frac{3}{640}x^8 + O(x^{12}) \right], \quad (20)$$

поэтому такой потенциал будем называть 4-эллиптическим (индекс "e" - от "elliptic").

Точные значения уровней энергии (здесь мы вновь ограничиваемся примерами только для основного уровня и используем нумерацию уровней, соответствующую спиновому гамильтониану) 4-эллиптического потенциала (20) также имеют особенно простой вид в случае небольших значений S : при $S = \frac{1}{2}$

получается $E_0^{(e)} = -\frac{\sqrt{3}}{2}$, а при $S = 1$ основной уровень равен $E_0^{(e)} = -3$, при $S = \frac{3}{2}$ расчёт даёт

$E_0^{(e)} = -\frac{\sqrt{15}}{2} - 3\sqrt{2}$, при $S = 2$ имеем $E_0^{(e)} = -6\sqrt{3}$, при $S = 3$ вычисления дают $E_0^{(e)} = -\sqrt{33+4\sqrt{54}}$, а при $S = 4$ получаем $E_0^{(e)} = -\sqrt{6}\sqrt{153+\sqrt{6465}}$.

При "средних" полуцелых значениях S формулы для уровней энергии содержат тригонометрические и

обратные им функции: при $S = \frac{5}{2}$ для основного уровня энергии получается выражение

$$E_0^{(e)} = -\frac{35}{2} + 4\sqrt{14} \cos\left[\frac{1}{3} \arccos \frac{\sqrt{10}}{28} + \frac{2\pi}{3}\right],$$

при $S = \frac{7}{2}$ приходим к несколько более сложной форме

$$E_0^{(e)} = -\frac{3}{2}\sqrt{7} - \sqrt{y} - \sqrt{378 - y - \frac{72\sqrt{7}}{\sqrt{y}}},$$

где $y = 126 + 84\sqrt{5} \cos\left[\frac{1}{3} \arccos \frac{444}{245\sqrt{5}}\right]$.

При $S = 5$ имеем

$$E_0^{(e)} = -\sqrt{1617 + 144\sqrt{154} \cos\left[\frac{1}{3} \arccos \frac{131\sqrt{11}}{378\sqrt{14}}\right]},$$

а при $S = 6$ получаются аналогичные значения

$$E_0^{(e)} = -\sqrt{3640 + 56\sqrt{3289} \cos\left[\frac{1}{3} \arccos \frac{1363837}{161161\sqrt{3289}}\right]}.$$

При $S = 7$ получается несколько более сложное выражение

$$E_0^{(e)} = -\sqrt{5481 + \sqrt{y} + \sqrt{18863712 - y + \sqrt{\frac{7437878784}{\sqrt{y}}}}},$$

где $y = 2016\{3119 + 10\sqrt{213637} \cos\left[\frac{1}{3} \arccos \frac{596984596}{7(213637)^{3/2}}\right]\}$,

При полуцелых $S > 7/2$ и целых $S > 8$ уровни энергии являются корнями полиномов соответствующей степени, которые можно построить, например, на основе метода конечных цепных дробей в виде рекуррентных соотношений [6].

Произведя преобразование $x \rightarrow G^{-1/6}x$ с $G = B_0(S+1/2)/16$ и перестраивая энергетические величины, преобразуем уравнение (19) к виду

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\frac{E^{(e)} + B_0(S+1/2)}{2G^{1/3}} - \frac{U^{(e)}(x/G^{1/6}) + B_0(S+1/2)}{2G^{1/3}} \right] \psi = 0, \quad (21)$$

а подставляя сюда 4-эллиптическую модель (20) в форме разложения по степеням x , приходим к уравнению

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\frac{E^{(e)} + B_0(S+1/2)}{2G^{1/3}} - x^4 + \frac{3x^8}{80G^{2/3}} + \dots \right] \psi = 0, \quad (22)$$

из которого согласно теории возмущений вытекает связь уровней энергии 4-степенного и 4-эллиптического потенциалов:

$$\frac{E_n^{(e)} + B_0(S+1/2)}{2G^{1/3}} = E_n^{(q)} - \frac{3 \langle x^8 \rangle_n^{(q)}}{80G^{2/3}} + \dots \quad (23)$$

В первом приближении, при отбрасывании поправочных членов, для соответствующих уровней энергии четверного осциллятора из (23) выводим соотношение

$$E_n^{(q)(1)} = \frac{E_n^{(e)} + B_0(S+1/2)}{2G^{1/3}}. \quad (24)$$

Поправочный член в (23) с помощью вириального соотношения (7) дает возможность оценить относительную ошибку, к которой приводит аппроксимация (24):

$$\delta_n \equiv \frac{E_n^{(q)(1)} - E_n^{(q)}}{E_n^{(q)}} = -\frac{3 \langle x^8 \rangle_n^{(q)}}{80G^{2/3} E_n^{(q)}} = -\frac{E_n^{(q)2} + 9 \langle x^2 \rangle_n^{(q)}}{112G^{2/3} E_n^{(q)}}. \quad (25)$$

В частности, учитывая численные значения (8) и приближение $B_0 \approx 2S+1$, получаем для основного уровня энергии простую формулу для относительной ошибки:

$$\delta_0 = -\frac{0.148}{(S+1/2)^{4/3}}, \quad (26)$$

из которой видно, что даже при небольших значениях параметра S обеспечивается достаточно высокая точность (см. рис. 3). Так, если при $S=2$ относительная ошибка составляет -4% , а при $S=10$ она равна -0.6% , то уже при $S=50$ имеем -0.08% .

Если же воспользоваться поправкой теории возмущений на основе (23), то приходим к формуле, уточняющей соотношение (24):

$$E_n^{(q)(2)} = \frac{E_n^{(e)} + B_0(S+1/2) + [(E_n^{(q)})^2 + 9 \langle x^2 \rangle_n^{(q)}] / 56G^{1/3}}{2G^{1/3}}, \quad (27)$$

при применении которой относительная ошибка по сравнению с таковой для первого приближения уменьшается по абсолютной величине на два-три порядка.

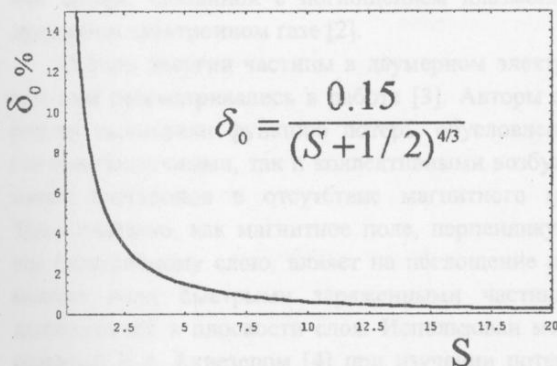


Рис. 3. Зависимость относительной ошибки первого приближения от спинного параметра S при расчёте основного уровня энергии четверного осциллятора на основе 4-эллиптической модели потенциала.

Что касается контроля точности получаемых ответов, то они основаны частично на известных численных данных для уровней энергии [3-5], а также на результатах наших компьютерных вычислений, базирующихся на методе стрельбы.

Заметим также, что мы ограничились вопросом о чисто четверном осцилляторе (3), связанном с моделями (10) и (20), тогда как подобным же образом решается задача и о смешанной квадратично-четверной модели (1) с помощью потенциалов (9) и (18), что, однако, должно явиться предметом отдельного рассмотрения.

В заключение добавим, что важное значение имеет и обратная сторона связи потенциалов для спиновых систем с моделью смешанного осциллятора, поскольку она обеспечивает расчёт более высоких уровней энергии ("надспиновых"), а также всего энергетического спектра в случае "внеспиновых" значений параметра S для рассмотренных эффективных потенциалов. В свое время именно для исследования физических свойств спиновых систем использовалась задача о смешанном осцилляторе [9].

Авторы благодарны О.Б. Заславскому за обсуждение результатов работы.

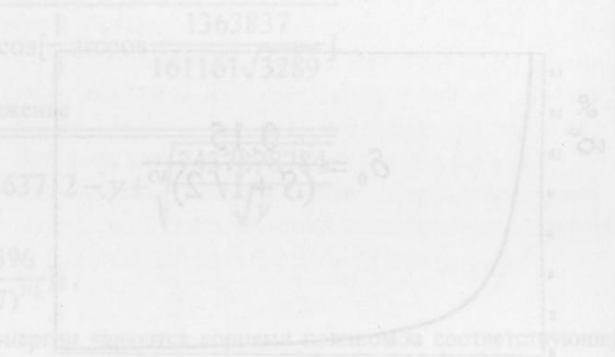
1. S.I. Chan, D. Stelman, L.E. Thompson, *J. Chem. Phys.*, **41**, 2828 (1964).
2. А.В. Турбинер, *УФН*, **144**, 35 (1984).
3. J.B. Krieger, M.L. Lewis, C. Rosenzweig, *J. Chem. Phys.*, **47**, 2942 (1967).
4. S.I. Chan, D. Stelman, *J. Mol. Spectr.*, **10**, 278 (1963).
5. D. Secrest, K. Cashion, J.O. Hirschfelder, *J. Chem. Phys.*, **37**, 830 (1962).
6. V.V. Ulyanov, O.B. Zaslavskii, *Phys. Rep.*, **216**, 179 (1992).
7. В.В. Ульянов, О.Б. Заславский, Ю.В. Василевская, *ФНТ*, **23**, 110 (1997)
8. В.В. Ульянов, *Задачи по квантовой механике и квантовой статистике*, Вища школа, Харьков (1980).

9. О.Б. Заславский, В.В. Ульянов, В.М. Цукерник, *ФНТ*, **9**, 511 (1983).

On the theory of quantum anharmonic oscillators

Yu.V. Vasilevskaya, V.V. Ulyanov

New method of a calculation of energy levels for a quartic oscillator by using of exact solutions for spin effective potentials with a fourth-order minimum is proposed.



Поглощение плазмонов заряженными частицами в двумерном электронном газе

Н.В. Глейзер, А.М. Ермолаев, Г.И. Рашба, Бабак Хаики

Харьковский государственный университет,

Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы 4

Рассматривается часть функции потерь энергии быстрой заряженной частицы в двумерном электронном газе в квантующем магнитном поле, обусловленная поглощением плазменных волн. В отсутствие магнитного поля найдена температурная зависимость энергии, поглощаемой частицей. При низких температурах поглощаемая мощность пропорциональна квадрату температуры, а при высоких она линейно увеличивается с температурой.

Розглядається частина функції втрат енергії швидкої зарядженої частинки у двовимірному електронному газі у магнітному полі, яка зумовлена поглинанням плазмових хвиль. У відсутності магнітного поля знайдена температурна залежність енергії, яка поглинається частинкою. При низьких температурах потужність, яка поглинається, пропорційна квадрату температури, а при високих вона лінійно зростає з температурою.

PACS: 72.10.Bg

Существует несколько механизмов потерь энергии заряженной частицы в веществе [1]. Здесь будут рассмотрены только характеристические потери, обусловленные возбуждением плазменных волн быстрой частицей. Ограничимся расчётом части функции потерь, связанной с поглощением плазмонов в двумерном электронном газе [2].

Потери энергии частицы в двумерном электронном газе рассматривались в работе [3]. Авторы этой работы вычислили функцию потерь, обусловленных как одночастичными, так и коллективными возбуждениями электронов в отсутствие магнитного поля. Здесь показано, как магнитное поле, перпендикулярное электронному слою, влияет на поглощение плазменных волн быстрыми заряженными частицами, движущимися в плоскости слоя. Использован метод, развитый И.А. Ахиезером [4] при изучении потерь в плазме в квантующем магнитном поле.

Гамильтониан взаимодействия частицы с зарядом Ze с двумерным электронным газом равен [4]

$$V = Ze^2 \int \frac{d^2 q}{2\pi q} n(q) e^{iqr}, \quad (1)$$

где $n(q)$ – фурье-компонента оператора плотности электронов, r – радиус-вектор частицы. Матричные элементы гамильтониана (1) между состояниями невозмущенной системы имеют вид:

$$\langle \alpha' \chi' | V | \alpha \chi \rangle = Ze^2 \int \frac{d^2 q}{2\pi q} \langle \alpha' | n(q) | \alpha \rangle I_{\chi\chi'}(q).$$

Здесь $|\alpha\rangle$ – стационарное состояние двумерного электронного газа, $\chi = (n, p_y)$ – орбитальные квантовые числа частицы в магнитном поле [5], $I_{\chi\chi'}(q) = \langle \chi' | \exp(iqr) | \chi \rangle$ – матричные элементы плоской волны в базисе Ландау. В борновском приближении по гамильтониану (1) вероятность перехода $n \rightarrow n'$ частицы, усреднённая по α, p_y и просуммированная по α', p_y' , равна:

$$W_{n'n} = \frac{2\pi Z^2 e^4 n_e}{\hbar^2} \int \frac{d^2 q}{q^2} S(q, \omega) C_{n'n} \left(\frac{q^2 l^2}{2} \right), \quad (2)$$

где

$$S(q, \omega) = \frac{\hbar}{n_e} \sum_{\alpha\alpha'} w_\alpha |\langle \alpha' | n(-q) | \alpha \rangle|^2 \delta(\hbar\omega + E_\alpha - E_{\alpha'}). \quad (3)$$

– динамический структурный фактор двумерного электронного газа в магнитном поле,

$$C_{n'n} = \frac{n_1!}{n_2!} x^{n_2-n_1} e^{-x} \left[L_{n_1}^{n_2-n_1}(x) \right]^2.$$

В этих формулах n_e – плотность электронов; $\hbar\omega = \varepsilon_n - \varepsilon_{n'}$ – потеря энергии частицы в результате рассеяния; l – магнитная длина; E_α – энергия электронного газа в состоянии $|\alpha\rangle$; w_α – гиббсовская функция распределения; n_1 – меньшее, а n_2 – большее из чисел (n, n') ; $L_{n_2}^{n_1}$ – обобщённые многочлены Лагерра; $\hbar$ – квантовая постоянная. Площадь, занятая электронным газом, принята равной единице.

Функция (3) связана с компонентой Фурье поляризаационного оператора Π электронов соотношением [6]

$$S(q, \omega) = -\frac{\hbar}{\pi n_e} (n_\omega + 1) \text{Im} \Pi(q, \omega), \quad (4)$$

где $n_\omega = (e^{\beta\hbar\omega} - 1)^{-1}$ – функция Планка, β – обратная температура. В приближении хаотических фаз поляризаационный оператор равен

$$\Pi = P(1 - v_q P)^{-1}, \quad (5)$$

где $v_q = \frac{2\pi e^2}{q}$ – фурье-компонента энергии кулоновского взаимодействия двумерных электронов, P – поляризаационный оператор электронного газа в магнитном поле. Выражение (2) определяет скорость изменения энергии частицы, движущейся в двумерном электронном газе [1,4]:

$$Q = \sum_{n'} \hbar \omega W_{n'n}. \quad (6)$$

Из формул (2), (4) и (5) получаем вклад в функцию потерь (6), обусловленный поглощением длинноволновых магнитоплазмонов заряженной частицей:

$$Q = \frac{2Z^2 e^2}{v} \int_{\omega_c}^{\infty} d\omega \omega n_\omega \theta \left(1 - \left| \frac{\Omega}{qv} \right| \right) \left[1 - \left(\frac{\Omega}{qv} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (7)$$

где v – скорость частицы, $\Omega = \omega - \frac{\hbar q^2}{2m}$, m и ω_c – эффективная масса и циклотронная частота электрона, $q = \frac{m}{2\pi e^2 n_e} (\omega^2 - \omega_c^2)$ – спектр длинноволновых двумерных магнитоплазмонов [2], θ – функция Хевисайда. В формуле (7) мы пренебрегли влиянием магнитного поля на падающую частицу.

Неравенство $|\Omega| < qv$ выполняется в интервале

(x_-, x_+) , где $x = \frac{\omega}{\omega_c}$; $x_\pm$ – положительные корни

уравнения $|\Omega| = qv$. В результате функция (7) равна:

$$Q = \frac{8\pi Z^2 e^4 n_e}{\hbar} \int_{x_-}^{x_+} dx x (x^2 - 1) n_x \left[-\prod_{k=1}^8 (x - x_k) \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (8)$$

где x_k – корни уравнений $\Omega = \pm qv$, $n_x = (e^{\beta\hbar\omega_c x} - 1)^{-1}$. Найти корни x_k и вычислить интеграл (8) можно лишь численно.

Если магнитное поле отсутствует, из формулы (8) получаем:

$$Q_0 = \frac{8\pi Z^2 e^4 n_e}{\hbar} \int_{y_-}^{y_+} dy y^2 (x^2 - 1) n_y \left[-\prod_{k=1}^6 (y - y_k) \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (9)$$

где $y = \frac{\omega}{\omega_0}$, $\omega_0 = \left(\frac{4\pi e^2 n_e v}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}}$, $n_y = (e^{\beta\hbar\omega_0 y} - 1)^{-1}$,

$$y_\pm = \frac{2}{\sqrt{3}} \text{sh } \varphi, \quad \text{sh } \varphi = a = \frac{3^{\frac{3}{2}} \hbar \omega_0}{4mv^2},$$

$$y_+ = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{3}} \text{ch } \frac{\varphi_1}{3}, & v < v_0, \\ \frac{2}{\sqrt{3}} \cos \frac{\varphi_2}{3}, & v > v_0, \end{cases}$$

$$\text{ch } \varphi_1 = \cos \varphi_2 = a, \quad v_0 = \frac{3}{2^{\frac{2}{3}}} \left(\frac{\pi e^2 \hbar n_e}{m^2} \right)^{\frac{1}{3}}.$$

Через y_k обозначены корни кубических уравнений:

$$y^3 \pm y - \frac{\hbar \omega_0}{2mv^2} = 0.$$

Корни уравнения

$$y^3 + y - \frac{\hbar \omega_0}{2mv^2} = 0$$

равны:

$$y_1 = \frac{2}{\sqrt{3}} \text{sh } \frac{\varphi}{3}, \quad y_{2,3} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\text{sh } \frac{\varphi}{3} \pm i\sqrt{3} \text{ch } \frac{\varphi}{3} \right),$$

где $\text{sh } \varphi = a$. Корни уравнения

$$y^3 - y - \frac{\hbar \omega_0}{2mv^2} = 0$$

равны:

$$y_1 = \frac{2}{\sqrt{3}} \text{ch } \frac{\varphi}{3}, \quad y_{2,3} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\text{ch } \frac{\varphi}{3} \pm i\sqrt{3} \text{sh } \frac{\varphi}{3} \right),$$

$$\text{ch } \varphi = a,$$

если $v < v_0$;

$$y_1 = \frac{2}{\sqrt{3}} \cos \frac{\varphi}{3}, \quad y_2 = \frac{2}{\sqrt{3}} \cos \left(\frac{\varphi}{3} + \frac{2\pi}{3} \right),$$

$$y_3 = \frac{2}{\sqrt{3}} \cos \left(\frac{\varphi}{3} + \frac{4\pi}{3} \right), \quad \cos \varphi = a$$

в случае $v < v_0$.

Когда скорость падающей частицы существенно превышает v_0 , корни y_k приближенно равны: $0, \pm i, \pm 1, 0$. В результате

$$Q_0 = \frac{8\pi Z^2 e^4 n_e}{\hbar} \int_0^1 dy \frac{y n_y}{\sqrt{1-y^2}}. \quad (10)$$

Асимптотики этого интеграла равны:

$$Q_0 = \frac{4\pi^3 Z^2 e^4 n_e}{3\hbar(\beta\hbar\omega_0)^2} \left[1 + \frac{8\pi^4}{21(\beta\hbar\omega_0)^4} \right], \quad \beta\hbar\omega_0 \gg 1; \quad (11)$$

$$Q_0 = \frac{\sqrt{2}\pi Z^2 e^4 n_e}{\hbar(\beta\hbar\omega_0)} \left[\Gamma\left(\frac{1}{4}\right) \right]^2 - \frac{\pi^2 Z^2 e^2 n_e}{\hbar},$$

$$\beta\hbar\omega_0 \gg 1.$$

С ростом температуры выражение (10) монотонно увеличивается. При низких температурах $Q_0 \sim \beta^2$, а при высоких поглощаемая мощность линейно возрастает с температурой.

Сравним выражение (11) с функцией потерь быстрой частицы

$$Q_e = \frac{2\pi^2 Z^2 e^4 n_e}{\hbar}, \quad (12)$$

обусловленной спонтанным излучением плазмонов [3]. Если использовать значение $n_e = 10^{12} \text{ см}^{-2}$, типичное для инверсионного слоя на границе кремния и

двуокиси кремния [2], то для падающего электрона с энергией 1 кэВ получаем $\omega_0 = 3,89 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$. Тогда отношение величины (11) к (12) при температуре 1К равно $\frac{2\pi}{3} (\beta\hbar\omega_0)^{-2} = 2,34 \cdot 10^{-3}$.

1. А.И. Ахиезер, И.А. Ахиезер, Р.В. Половин, А.Г. Ситенко, К.Н. Степанов, *Электродинамика плазмы*, Наука, Москва (1974).
2. Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн, *Электронные свойства двумерных систем*, Мир, Москва (1985).
3. A. Bret, C. Deutsch, *Phys. Rev.*, **E48**, 2994 (1993).
4. И.А. Ахиезер, *ЖЭТФ*, **40**, 954 (1961).
5. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
6. A.L. Fetter, J.D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems*, Mc Gr.-Hill, New York (1971).

Absorption plasmons by charged particles in two-dimensional electron gas

N.V. Gleiser, A.M. Ermolaev, G.I. Rashba, Babak Haghighi

The part of a loss function of energy of a fast charged particle in two-dimensional electron gas in a quantizing magnetic field caused by absorption of plasma waves is considered. In absence of a magnetic field the temperature dependence of energy absorbed particle is found. For low temperatures absorbed power is proportional to the square of temperature, and for high temperatures it linearly is increased with temperature.

Температура магнитного упорядочения в тонких магнитных плёнках

В.В. Слёзов¹, Ю.И. Бойко², В.М. Апальков¹, Х. Ворх³

¹ *Национальный научный центр, Харьковский физико-технический институт,*

Украина, 310108, г. Харьков, ул. Академическая, 1

E-mail: KFTI@KFTI.KHARKOV.UA

² *Харьковский государственный университет, Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы, 4*

³ *Институт материаловедения, Технический университет, Германия, Дрезден.*

В работе рассмотрена система нескольких тонких ферромагнитных плёнок с межплёночным взаимодействием обменного типа. Детально изучена система двух магнитных плёнок. В рамках метода самосогласованного поля найдено выражение для температуры перехода системы в магнитоупорядоченное состояние, как функция параметров системы (толщины плёнок). Показано, что изменяя толщину плёнок, можно управлять температурой магнитного упорядочения и при определенных соотношениях между параметрами системы можно даже понизить температуру магнитного упорядочения ниже, чем температура Кюри каждой из плёнок.

В роботі розглянуто систему багатьох тонких ферромагнитних плівок з міжплівочною взаємодією обмінного типу. Детально вивчено систему двох магнітних плівок. В рамках засобу самозгідного поля знайдено вираження для температури переходу системи у магнитоупорядкований стан, як функція параметрів системи (товщини плівок). Показано, що змінюючи товщину плівок, можна керувати температурою магнітного упорядкування і при певних співвідношеннях між параметрами системи можна навіть понизити температуру магнітного упорядкування нижче, ніж температура Кюри кожної з плівок.

PACS: 75.30 Gw; 75.10. Jm

1. Введение

В настоящее время большое внимание уделяется исследованию магнитных свойств тонких магнитных плёнок с толщинами порядка $100 \div 300$ Å. Ряд интересных свойств были обнаружены в таких системах: специфическая доменная структура [1], реориентационные переходы вектора намагниченности системы в магнитоупорядоченном состоянии [2] и др. Интерес к таким системам связан с возможностью использования системы тонких магнитных плёнок в электронной промышленности. В связи с этим особое значение принимает возможность управления магнитными свойствами многоплёночных систем, путем изменения ряда ее параметров, например, толщины плёнок. Одним из наиболее важных свойств ферромагнитной системы является температура фазового перехода (температура Кюри) из состояния с нулевым полным

магнитным моментом (симметричная фаза) в состояние с ненулевой намагниченностью (несимметричная фаза). Если температуры Кюри ферромагнитных плёнок, составляющих многоплёночную систему, различны, то при наличии межплёночной магнитной связи обменного типа температуру перехода системы можно изменять, меняя толщины плёнок. При определенных условиях система нескольких плёнок может оказаться в симметричной фазе, в то время как каждая из плёнок в отдельности находится в ферромагнитном состоянии.

В данной работе в рамках метода самосогласованного поля исследуется влияние параметров многоплёночной системы на температуру перехода в магнитоупорядоченное состояние (температуру Кюри).

2. Условие магнитной упорядоченности в многослойных плёночных системах

Исследуемая система состоит из N ферромагнитных плёнок с толщинами h_i , $i = 1, \dots, N$ и площадью S . Будем предполагать, что плёнки обладают сильной анизотропией типа лёгкая ось, которая приводит к

$$F[M] = F_V[M] + F_S[M] = S \sum_{i=1}^N \int_{V_i} \{a_i M(z)^2 + b_i M(z)^4 + g_i (\vec{\nabla} M(z))^2\} dz + S \sum_{i=1}^{N-1} \alpha_i (M_{2i} M_{2i+1}), \quad (1)$$

где a_i, b_i, g_i – параметры, характеризующие термодинамические свойства i -ой плёнки вблизи точки фазового перехода; $M(z)$ – вектор локальной намагниченности, который является функцией координаты, явный вид этой функции определяется из условия минимальности функционала (1); α_i – константы, определяющие взаимодействие обменного типа между i и $i+1$ плёнками (эти константы учитывают также различную направленность векторов магнитного момента в соседних плёнках); M_{2i} – значение локального магнитного момента на границе раздела i и $i+1$ плёнок со стороны i плёнки; M_{2i+1} – значение локального магнитного момента на границе раздела i и $i+1$ плёнок со стороны $i+1$ плёнки. При записи поверхностного и объёмного слагаемых было учтено, что вектор локального магнитного момента зависит только от координаты z , где ось z перпендикулярна общей границе раздела плёнок. Индекс V_i при интеграле означает, что интегрирование производится внутри i -ой плёнки.

Параметры a_i, b_i, g_i являются функциями температуры и давления и предполагаются постоянными внутри каждой из плёнок, при этом b_i и g_i слабо зависят от температуры и положительны [3], в то время как параметр a_i изменяет свой знак при переходе по температуре через точку магнитного упорядочения (это приводит к ферромагнитному переходу в рассматриваемом материале): $a_i(T) = \beta_i(T - T_i)$, где $\beta_i > 0$, T_i – температура Кюри i -ой плёнки.

Функционал $F[M]$ (1) представляет собой пер-

направленности вектора магнитного момента вдоль определенного направления (вообще говоря разного для разных плёнок). Тогда функционал свободной энергии рассматриваемой системы в рамках самосогласованного поля состоит из объёмного F_V и поверхностного F_S вкладов [3]:

вые члены разложения свободной энергии системы по степеням намагниченности $M(z)$ и градиентам $\vec{\nabla} M(z)$. Учёт только первых членов разложения и приводит к ограничениям на область температур, в которой возможно применение выражения (1) [3]:

$$|T - T_i| \ll T_i;$$

малость флуктуационных поправок в объёме, определяемом минимальной из длин: h_i или $l_i = \sqrt{g_i/a_i}$ (где l_i – корреляционный радиус) [4] приводит к следующим соотношениям, при которых применимо рассматриваемое приближение:

$$1 \gg \frac{|T - T_i|}{T_i} \gg Gi = \frac{b_i T_i^2}{a_i g_i^3},$$

$$1 \gg \frac{|T - T_i|}{T_i} \gg \frac{b_i^3 T_i^3}{a_i^2 g_i^4 h_i},$$

где Gi – число Гинзбурга. Представленные условия накладывают ограничения на толщину плёнок:

$$h_i \gg \frac{T_i b_i}{g_i a_i} Gi$$

Распределение поля намагниченности $M(\vec{r})$ внутри рассматриваемой системы находится из условия минимальности функционала свободной энергии $F[M]$. Необходимым условием экстремальности функционала является равенство нулю его первой вариации:

$$\delta F[M] = 0, \quad (2)$$

где варьируемой функцией является $M(z)$. Подставляя выражение (1) в (2), находим:

$$\delta F[M] = S \sum_{i=1}^N \int_{V_i} \{2a_i M_i(z) + 4b_i M_i^3(z) - 2g_i \Delta M(z)\} \delta M(z) dz + 2S g_N \partial_z M_{2N} \cdot \delta M_{2N} - 2S g_1 \partial_z M_1 \cdot \delta M_1 +$$

$$+ S \sum_{i=1}^{N-1} \{ \alpha_i (M_{2i} \cdot \delta M_{2i+1} + M_{2i+1} \cdot \delta M_{2i}) + 2g_i \partial_z M_{2i} \cdot \delta M_{2i} - 2g_{i+1} \partial_z M_{2i+1} \cdot \delta M_{2i+1} \}, \quad (3)$$

где было использовано обозначение: $\partial_z = \frac{\partial}{\partial z}$;

$\partial_z M_{2i}$ – значение производной локального магнитного момента $M(z)$ на границе раздела i и $i+1$ плёнок со стороны i -ой плёнки; $\partial_z M_{2i+1}$ – значение производной локального магнитного момента $M(z)$ на границе раздела i и $i+1$ плёнок со стороны $i+1$ -ой плёнки; $\partial_z M_1, \partial_z M_{2N}$ – значения производных $\partial_z M(z)$ на свободных границах многоплёночной системы.

Так как $\delta F[M] \equiv 0$ при любых вариациях $\delta M(z)$, то из выражения (3) мы получаем следующие уравнения для $M(z)$:

$$a_i M(z) + 2b_i M(z)^3 - g_i \Delta M(z) = 0 \quad (4)$$

в области i -ой плёнки с граничными условиями:

$$\begin{cases} \partial_z M_1 = 0 \\ \partial_z M_{2N} = 0 \\ \alpha_i M_{2i} - 2g_{i+1} \partial_z M_{2i+1} = 0, \quad i = 1, \dots, N-1 \\ \alpha_i M_{2i+1} + 2g_i \partial_z M_{2i} = 0, \quad i = 1, \dots, N-1 \end{cases} \quad (5)$$

В дальнейшем мы будем интересоваться только влиянием параметров (например, толщины h_i , $i = 1, \dots, N$) системы многих плёнок на температуру фазового перехода системы в несимметричную магнитоупорядоченную фазу, не рассматривая структуру этой фазы. Необходимым условием отсутствия магнитоупорядочения в системе является минимальность функционала (1) при нулевом значении локального магнитного момента: $M(z) = M_0 \equiv 0$ (легко заметить, что функция $M(z) = 0$ является решением системы (4)-(5)). Для этого необходимо, чтобы в точке $M(z) = M_0 \equiv 0$ вторая вариация функционала (1) была положительна (это достаточное условие локального минимума функционала $F[M]$ в точке $M(z) = M_0$):

$$\delta^2 F[M] \Big|_{M=M_0} > 0, \quad (6)$$

при этом температура перехода в магнитоупорядоченное состояние будет определяться нарушением неравенства (6).

Подставляя (1) в (6), находим:

$$\delta^2 F[M] \Big|_{M=M_0} = S \sum_{i=1}^N \int_{h_i} \left\{ 2a_i \mu^2 + 2g_i \left(\frac{d\mu}{dz} \right)^2 \right\} dz + S \sum_{i=1}^{N-1} \alpha_i \mu_{2i} \mu_{2i+1} = S\Phi[\mu], \quad (7)$$

где $\mu = \delta M = M - M_0$ – вариация поля $M(z)$.

Так как при варьировании поля $M(z)$ граничные условия (5) должны сохраняться, то $\mu(z)$ удовлетворяет граничным условиям типа (5):

$$\begin{cases} \mu_1 = 0 \\ \mu_{2N} = 0 \\ \alpha_i \mu_{2i} - 2g_{i+1} \partial_z \mu_{2i+1} = 0, \quad i = 1, \dots, N-1 \\ \alpha_i \mu_{2i+1} + 2g_i \partial_z \mu_{2i} = 0, \quad i = 1, \dots, N-1 \end{cases} \quad (8)$$

где было введено обозначение $\mu'(z) = \frac{d\mu}{dz}$. Таким

образом симметричная фаза многослойной системы определяется условием положительности функционала $\Phi[\mu]$ при любых малых функциях $\mu(z)$, удовлетворяющих системе граничных условий (8).

3. Система двух магнитных плёнок

Для системы из двух плёнок функционал (7) и граничные условия (8) принимают вид:

$$\begin{aligned} \Phi[\mu] = & 2 \int_0^{h_1} \left\{ a_1 \mu^2 + 2g_1 (\mu')^2 \right\} dz + \\ & + 2 \int_{h_1}^{h_1+h_2} \left\{ a_2 \mu^2 + 2g_2 (\mu')^2 \right\} dz + \alpha \mu_2 \mu_3 \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{cases} \mu'_1 = \mu'(0) = 0 \\ \mu'_{2N} = \mu'(h_1 + h_2) = 0 \\ \alpha \mu_2 - 2g_2 \mu'_3 = 0 = \alpha \mu(h_1 - 0) - 2g_2 \mu'(h_1 + 0) \\ \alpha \mu_3 + 2g_1 \mu'_2 = 0 = \alpha \mu(h_1 + 0) + 2g_1 \mu'(h_1 - 0), \end{cases} \quad (10)$$

где было использовано определение величин μ_i .

Вариации $\mu(z)$ в виде:

$$\begin{aligned} \mu(z) &= A_1 \cos(k_1 z), \quad 0 < z < h_1 \\ \mu(z) &= A_2 \cos(k_2 (z - h_1 - h_2)), \quad h_1 < z < h_1 + h_2 \end{aligned} \quad (11)$$

автоматически удовлетворяют первым двум граничным условиям (10); где A_1, A_2, k_1, k_2 – произвольные малые константы, удовлетворяющие условию применимости приближения самосогласованного поля и граничным условиям (10). Подставляя (11) в (10), находим соотношения между константами k_1, k_2 и A_1, A_2 :

$$\delta_1 \tan \delta_1 \cdot \delta_2 \tan \delta_2 = \frac{\alpha^2 h_1 h_2}{4 g_1 g_2} = \alpha_0, \quad (12)$$

$$A_1 = A_2 \frac{2 g_2 \delta_2 \sin \delta_2}{h_2 \alpha \cos \delta_1}, \quad (13)$$

$$\frac{a_1}{g_1} h_1^2 \left\{ \frac{1 + \tan^2 \delta_1}{\delta_1 \tan \delta_1} + \frac{g_1}{a_1 h_1^2} \frac{\delta_1 [1 + \tan^2 \delta_1]}{\tan \delta_1} + \frac{1}{\delta_1^2} \right\} + \frac{a_2}{g_2} h_2^2 \left\{ \frac{1 + \tan^2 \delta_2}{\delta_2 \tan \delta_2} + \frac{g_2}{a_2 h_2^2} \frac{\delta_2 [1 + \tan^2 \delta_2]}{\tan \delta_2} + \frac{1}{\delta_2^2} \right\} > 0 \quad (14)$$

при выполнении условия (12).

Проанализируем выражение (14) при малых значениях константы межплёночной связи (или при малых толщинах плёнок): $\alpha_0 \ll 1$, то есть $h_1 h_2 \ll d_1 d_2$ (где $d_1 = 2 g_1 / \alpha$, $d_2 = 2 g_2 / \alpha$). Требование малости градиентов $\mu(z)$ приводит к требованию одновременной малости δ_1 и δ_2 , поэтому неравенство (14) должно выполняться при условии $\delta_1 \tan \delta_1 \sim \delta_2 \tan \delta_2 \sim \sqrt{\alpha_0}$, или так как $\alpha_0 \ll 1$, то $\delta_1 \sim \sqrt{\alpha_0} \sim \delta_2$. При этом условии неравенство (14) принимает вид:

$$\left(\frac{a_1}{g_1} h_1^2 + \frac{a_2}{g_2} h_2^2 \right) (2 + \sqrt{\alpha_0}) + 2(\alpha_0 + \sqrt{\alpha_0}) > 0 \quad (15)$$

Наиболее сильную зависимость от температуры имеют коэффициенты a_1 и a_2 : $a_1 = \beta_1 (T - T_1)$ и $a_2 = \beta_2 (T - T_2)$, где T_1 и T_2 – температуры Кюри плёнок 1 и 2 соответственно. Пусть для определенности $T_1 < T_2$, тогда при температурах $T > T_2$ коэффициенты a_1 и a_2 положительны и неравенство (15) выполняется автоматически, то есть при $T > T_2$ система находится в магнито неупорядоченном состоянии.

При $T_1 < T < T_2$: $a_1 = \beta_1 (T - T_1) > 0$, $a_2 = -\beta_2 (T_2 - T) < 0$, тогда условие (15) принимает вид:

$$\frac{h_2^2}{l_2^2} - \frac{h_1^2}{l_1^2} < \sqrt{\alpha_0} \left(1 + \frac{\sqrt{\alpha_0}}{2} \right) \sim \sqrt{\alpha_0}, \quad (16)$$

где $l_1 = \sqrt{\frac{g_1}{a_1}}$, $l_2 = \sqrt{\frac{g_2}{|a_2|}}$ – корреляционные длины.

В этом случае плёнка 2 стремится перевести систему в магнито упорядоченное состояние, в то время как плёнке 1 энергетически выгоднее оставаться в симметричной фазе.

Используя явную зависимость l_1 и l_2 от температуры:

где $\delta_1 = k_1 h_1$, $\delta_2 = k_2 h_2$.

Подставляя (11) в (9) и используя соотношения (12), (13), получаем условие существования симметричной (высокотемпературной) фазы:

$$l_1 = \sqrt{\frac{g_1}{\beta_1 |T - T_1|}}, \quad l_2 = \sqrt{\frac{g_2}{\beta_2 |T_2 - T|}}, \quad (17)$$

из неравенства (16) находим безразмерную температуру перехода τ_c в магнитоупорядоченное состояние:

$$\tau_c = \frac{T_c - T_1}{T_2 - T_1} = \frac{\gamma_2}{\gamma_2 + \gamma_1} - \frac{\sqrt{\alpha_0}}{(\gamma_2 + \gamma_1)(T_2 - T_1)}, \quad (18)$$

где для удобства записи были введены обозначения:

$$\gamma_1 = \frac{h_1^2 \beta_1}{g_1} \quad \text{и} \quad \gamma_2 = \frac{h_2^2 \beta_2}{g_2}$$

Из выражения (18) следует, что температура перехода T_c достигает температуры перехода плёнки "1" (то есть $\tau_c = 0$) при конечной толщине $h_2^{(c)}$ плёнки "2":

$$h_2^{(c)} = \left(\frac{g_2}{\beta_2 (T_2 - T_1)} \right)^{2/3} \left(\frac{h_1}{d_1 d_2} \right)^{1/3} \quad (19)$$

При увеличении толщины h_2 температура фазового перехода T_c стремится к температуре Кюри плёнки 2, T_2 .

При $T < T_1$ коэффициенты $a_1 = -\beta_1 (T_1 - T) < 0$ и $a_2 = -\beta_2 (T_2 - T) < 0$ отрицательны, тогда условие (15) принимает вид:

$$\frac{h_2^2}{l_2^2} + \frac{h_1^2}{l_1^2} < \sqrt{\alpha_0}, \quad (20)$$

где $l_1 = \sqrt{\frac{g_1}{|a_1|}}$. Тогда из неравенства (20) получаем

выражения для температуры перехода – уравнение (18).

На рис.1 схематически показаны графики зависимости безразмерной температуры перехода τ_c (уравнение (18)) от толщины плёнок. Из рисунка видно, что при $h_2 < h_2^{(c)}$ (или

$$h_1 > h_1^{(c)} = h_2^3 d_1 d_2 \left(\beta_2 (T_2 - T_1) / g_2 \right)^2 \quad \tau_c < 0, \text{ и, не}$$

смотря на то, что обе плёнки находятся при температуре, ниже чем их температура Кюри, магнитного упорядочения не наступает, что связано с появлением наряду с магнитным упорядочением в каждой из плёнок градиентов локального магнитного момента вследствие наличия связи обменного характера на границе раздела двух плёнок. Эти градиента повышают энергию системы при ненулевом магнитном моменте, что приводит к тому, что состояние с нулевым магнитным моментом обладает наименьшей энергией.

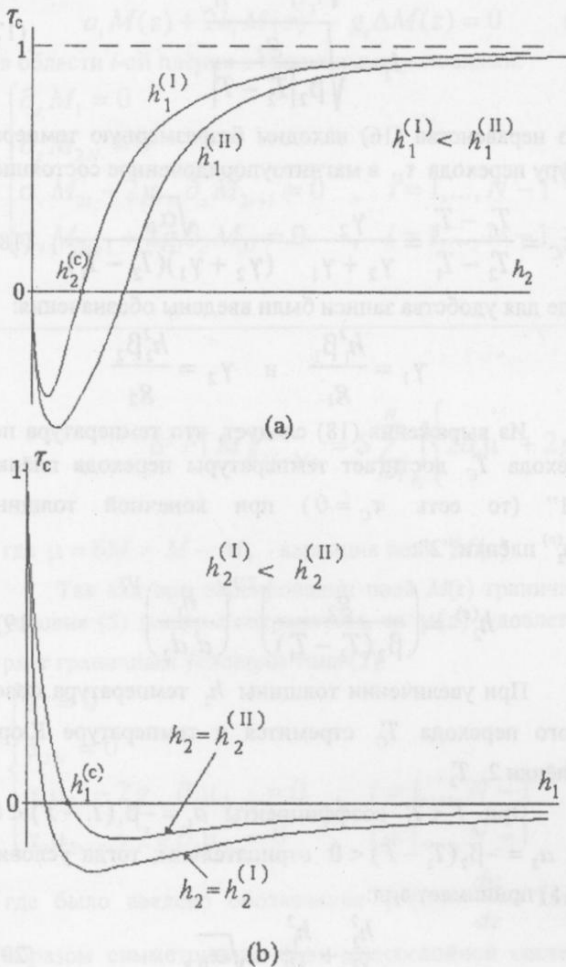


Рис. 1. Схематически показана безразмерная температуры перехода в магнитоупорядоченное состояние τ_c (уравнение (18)) как функция толщин: (а) плёнки "2"; (б) плёнки "1". Температура Кюри плёнки "2" больше, чем температура Кюри плёнки "1".

На рис. 2 схематически представлены фазовые кривые на плоскости $h_1 - h_2$ описывающие переход в

магнитоупорядоченное состояние с данной температурой перехода τ_c при фиксированном значении межплёночного взаимодействия (уравнение (18)). При этом симметричная фаза (нулевой магнитный момент) находится выше соответствующей кривой при неизменной температуре, равной температуре фазового перехода на этой кривой.

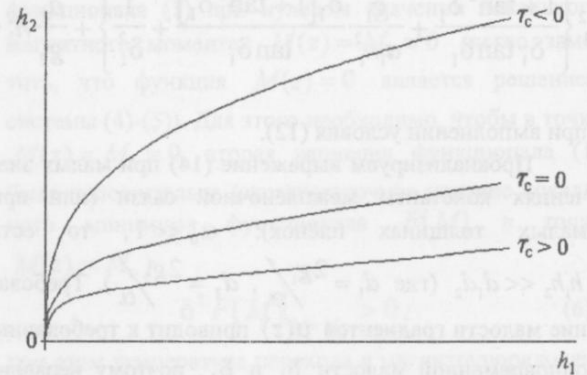


Рис. 2. Схематически представлены фазовые кривые на плоскости $h_1 - h_2$, описывающие переход в магнитоупорядоченное состояние с данной температурой перехода τ_c (уравнение (18)). Симметричная фаза (с нулевым магнитным моментом) расположена выше соответствующей кривой при неизменной температуре, равной температуре фазового перехода на этой кривой.

Следует отметить, что, как упоминалось выше, полученные результаты справедливы при достаточно малых толщинах плёнок (или при достаточно малом межплёночном взаимодействии):

$$\alpha_0 = \frac{h_1 h_2}{d_1 d_2} = \frac{h_1 h_2}{4 g_1 g_2} \alpha^2 \ll 1 \quad (21)$$

В рамках микроскопической модели Гейзенберга константы g_1 и g_2 определяются выражениями [5]:

$$g_1 \cong \frac{z_1 J_1 \delta_1}{2}, \quad g_2 \cong \frac{z_2 J_2 \delta_2}{2}, \quad (22)$$

где z_1, z_2 — координационные числа (число ближайших спинов) в плёнках 1 и 2 соответственно; J_1, J_2 — константы обменного взаимодействия; δ_1, δ_2 — расстояния между соседними спинами в плёнках 1 и 2 соответственно. Подставляя (22) в (21), получаем неравенство:

$$\frac{\alpha^2}{J_1 J_2} \ll z_1 z_2 \frac{\delta_1 \delta_2}{h_1 h_2} \quad (23)$$

При $\delta_1 \sim 5A \sim \delta_2$, $h_1 \sim 100A \sim h_2$ и $z_1 \sim 6 \sim z_2$ из выражения (23) находим ограничения на константу межплёночного взаимодействия: $\frac{\alpha^2}{J_1 J_2} \ll 0.1$.

Используя выражение (22) и выражение для дроби $g_2 / \beta_2 (T_2 - T_1)$ в модели Гейзенберга [5]:

$$\frac{g_2}{\beta_2 (T_2 - T_1)} \cong \delta_2^2 \frac{T_2}{6(T_2 - T_1)}, \quad (24)$$

находим значение критической толщины плёнки 2:

$$h_2^{(c)} \cong \delta_2^3 \sqrt{\frac{h_1}{\delta_1} \left(\frac{T_2}{T_2 - T_1} \right)^2 \frac{\alpha}{J_1 J_2} \frac{1}{z_1 z_2}} \quad (25)$$

При $\delta_1 \sim 5A \sim \delta_2$, $z_1 \sim 6 \sim z_2$, $T_2 \sim 1000K$, $T_2 - T_1 \sim 10K$, $\alpha / (J_1 J_2) \sim 0.05$ и $h_1 \sim 300A$ для критической толщины получаем оценку: $h_2^{(2)} \sim 60A$.

4. Заключение.

В работе в рамках самосогласованного поля было рассмотрено влияние параметров системы многих плёнок на температуру перехода в магнитоупорядоченное состояние. Детально произведен анализ системы из двух ферромагнитных плёнок. Показано, что изменяя толщину плёнок, можно управлять температурой перехода в магнитоупорядоченное состояние. При определенных соотношениях между параметрами системы можно понизить температуру перехода ниже, чем температура Кюри каждой из плёнок. Это связано с неизбежным появлением градиентов локального магнитного момента при ненулевой намагниченности системы вследствие межплёночного взаимодействия, что приводит к положительной добавке к свободной

энергии, и при определенных соотношениях состояние с нулевым магнитным моментом оказывается более энергетически выгодным.

1. P. Politi, препринт - *cond-mat/9712207* (1997).
2. A. Hucht, K.D. Usadel, *Phys. Rev.*, **В 55**, 12309 (1997).
3. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1976).
4. А.З. Паташинский, В.Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1982).
5. R.M. White, T.H. Geballe, *Solid State Physics: Long Range Order in Solids*, Academic Press, New York, San Francisco, London (1979).

The temperature of magnetic ordering in thin magnetic films

V.V Slezov, Yu.I. Boiko, V.M. Apalkov,
H. Worch

The system of magnetic films with exchange-like interlayer interaction are considered in the frame of mean field approach. The system of two ferromagnetic films are thoroughly studied. The expression for the temperature of magnetic ordering is found as a function of the thickness of the films. It is shown that it is possible to handle with the temperature of magnetic ordering by changing the parameters of the system (for example, the thickness of the films), and under some relations between the parameters of the system it is possible even to have the temperature of magnetic ordering less than the Curie temperatures of the constituting films.

Коллективные и одночастичные возбуждения спиновой системы неферромагнитных металлов с квазилокальными состояниями электронов

А.М. Ермолаев, Н.В. Ульянов

Харьковский государственный университет,

Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы 4

E-mail: Alexander.M.Ermolaev@univer.kharkov.ua

Предсказаны новые ветви спектра спиновых возбуждений в неферромагнитных металлах с квазилокальными состояниями электронов. Рассмотрено неупругое магнитное рассеяние нейтронов этими возбуждениями.

Передбачено нові вітки спектра спінових збуджень у неферромагнітному металі, які зумовлено квазилокальними станами електронів. Розглянуто непружне магнітне розсіяння нейтронів цими збудженнями.

PACS: 73.20.Mf, 71.45.-d, 71.50.+t

Здесь рассматриваются новые типы спиновых возбуждений в неферромагнитных металлах в магнитном поле. Они существуют в проводниках с малой концентрацией примесных атомов, на которых образуются квазилокальные состояния электронов [1]. Их характеристики (положения и ширины резонансов, вычеты амплитуды рассеяния в комплексных полюсах) найдены методом температурных функций Грина.

Резонансы электронов проводимости влияют на плотность электронных состояний. В частности, при малой величине плотности состояний чистого образца электрон и примесь могут образовывать "связанное состояние", которое обладает положительной энергией. Комбинируя с состояниями сплошного спектра с той же энергией, оно приобретает конечную ширину Γ и становится квазилокальным. Можно считать, что электроны захватываются на какое-то время на квазилокальный уровень, а затем испускаются.

Наряду с квазилокальными, существуют магнитопримесные электронные состояния. Физической причиной образования этих резонансных состояний в металлах является локализация электронов на изолированных примесных атомах, стимулированная магнитным полем.

В неферромагнитных образцах без квазилокальных состояний спиновые возбуждения могут распространяться в виде волн за счет обменного взаимодействия коллективизированных электронов [2]. Из кинетического уравнения для векторной спиновой плотности электронов следуют характеристики спиновых волн – закон дисперсии, декремент затухания, поляризация. Например, предельная частота поперечных волн с "правой" круговой поляризацией равна $\Omega_0(1 - B_0)$, где Ω_0 – частота спинового резонанса электронов, а B_0 – константа, которой аппроксимируется спиновая часть функции взаимодействия квазичастиц ферми-жидкости. Декремент затухания этих волн пропорционален частоте релаксации спиновой намагниченности электронов.

Исследование высокочастотных свойств электронной ферми-жидкости нормального проводника с малой концентрацией примесных атомов при наличии квантующего магнитного поля приводит к следующим результатам. В отсутствие квазилокальных состояний компоненты тензора динамической спиновой восприимчивости электронов имеют особенность на частоте парамагнитного резонанса. Дисперсионное уравнение для спектра поперечных спиновых волн с "правой"

поляризацией в приближении случайных фаз имеет вид:

$$1 - \frac{I}{2\mu^2} \chi_-(\vec{q}, \omega) = 0, \quad (1)$$

где I – константа ферми-жидкостного взаимодействия, μ – магнитный момент электрона, χ_- – циркулярная компонента динамической спиновой восприимчивости электронов, зависящая от волнового вектора $\vec{q}$ и частоты ω .

Квазилокальные состояния электронов обуславливают резонансные вклады в поперечные компоненты тензора динамической спиновой восприимчивости неферромагнитного металла в магнитном поле. Резонансные частоты равны частотам резонансных переходов электронов между уровнями Ландау и квазилокальными уровнями, индуцированными переменным магнитным полем. Например, на частоте переходов

$$\omega_{rn} = \omega_0 + \Omega_0 + n\Omega \quad (2)$$

($\hbar\omega_0$ – расстояние между квазилокальным уровнем и ближайшим к нему уровнем Ландау, который лежит выше, $\hbar$ – постоянная Планка, Ω – циклотронная частота, $n = 0, 1, 2, \dots$ – номер резонанса) с перебором спина $\downarrow \rightarrow \uparrow$ резонанс имеет компонента χ_- . Вблизи резонанса она содержит вклад:

$$\delta\chi_- = \chi_P a_n^-(q) i \left(\frac{\omega_{rn}}{\omega - \omega_{rn} + i \frac{\Gamma_-}{\hbar}} \right)^{\frac{1}{2}},$$

где χ_P – паулиевская восприимчивость, a_n^- – силы осцилляторов резонансных переходов электронов. В пренебрежении пространственной дисперсией ($q = 0$) они равны

$$\gamma_n(q) = \frac{\Gamma_-}{\hbar} + 2v_2(a_n^-)^2 b_n^3 \frac{\Omega_0 \omega_n}{\omega_{rn}^2} \left[1 + \frac{b_n}{3} \left(\frac{qv_F}{\omega_n} \right)^2 \right]^{-3}. \quad (3)$$

Здесь

$$b_n = \frac{\omega_{rn} |B_0|}{\omega_n + \Omega_0 |B_0|},$$

v_F – скорость электронов на границе Ферми, а v_2 – частота релаксации спиновой намагниченности. Эти волны слабо затухают в полосах прозрачности вблизи резонансных частот. Ширины полос прозрачности равны

$$\Delta\omega_n = \omega_{rn} \left(a_n^- b_n \frac{\omega_n}{\omega_{rn}} \right)^2.$$

$$a_n^- = \frac{\pi \hbar \Omega r_i n_i}{2(\hbar\omega_n)^2 (\epsilon_F \hbar\omega_m)^{1/2}} [f(\epsilon_{r_i}) - f(\epsilon_{r_i} + \hbar\omega_m)].$$

Здесь r_i – вычет амплитуды рассеяния электронов примесным атомом в полюсе, n_i – концентрация примесей, $\omega_n = \omega_0 + n\Omega$, ϵ_F – энергия Ферми, ϵ_{r_i} – положение квазилокального уровня со спином "вниз", $f(\epsilon)$ – функция Ферми. Закон дисперсии электронов при этом считается изотропным и квадратичным.

Анизотропия энергетического спектра носителей в проводниках, в которых поверхность Ферми имеет вид эллипсоида вращения, приводит к тому, что резонансные компоненты тензора динамической спиновой восприимчивости электронов с квазилокальными состояниями на примесных атомах зависят от угла между вектором напряженности магнитного поля, в которое помещен образец, и осью вращения эллипсоида.

Если в дисперсионном уравнении (1) учесть квантование Ландау и квазилокальные состояния электронов, а также ферми-жидкостные эффекты, то вблизи частот типа (2) появляются новые ветви спектра спиновых волн [3,4]. Из (1) находим их характеристики – закон дисперсии, декремент затухания, поляризацию. Например, вблизи частот (2) существуют новые ветви поперечных спиновых волн с "правой" круговой поляризацией. Их спектр имеет вид

$$\omega_n(q) = \omega_{rn} \left\{ 1 - \left[a_n^- b_n \frac{\omega_n / \omega_{rn}}{1 + \frac{b_n}{3} \left(\frac{qv_F}{\omega_n} \right)^2} \right]^2 \right\},$$

а декремент затухания –

Характеристики новых типов спиновых волн зависят от угла между вектором напряженности магнитного поля и направлением распространения волны. Существует критическое значение этого угла, при котором нормальная дисперсия волн сменяется аномальной.

Квазилокальные состояния электронов на изолированных примесных атомах в неферромагнитных металлах в квантующем магнитном поле влияют на свойства медленных поперечных квантовых спиновых волн, фазовая скорость которых не превышает скорости фермиевских электронов на последней заполненной трубке Ландау. В области пересечения диспер-

сионной кривой квантовой спиновой волны с частотой резонансных переходов электронов между квазилокальными уровнями и уровнями Ландау возникает кроссовая ситуация, сопровождающаяся перестройкой спектра волн. В результате взаимодействия колебаний спиновой намагниченности электронов при резонансе с колебаниями в процессе распространения спиновой волны в каждом окне прозрачности вместо одной ветви спектра волн появляются две – низкочастотная и высокочастотная. Дисперсия волн нормальная, а декремент затухания определяется шириной квазилокального уровня и частотой релаксации спиновой намагниченности электронов [4].

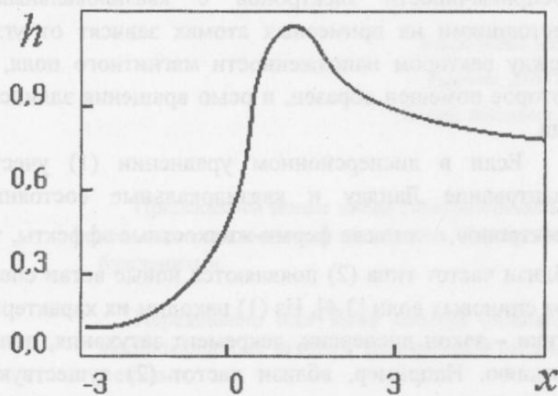


Рис. 1. Зависимость дифференциального сечения рассеяния нейтронов от потери энергии.

Тензор динамической спиновой восприимчивости электронов определяет сечение магнитного рассеяния нейтронов. Резонансные переходы электронов между квазилокальными и зонными состояниями приводят к новым особенностям динамической спиновой восприимчивости. Эти особенности должны проявляться и в сечении неупругого магнитного рассеяния нейтронов. В энергетическом спектре рассеянных нейтронов наблюдаются пики, когда переданная нейтроном энергия пропорциональна резонансной частоте. Известно, что на кривой зависимости дифференциального сечения рассеяния от передачи энергии нейтрона присутствуют максимумы, обусловленные одночастичными стонеровскими возбуждениями электронов. Максимумы расположены в пределах секторов Стонера. В металлах с квазилокальными

состояниями должны присутствовать дополнительные всплески, связанные с одночастичными возбуждениями локализованных на примесях электронов магнитным полем нейтрона. Максимумы дифференциального сечения рассеяния за счет переходов электронов с перебросом спина $\downarrow \rightarrow \uparrow$, пропорциональные

$$a_n^- \left(\frac{\hbar \omega_{rn}}{2\Gamma} \right)^{\frac{1}{2}}, \text{ расположены вне секторов Стонера.}$$

Они асимметричны. Характер асимметрии зависит от типа перехода. На рис. 1 показана зависимость дважды дифференциального сечения магнитного рассеяния нейтронов, выраженного в безразмерных единицах, от

$$x = \frac{\omega - \omega_{rn}}{\omega_{rn}}.$$

При рассеянии медленных нейтронов коллективными возбуждениями спиновой системы неферромагнитного металла – новыми типами спиновых волн – обнаружены новые симметричные максимумы сечения. Вблизи частоты (2) величина n -го максимума пропорциональна

$$h_n = \frac{2}{(I g_F)^2 a_n^-} \left(\frac{\Delta \omega_n}{\omega_m} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\Delta \omega_n}{\gamma_n}, \quad (4)$$

где g_F – плотность электронных состояний на границе Ферми. Ширина максимума (4) совпадает с декрементом затухания волн (3).

1. И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А. Пастур, *Введение в теорию неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1982).
2. В.П. Силин, *ЖЭТФ*, **35**, 1243 (1958).
3. А.М. Ермолаев, Н.В. Ульянов, *ФНТ*, **18**, 1375 (1992).
4. А.М. Ермолаев, Н.В. Ульянов, *ФНТ*, **20**, 366 (1994).

Collective and single-particle excitations of spin system of nonferromagnetic metals with quasilocal electron states

A.M. Ermolaev, N.V. Ulyanov

New spectrum branches of spin excitations due to quasilocal electron states are predicted in nonferromagnetic metals. The inelastic magnetic scattering of neutrons by these excitations is consider.

Нормальные моды конечномерной спиновой системы со свободной границей в вихревой конфигурации

А.С. Ковалёв¹, Я.Е. Прилепский²

¹Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины

Украина, 310164, г. Харьков, просп. Ленина, 47

E-mail: kovalev@ilt.kharkov.ua

²Харьковский государственный университет

Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы, 4

Исследован спектр собственных колебаний комплекса из 8 спинов, моделирующего магнитный вихрь в двумерном классическом гейзенберговском ферромагнетике с легкоплоскостной обменной анизотропией и трансформация этого спектра при изменении величины анизотропии.

Досліджено спектр власних коливань комплексу з восьми спінів, моделюючого магнітний вихорь у двовимірному класичному гайзенбергівському ферромагнетикі з легко-площинною обмінною анізотропією та трансформацію цього спектру при зміні величини анізотропії.

PACS: 75.10.Hk, 75.30.Ds, 75.40.Gb, 75.40.Mg.

Магнитные вихри привлекли внимание как теоретиков, так и экспериментаторов в связи с их существенным вкладом в спиновую динамику и важной ролью при фазовых переходах в двумерных и квазидвумерных магнитных системах [1,2]. Ранее, при численном моделировании таких вихрей [2,4] и аналитическом исследовании конечномерных систем [3] в вихревой конфигурации было показано, что в случае легкоплоскостного ферромагнетика с сильной анизотропией спины не выходят из "лёгкой плоскости", образуя конфигурацию "in-plane" - вихрь (IPV), а в случае слабой анизотропии возникает конфигурация "out-of-plane" - вихрь (OPV), с ненулевой компонентой намагниченности, перпендикулярной "лёгкой плоскости". Изменение структуры вихря и его переход из IPV в OPV конфигурацию сопровождается существенной перестройкой спектра линейных спиновых волн в системе [4]. В частности, при фиксации спинов на границе магнетика (условие Дирихле) в точке перехода происходит обращение в ноль частоты основной низлежащей моды спектра магнонов. Динамика IP- и OP-вихрей также сильно отличается: в то время, как IP-вихри движутся в магнетике как частицы, подчиняясь эффективному ньютоновским уравнениям, движение OP-вихрей носит более слож-

ный характер и определяется уравнением Тия [5]. В основном приближении OP-вихрь в системе размером L под действием гиротропной силы медленно вращается с частотой $\Omega \sim 1/L^2$. Однако, как показали численные расчеты [6,7], это движение сопровождается быстрыми осцилляциями с частотой $\omega \sim 1/L$. Поскольку эта величина имеет порядок собственных частот спиновых мод в системе размера L , было очевидно, что указанные вторичные осцилляции связаны со взаимодействием вихрей с внутренними модами магнитной системы. Вопросу о собственных модах магнетика в присутствии вихря посвящено большое число работ [4,8,9]. Хотя даже в случае слабой анизотропии ядро вихря имеет микроскопический размер (порядка нескольких межатомных расстояний), его влияние на спектр спиновых волн существенно. Кроме того, принципиально важной является дискретная структура ядра - сам IPV/OPV переход существует лишь при учете этой дискретности. Поэтому большая часть расчетов спектров магнонов проводилась численно [4,9] для конкретных размеров систем, типов решётки и граничных условий. Полученные результаты не всегда применимы для объяснения данных моделирования сложной динамики вихрей. Так, спектры спиновых волн в присутствии вихря вычис-

лялись, как правило, для случая фиксированных спинов на границе, в то время как моделирование вторичных осцилляций вихря проводилось для свободных границ (неймановские условия). В связи с этим ряд последних результатов (в частности, возможность существования моды с аномально малой частотой, вращающейся синхронно с вихрем) не могут быть объяснены известными данными для спектров магнов. Это послужило причиной аналитического исследования динамики конечномерной спиновой системы в вихревой конфигурации в данной работе.

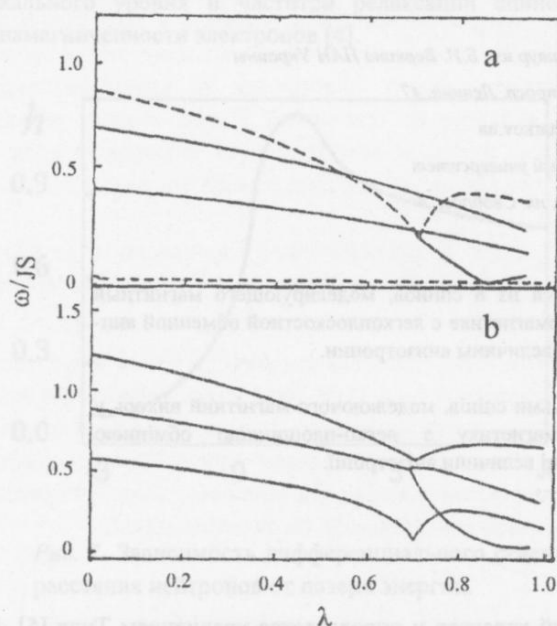


Рис. 1. Низкочастотная область спектра собственных мод спиновой системы из 180 спинов со свободными (а) и фиксированными (б) границами (из [4]).

Рассмотрим двумерную классическую анизотропную гейзенберговскую модель ферромагнетика с легкоплоскостной обменной анизотропией и гамильтонианом

$$H = -J \sum_{n,\delta} (S_n^x S_{n+\delta}^x + S_n^y S_{n+\delta}^y + \lambda S_n^z S_{n+\delta}^z), \quad (1)$$

где J - константа обменного взаимодействия, $\vec{S}$ - узелный спин, λ - параметр обменной анизотропии ($0 \leq \lambda \leq 1$), и суммирование производится по всем узлам решётки n и ближайшим соседям с номерами δ [3].

Точка перехода вихря из IP-конфигурации в ОР-форму в макроскопической системе зависит в основном от типа спиновой решётки и слабо зависит от её размера. Так, для квадратичной решётки критическое значение λ_c , при котором происходит IPV/OPV переход, равно $\lambda_c \approx 0.7$. Для такой решётки и области

магнетика в виде круга радиуса 7.5 (постоянная решётки принята равной единице), содержащего в центре магнитный вихрь, спектр спиновых волн для граничных условий Дирихле и Неймана был найден численно в работе [4]. Первые низколежащие ветви спектра в этом случае (из работы [4]) приведены на рис.1. Видно, что они существенно различаются для граничных условий неймановского типа (рис.1а) и условий типа Дирихле (рис.1б). При фиксированной

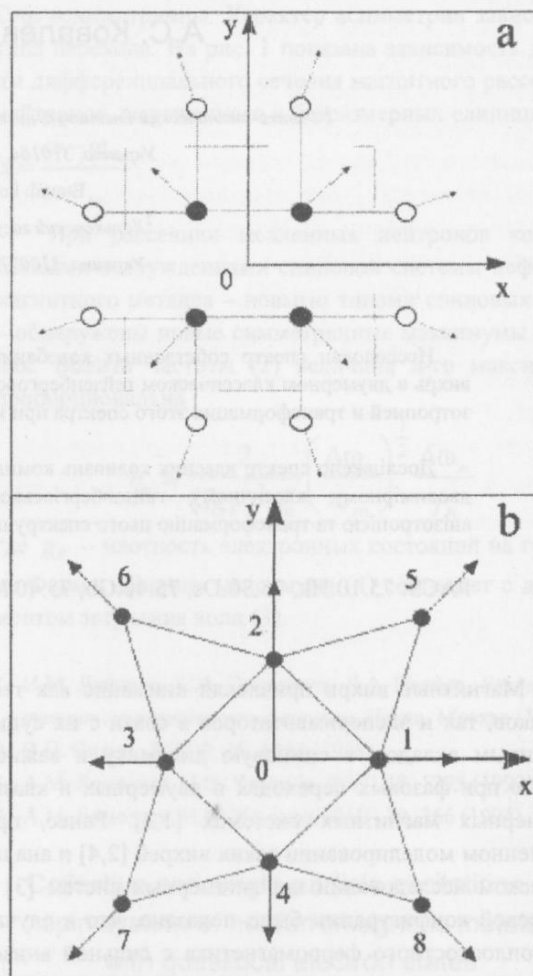


Рис. 2. Модельные системы с конечным числом спинов в вихревой конфигурации с фиксированными (а) и свободными (б) спинами на границах.

границе (рис.1б) частота основной (симметричной) моды обращается в ноль, и частотная зависимость для неё имеет излом в критической точке $\lambda = \lambda_c$. Следующая мода (основная азимутальная) расщепляется на две при $\lambda > \lambda_c$ (нижняя ветвь дублета соответствует вращению волны по часовой стрелке, а верхняя - против часовой стрелки). Моды из этих расщеплённых дублетов вызывают вторичные осцилляции магнитных вихрей [10]. В случае свободной границы (рис.1а) основная симметричная мода становится

сдвиговой (ее частота тождественно равна нулю при всех значениях λ). Частоты остальных мод не обращаются в ноль в критической точке, хотя частотная зависимость претерпевает резкий излом для первой ненулевой симметричной моды. Основная азимутальная мода, как и в случае (b), расщепляется в дублет при $\lambda = \lambda_c$. При этом частота нижней ветви дублета

обращается в ноль при $\lambda_c < \lambda_0 < 1$. При меньших значениях анизотропии ($\lambda > \lambda_0$) частота этой ветви меняет знак. По-видимому, эта низкочастотная ветвь ответственна за наблюдавшуюся в последних численных экспериментах моду, вращающуюся синфазно с вихрем.

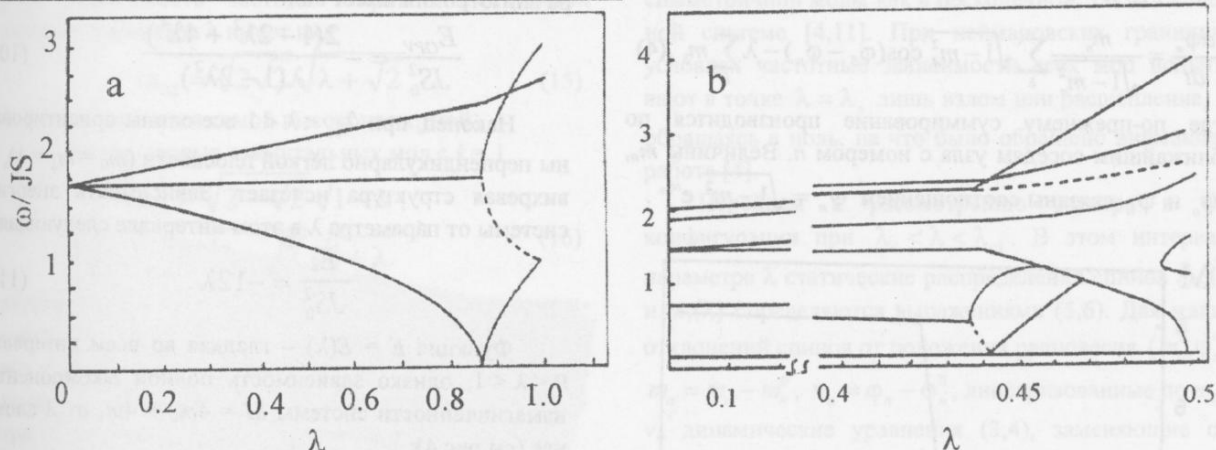


Рис. 3. Спектры собственных колебаний системы конечного числа спинов в вихревой конфигурации с (a) фиксированными спинами на границе (соответствующий рис. 2a) и (b) со свободными граничными спинами (см. рис. 2b).

В предыдущей статье [11] нами был рассмотрен фрагмент квадратной спиновой решётки, содержащей 12 узлов с вихрем в центре элементарной ячейки, моделирующий систему с фиксированной границей (рис.2a). Четыре центральных спина вокруг ядра вихря предполагались подвижными, а 8 спинов из второй координационной “сферы” были фиксированы в положении равновесной конфигурации IP-вихря. В работе [11] мы использовали несколько иной гамильтониан, учитывающий одноионную анизотропию, однако качественно результаты двух моделей при λ близких к единице совпадают. Для системы, изображенной на рис. 2a, описываемой классическими уравнениями Ландау-Лифшица с гамильтонианом (1),

критическое значение λ равно $\lambda_c^I = \frac{\sqrt{3}}{2} = 0.87$ и

близко к полученному численно в работе [12], а спектр собственных мод системы изображен на рис.3a. Спектр состоит из четырех ветвей (поскольку свободными являются лишь 4 спина), качественно напоминающих нижние ветви в системе 180 спинов из работы [4] (см. рис.1b): частота основной симметричной моды обращается в ноль в критической точке, а частоты азимутальных вращающихся мод в этой точке расщепляются.

Основной задачей данного сообщения является аналитическое нахождение спектра собственных мод ограниченной системы с небольшим числом узлов со

свободными спинами на границе и его сравнение со спектром из работы [4] для системы из 180 спинов, изображенном на рис.1a. Сложность проблемы заключается в том, что в простейшем случае четырех спинов в вихревой конфигурации IP-вихри вообще не существуют и отсутствует структурный IPV/OPV переход. В модели, содержащей 12 спинов из двух первых координационных сфер (см. рис.2a), такой переход существует, однако задача осложняется тем, что в основном состоянии теряется радиальная симметрия вихря, т.е. $\phi_n \neq \chi_n + C$, где ϕ_n – угол поворота n -го спина в легкой плоскости, χ_n – угловая координата n -го узла и C – произвольная константа. Простейшая модель со свободными границами, допускающая структурный IPV/OPV переход с радиально-симметричным вихрем, изображена на рис.2b. Однако и в этом простейшем случае спектр собственных мод содержит уже 8 ветвей.

Каждый из спинов характеризуется углом поворота ϕ_n в плоскости XY, отсчитываемым от оси X, и величиной их z -вой компоненты $S_n^z \equiv S_0 m_n$, где S_0 – величина узельного спина. Удобно ввести комплексную величину $\psi_n = (S_n^x + iS_n^y) / S_0$, являющуюся классическим аналогом оператора рождения магнов. Если время измеряется в единицах $1/\omega_0$, где $\omega_0 = JS_0 / \hbar$, то в терминах переменных (ψ_n, m_n) классические уравнения динамики спиновой системы

(дискретные уравнения Ландау-Лифшица) будут иметь следующий безразмерный вид:

$$-i \frac{d}{dt} \psi_n = m_n \sum_{\delta} \psi_{\delta} - \lambda \psi_n \sum_{\delta} m_{\delta}, \quad (2)$$

или в терминах (m_n, φ_n) :

$$-\frac{dm_n}{dt} = \sqrt{1-m_n^2} \sum_{\delta} \sqrt{1-m_{\delta}^2} \sin(\varphi_{\delta} - \varphi_n) \quad (3)$$

$$-\frac{d\varphi_n}{dt} = \frac{m_n}{\sqrt{1-m_n^2}} \sum_{\delta} \sqrt{1-m_{\delta}^2} \cos(\varphi_{\delta} - \varphi_n) - \lambda \sum_{\delta} m_{\delta}, \quad (4)$$

где по-прежнему суммирование производится по ближайшим соседям узла с номером n . Величины m_n , φ_n и ψ_n связаны соотношением $\psi_n = \sqrt{1-m_n^2} e^{i\varphi_n}$.

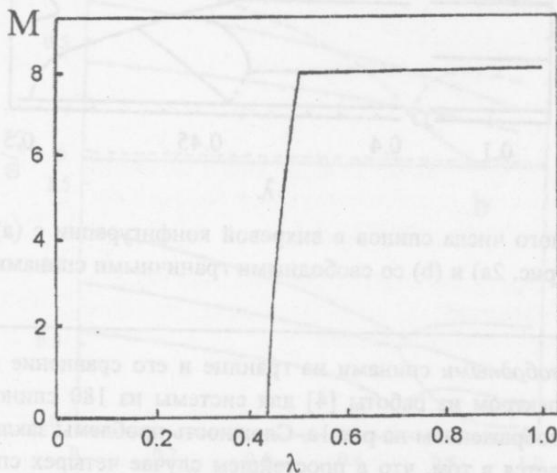


Рис. 4. Зависимость z-проекции полной намагниченности от параметра анизотропии λ .

В статической конфигурации z-компоненты центральных спинов m_0 одинаковы, как и z-компоненты периферийных спинов из второй координатной сферы m_1 . Уравнения, определяющие зависимость m_0 и m_1 от параметра анизотропии λ , имеют вид:

$$m_0 \sqrt{1-m_1^2} - \sqrt{2}\lambda(m_0 + m_1) \sqrt{1-m_0^2} = 0, \quad (5)$$

$$m_1 \sqrt{1-m_0^2} - \sqrt{2}\lambda m_0 \sqrt{1-m_1^2} = 0. \quad (6)$$

Зависимости $m_0(\lambda)$ и $m_1(\lambda)$ в IPV и OPV-конфигурациях следующие:

В IPV-конфигурации $m_0 = m_1 = 0$ при

$$\lambda < \lambda_c = \sqrt{\frac{3-\sqrt{5}}{4}} \approx 0.437, \quad (7)$$

а полная энергия равна

$$\frac{E_{IPV}}{JS_0^2} = -4\sqrt{2} \quad (8)$$

и не зависит от параметра λ .

В OPV-конфигурации при $\lambda_c < \lambda < \lambda_{c1} = 1/2$

$$m_0(\lambda) = \sqrt{\frac{6\lambda^2 - 1 - 4\lambda^4}{(1-2\lambda^2)2\lambda^2}}, \quad (9)$$

$$m_1(\lambda) = \sqrt{\frac{(6\lambda^2 - 1 - 4\lambda^4)2\lambda^2}{(1-2\lambda^2)^3}},$$

и зависимость обменной энергии системы от параметра анизотропии имеет вид:

$$\frac{E_{OPV}}{JS_0^2} = -\frac{2(1-2\lambda^2+4\lambda^4)}{\lambda(1-2\lambda^2)}. \quad (10)$$

Наконец, при $\lambda_{c1} < \lambda < 1$ все спины ориентированы перпендикулярно лёгкой плоскости ($m_0 = m_1 = 1$), и вихревая структура исчезает. Зависимость энергии системы от параметра λ в этом интервале следующая:

$$\frac{E_*}{JS_0^2} = -12\lambda. \quad (11)$$

Функция $E = E(\lambda)$ – гладкая во всем интервале $0 < \lambda < 1$, однако зависимость полной z-компоненты намагниченности системы $M = 4m_0 + 4m_1$ от λ сложнее (см.рис.4):

$$M = 0 \text{ при } \lambda < \lambda_c,$$

$$M = 4\sqrt{\frac{6\lambda^2 - 1 - 4\lambda^4}{(1-2\lambda^2)^2 2\lambda^2}} \text{ при } \lambda_c < \lambda < \lambda_{c1}, \quad (12)$$

$$M = 8 \text{ при } \lambda_{c1} < \lambda < 1.$$

Функция $M(\lambda)$ имеет корневую особенность при критическом значении $\lambda = \lambda_c$, как и в случае системы с большим числом спинов [3]. Однако максимальное значение M достигается при $\lambda = \lambda_{c1} < 1$. (В бесконечной системе $M \rightarrow \infty$ в пределе $\lambda \rightarrow 1$).

В области $\lambda < \lambda_c$ все спины лежат в лёгкой плоскости и ориентированы следующим образом:

$$\varphi_n^0 = \pi(n-1)/2 \quad \text{для} \quad n = 1 \div 4, \quad \text{и}$$

$$\varphi_n^0 = \frac{\pi}{4} + \pi(n-5)/2 \quad \text{при} \quad n = 5 \div 8. \quad \text{Линеаризуя}$$

динамические уравнения (3), (4) по малым отклонениям m_n и $v_n = \varphi_n - \varphi_n^0$ от состояния равновесия, получаем систему линейных уравнений:

$$\begin{cases} -\frac{dm_n}{dt} = \sum_{\delta} (v_{\delta} - v_n) \cos(\varphi_{\delta}^0 - \varphi_n^0) \\ -\frac{dv_n}{dt} = m_n \sum_{\delta} \cos(\varphi_{\delta}^0 - \varphi_n^0) - \lambda \sum_{\delta} m_{\delta} \end{cases} \quad (13,14)$$

Спектр частот $\omega_k = \omega_k(\lambda)$ динамической системы (13,14) содержит 6 мод (две – двукратно вырождены). Эти моды удобно классифицировать азимутальным (k) и радиальным (r) числами. Азимутальное число k характеризует разность фаз спиновых колебаний в координатной сфере: $m_n \sim \sin(k\chi_n - \omega t)$, $v_n \sim \cos(k\chi_n - \omega t)$, а радиальное число r характери-

зует разность амплитуд этих отклонений в разных координационных сферах.

Самой низлежащей является симметричная "сдвиговая" мода с $k = 0$, для которой $\omega_{01} \equiv 0$. Её возникновение связано с тем, что при свободных граничных условиях возможен одновременный поворот всех спинов в лёгкой плоскости на произвольный угол. Зависимость частоты второй симметричной моды от параметра λ имеет вид

$$\omega_{02} = \sqrt{2\sqrt{2}} \sqrt{\lambda + \sqrt{2}} \quad (15)$$

и эта мода является самой высокочастотной.

Частоты первых азимутальных мод с $k = 1$

$$\begin{aligned} \omega_{11} &= \sqrt{2 - \sqrt{2}} \sqrt{1 - \lambda}, \\ \omega_{12} &= \sqrt{2 + \sqrt{2}} \sqrt{1 + \lambda} \end{aligned} \quad (16)$$

двукратно вырождены, что соответствует возможности вращения спиновой волны в системе по и против часовой стрелки ($\omega < 0$ и $\omega > 0$). Наконец, вторые азимутальные моды с $k = 2$, лежащие в середине спектра, имеют такие частотные зависимости:

$$\omega_{21} = \sqrt{2}, \quad \omega_{22} = \sqrt{2} \sqrt{1 + \lambda\sqrt{2}}. \quad (17)$$

$$-\frac{d\mu_n}{dt} = \sqrt{1 - m_n^2} \left(\sum_{\delta} \sqrt{1 - m_{\delta}^2} \cos(\varphi_{\delta}^0 - \varphi_n^0) [v_{\delta} - v_n] - \sum_{\delta} \frac{m_{\delta}}{\sqrt{1 - m_{\delta}^2}} \mu_{\delta} \sin(\varphi_{\delta}^0 - \varphi_n^0) \right), \quad (18)$$

$$\begin{aligned} -\frac{dv_n}{dt} &= \frac{\mu_n}{(1 - m_n^2)^{\frac{3}{2}}} \sum_{\delta} \sqrt{1 - m_{\delta}^2} \cos(\varphi_{\delta}^0 - \varphi_n^0) - \frac{m_n}{\sqrt{1 - m_n^2}} \left(\sum_{\delta} \frac{m_{\delta}}{\sqrt{1 - m_{\delta}^2}} \mu_{\delta} \cos(\varphi_{\delta}^0 - \varphi_n^0) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\delta} \sqrt{1 - m_{\delta}^2} \sin(\varphi_{\delta}^0 - \varphi_n^0) [v_{\delta} - v_n] \right) - \lambda \sum_{\delta} \mu_{\delta} \end{aligned} \quad (19)$$

Спектр частот системы (18,19) содержит 8 мод, что соответствует числу степеней свободы спиновой системы. Сдвиговая мода с $\omega_{01} \equiv 0$ сохраняется и в этом интервале значений λ . Зависимость $\omega = \omega(\lambda)$ для 2-й симметричной моды отличается от выражения (15):

$$\omega_{02} = \frac{1}{\lambda(1 - 2\lambda^2)} \sqrt{1 - 10\lambda^2 + 44\lambda^4 - 48\lambda^6 + 16\lambda^8}, \quad (20)$$

и частотная зависимость этой симметричной моды в критической точке испытывает излом.

Частоты азимутальных мод данной системы в ОРV-конфигурации определяются корнями полинома 4-й степени со сложной зависимостью коэффициентов от параметра λ , и аналитические выражения для них, ввиду их громоздкости, мы не приводим.

Полный спектр частот системы в ОРV-области $\lambda_c < \lambda < \lambda_{c1}$ приведен на рис. 3б. Он качественно напоминает приведенный на рис. 1а спектр низших спиновых мод системы 180 спинов, полученный численно в [4]: частотные зависимости некоторых мод ($\omega_{02}(\lambda)$, $\omega_{21}(\lambda)$, $\omega_{22}(\lambda)$) имеют излом при $\lambda = \lambda_c$, а зависимости для первых азимутальных мод ($\omega_{11}(\lambda)$ и

Характерными особенностями описанного спектра системы со свободными границами является наличие сдвиговой моды с $\omega \equiv 0$ и ненулевые значения частот всех остальных мод вплоть до критического значения λ_c . При фиксированных границах изменение симметрии магнитного вихря в критической точке сопровождается обращением в ноль частоты нижней симметричной моды как в бесконечной, так и в конечной системе [4,11]. При неймановских граничных условиях частотные зависимости всех мод испытывают в точке $\lambda = \lambda_c$ лишь излом или расщепление, не обращаясь в ноль, на что было обращено внимание в работе [4].

Перейдем к рассмотрению спектра в ОР-конфигурации при $\lambda_c < \lambda < \lambda_{c1}$. В этом интервале параметра λ статические распределения спинов $m_0(\lambda)$ и $m_1(\lambda)$ определяются выражениями (5,6). Для малых отклонений спинов от положения равновесия (m_n^0, φ_n^0) $m_n = m_n - m_n^0$, $v_n = \varphi_n - \varphi_n^0$, линеаризованные по m_n и v_n динамические уравнения (3,4), заменяющие систему (5,6) для IP-вихрей, имеют следующий вид:

$\omega_{12}(\lambda)$) расщепляются в ОРV-области на две. При этом нижняя ветвь соответствует вращению спиновой волны по часовой стрелке, а верхняя – против.

По сравнению со спиновыми системами с фиксированной границей в случае свободной границы динамика системы в ОРV-конфигурации в низкочастотной области спектра более сложна и интересна. Прежде всего, при значении параметра анизотропии $\lambda_0 \approx 0.442 > \lambda_c$ частота нижней ветви дублета, на который расщепляется в критической точке нижняя первая азимутальная мода, обращается в ноль и при $\lambda > \lambda_0$ меняет знак. (В работе [4] указывалось, что частота этой ветви становится аномально малой при некотором значении λ , а затем вновь нарастает.)

Таким образом, при $\lambda > \lambda_0$ низкочастотная спиновая мода меняет направление своего вращения: соответствующая спиновая волна начинает вращаться против часовой стрелки – в том же направлении, что и сам вихрь. Именно такая динамическая картина наблюдалась в последних численных расчетах [13].

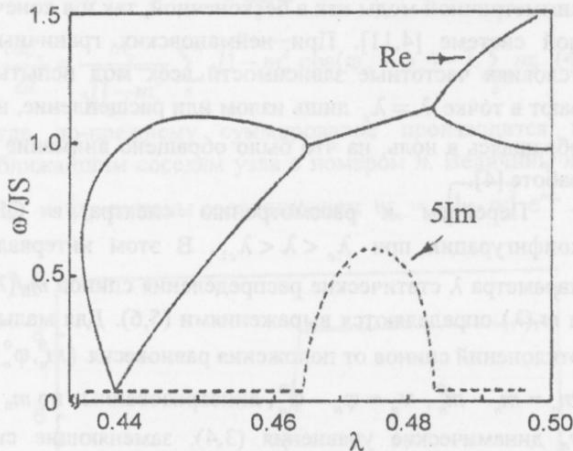


Рис. 5. Зависимость вещественной и мнимой частей частоты нижней первой азимутальной моды от параметра анизотропии λ .

Важным обстоятельством является то, что при $\lambda > \lambda_0$ две ветви спектра с одинаковой радиальной и азимутальной симметрией имеют одинаковый знак частоты и, в принципе, могут войти во внутренний резонанс. Действительно, как видно из рис. 5, при значении $\lambda = \lambda_{r1} \approx 0.468$ частоты двух ветвей дублета нижней азимутальной моды сравниваются, и при больших значениях λ в интервале $\lambda_{r1} < \lambda < \lambda_{r2} \approx 0.487$ эти ветви становятся неустойчивыми (в линейном по μ_n и ν_n приближении). Эта так называемая «осцилляционная неустойчивость» имеет специфический характер: экспоненциальное нарастание малых добавок к решению сопровождается осцилляциями с частотами, близкими к собственным частотам решения вблизи резонанса. Осцилляционная неустойчивость широко обсуждается в последнее время (см. [14,15,16]). В работе [4] указанный резонанс не наблюдался, однако численные расчеты в ней проводились лишь до значений параметра анизотропии $\lambda \approx 0.95$. Поэтому вопрос о существовании внутреннего резонанса в макроскопических системах остается открытым. Зависимости вещественной и мнимой частей частоты первой азимутальной моды от параметра λ приведены на рис. 5. Они имеют стандартный для данных задач вид (см. для сравнения [15, 16]). При следующем критическом значении $\lambda_{r2} \approx 0.487$ система вновь переходит в устойчивую

ОРВ-конфигурацию и частоты двух ветвей нижней азимутальной моды вновь становятся вещественными.

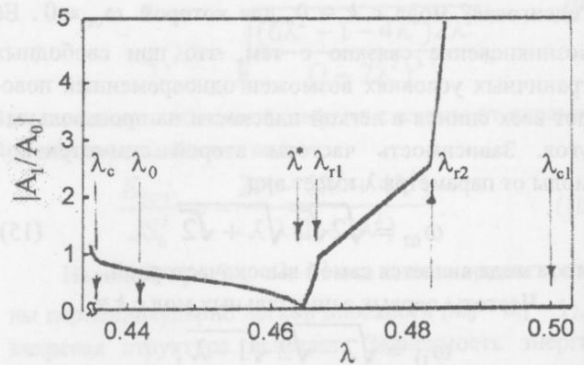


Рис. 6. Соотношение амплитуд колебаний спинов из первой и второй координационных сфер для наиболее низколежащей ветви нижней первой азимутальной моды.

Наиболее ярко характер перестройки динамики системы при переходе через резонансную область проявляется в зависимостях от λ соотношения амплитуд колебания спинов в разных координационных сферах. Если ввести обозначения $A_{0,1}$ ($\mu_n = A_{0,1} \sin(k\chi_n - \omega t)$) для амплитуд z -компоненты осцилляций в первой ($n = 1 \div 4$) и второй ($n = 5 \div 8$) координационных сферах то удобной характеристикой для нижней ветви на рис. 5 является величина $|A_1 / A_0|$ (см. рис. 6). Зависимость $|A_1 / A_0|$ от параметра λ для нижней ветви спектра имеет изломы в точках λ_{r1} и λ_{r2} . Наиболее интересным является то, что в точке $\lambda^* = 0.4657$ величина $|A_1 / A_0|$ обращается в ноль, т.е. происходит полная локализация колебания на центральных спинах ядра вихря. Это явление можно трактовать как связывание спиновой волны с вихрем и трансформацию собственной моды системы во внутреннюю моду ОРВ-вихря. Кроме того, после прохождения резонансной области величина $|A_1 / A_0|$ резко нарастает, стремясь к бесконечности при $\lambda \rightarrow 1/2$. При этом объемная спиновая волна трансформируется в поверхностную волну.

Таким образом, в работе найден аналитически полный спектр спиновых возбуждений в конечномерной модельной системе в «вихревой конфигурации» со свободными спинами на границе. Указано на существенное отличие его от такового для системы с фиксированными граничными спинами. Найденный спектр сопоставлен с низкочастотной частью спектра системы с большим числом спинов. Предсказана возможность существования внутреннего резонанса в системе и возникновения «внутренней вихревой моды» и поверхностной волны.

Авторы благодарны М.М. Богдану за ценные замечания и обсуждение результатов.

1. J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless, *J. Phys.*, C6, 1181 (1973).
2. A.R. Volk, F.G. Mertens, A.R. Bishop, G.M. Wysin, *Phys. Rev.*, B43, 5992 (1991).
3. G.M. Wysin, *Phys. Rev.*, B49, 8780 (1994).
4. G.M. Wysin, A.R. Volk, *Phys. Rev.*, B52, 7412 (1995).
5. A.A. Thiele, *Phys. Rev. Lett.*, 30, 230 (1973).
6. A.R. Volk, G.M. Wysin, F.G. Mertens, A.R. Bishop and H.J. Schnitzer, *Phys. Rev.*, B50, 12711 (1994).
7. F.G. Mertens, H.J. Schnitzer, A.R. Bishop, *Phys. Rev.*, B56, 2510 (1997).
8. B.A. Ivanov, A.K. Kolezhuk, G.M. Wysin, *Phys. Rev. Lett.*, 76, 511 (1996).
9. B.A. Ivanov, A.K. Kolezhuk, G.M. Wysin, F.G. Mertens, *Phys. Rev.*, B58, 8468 (1998).
10. A.S. Kovalev, F.G. Mertens, H.J. Schnitzer, (1999) (в печати).
11. А.С. Ковалев, Я.Е. Прилепский, *Вісник ХДУ, серія "Фізика"*, 417, 32 (1998).
12. G.M. Wysin, (1999) (в печати).

13. F.G. Mertens, H.J. Schnitzer, (частное сообщение).
14. I.V. Barashenkov, M.M. Bogdan, T. Zhanlav, in *Nonlinear world*, ed. by V.G. Baryakhtar et al (World scientific, Singapore, 1990), v.1, p.3.
15. I.V. Barashenkov, M.M. Bogdan, V.I. Korobov, *Europhys. Lett.*, 15, 113 (1991).
16. H.T. Tran, J.D. Mitchell, N.N. Akhmediev, A. Ankiewicz, *Opt. Comm.*, 93, 227 (1992).

Normal modes of the finite spin system with a free boundary in vortex configuration

A.S. Kovalev and J.E. Prilepsky

Eigenvalue spectrum of 8-spin plaquette with a magnetic vortex in the two-dimensional classical Heisenberg ferromagnet with easy-plane exchange anisotropy is investigated and spectrum dependence on the value of anisotropy is studied.

Локализация оптических пучков в системе нелинейных волноводов

И.В. Герасимчук¹, А.С. Ковалёв²

¹Харьковский государственный университет,

Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы, 4

²Физико-технический институт низких температур им. Б.И.Веркина НАН Украины,

Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47

E-mail: kovalev@ilt.kharkov.ua

Проведено исследование стационарных локализованных состояний световых пучков в системе идентичных плоскопараллельных нелинейных волноводов в оптически линейной среде.

Проведено дослідження стаціонарних локалізованих станів світлових пучків в системі ідентичних площинно-паралельних нелінійних хвильоводів в оптично лінійному середовищі.

PACS: 42.65.Tg, 42.65.Wi, 42.82.Et

В последнее время появилось значительное число работ (как теоретических, так и экспериментальных), посвященных изучению локализации световых пучков большой мощности. В работе [1] впервые было указано на возможность локализации пучка в нелинейной однородной оптической среде в направлении, перпендикулярном направлению его распространения, вследствие нелинейного эффекта Керра. Теория этого явления описана в работе [2]. С другой стороны, такая поперечная локализация светового потока возможна в линейной оптической среде при наличии плоского волновода [3]. В 1996 году в работе [4] теоретически было показано, что в системе плоскопараллельных волноводов при учете керровской нелинейности возможна локализация пучка на нескольких соседних волноводах (образование пространственного «суперсолитона»). Этот вывод был проиллюстрирован численно на простой модели, описываемой дискретным нелинейным уравнением Шредингера (ДНУШ) для амплитуд поля в волноводах. При этом взаимодействие волноводов описывалось феноменологическим параметром, а происхождение нелинейности в уравнении не обсуждалось. Позже в [5] такая «суперлокализация» светового потока наблюдалась экспериментально, и результаты сравнивались с феноменологической дискретной

моделью из [4]. В нашей предыдущей работе [6] было рассмотрено распространение потока в системе двух связанных плоскопараллельных волноводов в нелинейной оптической среде. В предположении, что волноводы и окружающая среда являются нелинейными и отличаются лишь величиной линейного показателя преломления, была вычислена величина взаимодействия световых пучков в волноводах, и получена система дискретных нелинейных уравнений. На примере двух связанных волноводов была продемонстрирована возможность локализации света на одном из волноводов. Поскольку при слабой связи волноводов амплитуда поля в них существенно превосходит среднюю амплитуду в окружающей среде, можно оставить нелинейные керровские слагаемые лишь в областях пространства внутри самих волноводов. (В системах с квадратичной нелинейностью нелинейные слагаемые должны учитываться лишь в области интерфейсов, исходя из симметричных соотношений [7].)

В данной работе мы ограничимся простой моделью, в которой керровская нелинейность учитывается лишь в области волноводов (которые предполагаются много уже расстояния между ними), а среда между волноводами считается оптически линейной.

Уравнение для комплексной функции медленной огибающей поля $E(x, z)$ (где x – координата вдоль направления распространения волны, а z – направление, перпендикулярное плоскостям параллельных волноводов) имеет для нашей модели следующий вид:

$$i \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - nE = -\lambda \cdot \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \delta(z - 2aj) \cdot |E|^2 E, \quad (1)$$

где параметр n связан с линейным показателем преломления, а величина λ описывает нелинейную добавку к показателю преломления в области внутри волновода: $\lambda = \delta n / d$, где d – его толщина ($d \ll 2a$).

Прежде всего рассмотрим, как трансформируются для предложенной модели результаты, полученные ранее в работе [6].

В случае одного волновода уравнение

$$i \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - nE = -\lambda \cdot \delta(z) \cdot |E|^2 E \quad (2)$$

имеет следующее решение для стационарного распространяющегося локализованного пучка:

$$E = E_0 \cdot e^{-\varepsilon|z| - ikx}, \quad (3)$$

где $\varepsilon = \sqrt{n - k}$ и $E_0 = \sqrt{\frac{2}{\lambda}} \sqrt{\varepsilon}$. Проинтегрировав

уравнение (2) по z , получаем эффективное уравнение для ангармонического ротатора (считая координату x эффективным «временем»):

$$i \frac{\partial}{\partial x} E_0 = nE_0 - \frac{\lambda \varepsilon}{2} E_0^3. \quad (4)$$

Зависимость параметра k от амплитуды поля

$$k = n - \frac{\lambda}{2} E_0^2 \quad (5)$$

такая же, как для сдвига частоты ангармонического ротатора от амплитуды его колебания. Заметим, что если ввести полную «мощность» оптического потока

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} |E|^2 dz \quad (6)$$

и полную его энергию

$$W = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \cdot \left\{ \left| \frac{\partial E}{\partial z} \right|^2 + n|E|^2 - \frac{\lambda}{2} \delta(z) |E|^4 \right\}, \quad (7)$$

то эти величины в данной модели не зависят от параметра k : $P = \frac{2}{\lambda}$, $W = \frac{2n}{\lambda}$. Но это свойство не является универсальным. При учёте нелинейности среды вокруг волновода, когда в левой части (2) добавляется

слагаемое $2|E|^2 E$, имеем

$P = \frac{2}{\lambda} \cdot \left[1 + \varepsilon \lambda - \sqrt{1 + \varepsilon^2 \lambda^2} \right]$, а при учёте в волноводе лишь линейного показателя преломления, когда пра-

вая часть (2) равна $-\lambda \cdot \delta(z) E$, получаем зависимость $P = 2 \cdot \left(\varepsilon - \frac{\lambda}{2} \right)$ [7].

В случае двух плоскопараллельных волноводов с координатами $z = \mp a$ линейное волновое уравнение

$$i \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - nE = 0 \quad (8)$$

должно быть дополнено граничными условиями

$$E|_{z=a-0} = E|_{z=a+0}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial E}{\partial z} \Big|_{z=a+0} - \frac{\partial E}{\partial z} \Big|_{z=a-0} = -\lambda \cdot (|E|^2 E) \Big|_{z=a}, \quad (10)$$

и локализованный в системе волноводов световой поток описывается решением вида

$$E_{\alpha\beta} = A_{\alpha\beta} \cdot e^{\pm \varepsilon z - ikx}, \quad (11)$$

$$E_\gamma = (B \cdot e^{-\varepsilon z} + C \cdot e^{\varepsilon z}) \cdot e^{-ikx} \quad (12)$$

в областях α ($z < -a$), β ($z > a$) и γ ($-a < z < a$). Воспользовавшись видом этого решения, граничные условия (9,10) легко переписать следующим образом:

$$\varepsilon^2 E_i - \frac{\lambda \varepsilon}{2} (1 + e^{-2\varepsilon a}) E_i^3 + \frac{\varepsilon^2}{e^{2\varepsilon a} - 1} (E_i - E_j) = 0, \quad (13)$$

где $i, j = 1, 2$, $i \neq j$ и $E_{i,2} = E(z = \mp a)$ – амплитуды поля в волноводах. При увеличении расстояния между волноводами ($2a \gg 1/\varepsilon$) уравнения (13) переходят в стационарные уравнения (4) для отдельных эффективных ротаторов. При слабой связи волноводов система уравнений (13) описывает стационарные колебания двух слабосвязанных ангармонических ротаторов

$$\varepsilon^2 E_i - \frac{\lambda \varepsilon}{2} E_i^3 + \varepsilon^2 e^{-2\varepsilon a} (E_i - E_j) = 0 \quad (14)$$

с энергией связи между ними

$$W_{\text{int}} = \frac{1}{2} \varepsilon^2 e^{-2\varepsilon a} |E_i - E_j|^2. \quad (15)$$

Необычность ситуации заключается в том, что энергия связи ротаторов зависит не только от параметров системы (показателя n для среды между волноводами и расстояния между ними $2a$), но и от параметра решения k . Поэтому при моделировании системы плоскопараллельных волноводов последовательностью осцилляторов введение эффективной константы взаимодействия, как это было сделано в работах [4,5], является непоследовательным – это взаимодействие является функцией волнового числа распространяющегося потока.

Система уравнений (13) допускает 3 типа возможных стационарных состояний: симметричное состояние (S) с одинаковой мощностью световых потоков в двух волноводах:

$$E_1 = E_2 = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{\lambda}} \cdot (1 + e^{-2\varepsilon a})^{-1/2}, \quad \text{антисимметричное}$$

состояние (A) с одинаковой плотностью потока в волноводах, но с противоположной фазой поля в них:

$$E_1 = -E_2 = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{\lambda}} \cdot (1 - e^{-2\varepsilon a})^{-1/2} \quad \text{и неоднородное}$$

состояние (N) с одинаковой фазой, но разными плотностями светового потока в волноводах:

$$E_{1,2} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\lambda}} \cdot \left(\frac{1 \pm \sqrt{1 - 4e^{-4\varepsilon a}}}{1 - e^{-4\varepsilon a}} \right)^{1/2}$$

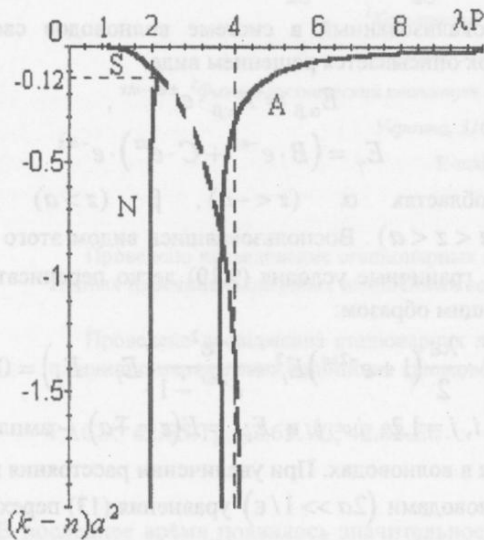


Рис.1. Зависимость $(k-n)a^2 = f(\lambda P)$ для синфазного симметричного (S), неоднородного (N) и антисимметричного (A) состояний. Сплошными линиями отмечены устойчивые ветви; штриховая линия соответствует области неустойчивости для симметричного состояния.

Величина полной мощности оптического потока P для этих трёх решений имеет следующий вид:

$$P_S = \frac{4}{\lambda} \cdot \frac{1 + (2\varepsilon a + 1)e^{-2\varepsilon a}}{(1 + e^{-2\varepsilon a})^3},$$

$$P_A = \frac{4}{\lambda} \cdot \frac{1 - (2\varepsilon a + 1)e^{-2\varepsilon a}}{(1 - e^{-2\varepsilon a})^3}, \quad (16)$$

$$P_N = \frac{2}{\lambda} \cdot \frac{1 - 3e^{-4\varepsilon a} + 2(2\varepsilon a + 1)e^{-8\varepsilon a}}{(1 - e^{-4\varepsilon a})^3}$$

Появление состояния (N) с разной амплитудой поля в волноводах происходит бифуркационным образом при значениях параметров $\varepsilon_b = \ln \sqrt{2} \cdot \frac{1}{a}$ и

$$P_b = \frac{16}{27} \cdot (3 + \ln 2) \cdot \frac{1}{\lambda}.$$

Зависимости (16-18) волнового числа от мощности потока $k = k(P)$ приведены на рис.1 в виде графиков $(k-n)a^2 = f(\lambda P)$.

Как следует из теории связанных ангармонических осцилляторов (см., например, [8]), с ростом их числа растёт количество стационарных мод в системе, и при заданной частоте наименьшей энергией обладает пространственно локализованное состояние синфазно колеблющихся частиц («дискретный бризер»). При этом точка бифуркации (пороговое значение полной энергии, при которой это локализованное возбуждение отщепляется от однородного синфазного состояния) смещается в область малых энергий с ростом числа связанных осцилляторов. В бесконечной цепочке бризерное состояние существует при сколь угодно малых энергиях.

В нашем случае бесконечная последовательность плоскопараллельных волноводов легко может быть сведена к цепочке связанных ангармонических осцилляторов аналогично тому, как выше пара волноводов описывалась моделью двух связанных осцилляторов. Возвращаясь к исходному уравнению (1) и граничным условиям (9,10) для всех волноводов, представляем решение для стационарного потока в области между волноводами с номерами j и $j+1$ в виде

$$E_{j,j+1} = A_j^+ \cdot e^{-\varepsilon(z-2ja) - ikx} + A_{j+1}^- \cdot e^{\varepsilon(z-2ja-2a) - ikx}. \quad (17)$$

При этом для амплитуд поля в волноводах $E_j = A_j^+ + A_{j+1}^- \cdot e^{-2\varepsilon a}$ легко получить бесконечную систему связанных нелинейных алгебраических уравнений:

$$\varepsilon^2 E_j - \frac{\lambda \varepsilon}{2} \text{cth}(\varepsilon a) E_j^3 + \left(\frac{\varepsilon}{2 \text{sh}(\varepsilon a)} \right)^2 (2E_j - E_{j+1} - E_{j-1}) = 0. \quad (18)$$

Эти уравнения формально совпадают с таковыми для стационарных колебаний цепочки связанных осцилляторов Дюффинга и с уравнениями, используемыми в [4,5]. Однако в уравнениях (18) коэффициент

при ангармонических слагаемых $\frac{\lambda \varepsilon}{2} \text{cth}(\varepsilon a)$ и коэффициент, определяющий связь волноводов $\left(\frac{\varepsilon}{2 \text{sh}(\varepsilon a)} \right)^2$, не являются только характеристиками

оптической среды, а существенным образом зависят от параметра светового потока k (через параметр ϵ).

Пространственно локализованные решения системы типа (18) многократно исследовались численно и аналитически [9]. При слабой эффективной связи волноводов, когда $\epsilon a \gg 1$, весь световой поток локализуется практически в одном из них. Такие решения исследовались нами в работе [7]. В противоположном пределе, когда отщепление параметра k от величины n становится аномально слабым и выполняется неравенство $\epsilon a \ll 1$, амплитуды поля в соседних волноводах отличаются слабо, и световой поток локализуется на большом числе волноводов, образуя «суперсолитон». В этом случае разностные уравнения (18) заменяются дифференциальными уравнениями, имеющими очевидные солитонные решения:

$$E_j = \sqrt{\frac{4a}{\lambda}} \cdot \frac{\epsilon}{\text{ch}(2\epsilon j a)}. \text{ Из них видно, что световой}$$

поток локализуется на N волноводах, где $N \propto 1/(\epsilon a) \gg 1$. Заметим, что в пределе $\epsilon \rightarrow 0$ мощность светового потока в системе с одним волноводом стремится к конечной величине $P_1(\epsilon \rightarrow 0) = 2/\lambda$, а в системе двух волноводов это предельное значение уменьшается и равно $P_2(\epsilon \rightarrow 0) = 1/\lambda$. В бесконечной системе плоскопараллельных волноводов полная мощность потока, как это следует из вида решений, полученных из системы

(18), равна $P = 8\epsilon a / \lambda$ и стремится к нулю в пределе $\epsilon \rightarrow 0$.

1. R.Y. Chiao, E. Garmire, and C.H. Townes, *Phys. Rev. Lett.*, **13**, 479 (1964).
2. В.Е. Захаров, А.Б. Шабат, *ЖЭТФ*, **61**, 118 (1971).
3. A. Barthelemy, S. Maneuf, and C. Froehly, *Opt. Commun.*, **55**, 201 (1985).
4. A.B. Aceves, C. De Angelis, T. Peschel, R. Muschall, F. Lederer, S. Trillo, and S. Wabnitz, *Phys. Rev.*, **E 53**, 1172 (1996).
5. H.S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, A.R. Boyd, and J.S. Aitchison, *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 3383 (1998).
6. И.В. Герасимчук, А.С. Ковалев, *Вестник ХГУ*, **418**, сер. «Физика», вып. 2, 8 (1998).
7. М.М. Богдан, И.В. Герасимчук, А.С. Ковалев, *ФНТ*, **23**, 197 (1997).
8. А.М. Косевич, А.С. Ковалев, *Введение в нелинейную физическую механику*, Наукова думка, Киев (1989).
9. S. Flach and C.R. Willis, *Phys. Rep.*, **295**, 181 (1998).

Localization of optical beams in the array of nonlinear waveguides

I.V. Gerasimchuk, A.S. Kovalev

The stationary localized states of light beams in the array of identical parallel plane nonlinear waveguides in optical linear medium are investigated.

К вопросу о реализации четырёхмерного псевдоевклидова пространства $E_{(1,3)}^4$

А.П. Волченко

Харьковский государственный университет,
Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы 4

Вводится в рассмотрение теория, альтернативная специальной теории относительности (СТО). В альтернативной теории постулат СТО о постоянстве скорости света в вакууме истолковывается как условие, посредством которого определяется единица времени. А именно: секунда равна промежутку времени, за который вершина светового луча проходит в вакууме в каждой инерциальной системе путь одной и той же длины, равной 299 792 458 м. Исследуется гипотеза, состоящая в том, что приведенным определением единицы времени определяется различно в различных инерциальных системах.

Уводиться до розгляду теорія, альтернативна спеціальній теорії відносності (СТВ). В альтернативній теорії постулат СТВ про постійність швидкості світла у вакуумі тлумачиться як умова, через яку визначається одиниця часу. А саме: секунда дорівнює проміжку часу, за який вершина світлового променя проходить у вакуумі у кожній інерціальній системі шлях однієї і тієї ж довжини, яка дорівнює 299 792 458 м. Досліджується гіпотеза, яка полягає у тому, що наведеним визначенням одиниця часу визначається по-різному у різних інерціальних системах.

PACS: 03.30

Введение

В современной практике измерений используют два определения единицы времени. Во-первых, это эталон секунды: «Секунда равна 9 192 631 770 периодам излучения, соответствующего переходу между двумя сверхтонкими уровнями основного состояния атома цезия-133» (XIII ГКМВ, 1967г. Резолюция 1). Во-вторых, скорость света в вакууме определяется одной и той же в различных инерциальных системах величиной $c = 299\,792\,458$ м/сек. Это условие допускает следующее прочтение: секунда равна промежутку времени, за который вершина светового луча (фотон) проходит в вакууме в каждой инерциальной системе путь одной и той же длины c . В этой связи обусловленными оказываются вопросы относительно постоянства и тождественности единиц времени, представленных приведенными определениями. Обретает при этом значимость задача исследования гипотезы, состоящей в том, что вторым из этих определений единица времени не определяется однозначно. А именно, одна и та же точка фронта световой волны (фотон)

проходит в вакууме, перемещаясь по различным в различных инерциальных системах лучам, пути одной и той же длины, в частности, равной c за различные, вообще говоря, промежутки времени.

Ниже излагается математическое исследование этой гипотезы. Существенным при этом является введение в рассмотрение геометрической реализации пространства $E_{(1,3)}^4$, определённого, в частности, в [1].

Такая реализация отличается от реализации этого пространства, указанной Минковским [2] и принятой в специальной теории относительности (СТО) в качестве пространства событий. Эта иная реализация пространства $E_{(1,3)}^4$, фрагментарно использованная в [3,4,5], позволила выявить геометрические свойства преобразований Лоренца (ПЛ), остававшиеся вне поля зрения при использовании схемы Минковского. В свою очередь, выявленные геометрические свойства ПЛ обуславливают коррекцию их кинематического истолкования, принятого в СТО, что и означает принятие указанной выше гипотезы.

По существу, излагаемая ниже реализация пространства $E_{(1,3)}^4$ составляет математическую основу теории, альтернативной СТО как в том, что касается интерпретации пространственно-временных отношений, соответствующих уравнениям электродинамики и релятивистской механики, так и в том, что касается используемого математического аппарата.

§1. Геометрическая реализация пространства

$E_{(1,3)}^4$

Пусть U – множество, произвольным элементом которого является пара $(x_0, \vec{X}) = s$, где $x_0 \in R$ – вещественное число, а $\vec{X} \in E^3$ – вектор в трёхмерном евклидовом пространстве. Будем полагать, что в U определены линейные операции:

$$\forall (x_0, \vec{X}), (y_0, \vec{Y}) \in U;$$

$$\forall a, b \in R : a(x_0, \vec{X}) + b(y_0, \vec{Y}) = (z_0, \vec{Z}), \quad (1)$$

где $ax_0 + by_0 = z_0$ – вещественное число, представленное суммой произведений вещественных чисел, $a\vec{X} + b\vec{Y} = \vec{Z}$ – вектор, определенный в E^3 путём принятого в E^3 умножения векторов на вещественные числа и затем суммирования таких произведений по правилу параллелограмма. Будем, кроме того, полагать, что вместе с (1) в U определено скалярное произведение, причём согласно правилу

$$(x_0, \vec{X}) \cdot (y_0, \vec{Y}) = x_0 \cdot y_0 - (\vec{X}, \vec{Y}), \quad (2)$$

где $x_0 \cdot y_0$ – обычное арифметическое произведение вещественных чисел, а $(\vec{X}, \vec{Y})$ – обычное скалярное произведение векторов в E^3 . Тогда вместе с (1), (2) множество U – псевдоевклидово четырёхмерное пространство $E_{(1,3)}^4$. Причём, если $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ – ортонормированный базис в E^3 , то четыре пары

$$(1, 0) = e_0, (0, \vec{i}) = e_1, (0, \vec{j}) = e_2, (0, \vec{k}) = e_3 \quad (3)$$

составляют базис в $E_{(1,3)}^4$, ортонормированный в том смысле, что $e_0^2 = 1, e_1^2 = e_2^2 = e_3^2 = -1$ и потому

$$\forall s = (x_0, \vec{X}) = x_0 e_0 + x e_1 + y e_2 + z e_3, \quad (4)$$

$$s^2 = x_0^2 - x^2 - y^2 - z^2.$$

А. Элемент $s = (x_0, \vec{X})$ допускает следующую геометрическую интерпретацию. Вектор $\vec{X} = \vec{OM} \in E^3$ определяется вместе с отрезком прямой, один конец которого совмещен с началом O вектора $\vec{X}$, а другой может быть любой точкой A сферы Φ радиуса $|x_0|$ с центром в точке O . Причём, если этот отрезок измеряется в направлении, исходящем из O , то он определяется значением $x_0 > 0$. Если

же это измерение осуществляется в направлении к центру O сферы Φ , то $x_0 < 0$.

При такой интерпретации элемента s указанием скалярного произведения (2) определяется правило (4), посредством которого устанавливается соответствие между концом M вектора $\vec{X}$ и точками сферы Φ . А именно, если точка M находится внутри сферы Φ , то $s^2 > 0$ и этим условием определяется конус с вершиной в точке O , основанием которого является окружность, полученная в пересечении сферы Φ плоскостью, проходящей через точку M перпендикулярно отрезку OM . Если A – какая-либо точка этой окружности, то MA – её радиус и s^2 – квадрат длины этого радиуса или квадрат длины катета прямоугольного треугольника OMA . Этот конус вырождается в отрезок OM , если точка M оказывается на сфере Φ и тогда $s^2 = 0$. Наконец, если точка M находится вне сферы Φ , то $s^2 < 0$ и этим условием определяется конус с вершиной в точке M , образующие которого касаются сферы Φ , а окружность образованная точками касания, – его основание. Если A – какая-либо точка этой окружности, то в прямоугольном треугольнике OMA отрезок OM – гипотенуза, а MA – катет. Поэтому $s^2 = -MA^2$ – взятый со знаком минус квадрат длины катета MA . Этот конус вырождается в отрезок OM , если сфера Φ вырождается в точку O и тогда $s^2 = -OM^2 = -MA^2$.

В $E_{(1,3)}^4$ могут быть определены линейные преобразования, посредством которых любому элементу $s' = (x'_0, \vec{X}')$ ставится в соответствие элемент $s = (x_0, \vec{X})$ такой, что $s'^2 = s^2$. В частности, имеют место преобразования

$$x = (x' + \beta x'_0)(1 - \beta^2)^{-\frac{1}{2}}, y = y', z = z',$$

$$x_0 = (x'_0 + \beta x') (1 - \beta^2)^{-\frac{1}{2}}; \quad (5)$$

$$\beta = \text{const} \in (-1, 1),$$

посредством которых элементу $s' = (x'_0, \vec{X}') = (x', y', z')$, определённому в базисе (3), ставится в соответствие элемент $s = (x_0, \vec{X}) = (x, y, z)$, определённый в том же базисе. Эти преобразования допускают следующие два прочтения: у составляющих $\vec{X}', \vec{X}$ элементов $s' = (x'_0, \vec{X}')$, $s = (x_0, \vec{X})$ в одном случае совмещены их начала, в другом – их концы. Второй случай приводит к следующему заключению. Пусть парами $(r'_1, \vec{r}'_1 = (x'_1, y'_1, z'_1))$, $(r'_2, \vec{r}'_2 = (x'_2, y'_2, z'_2))$, где r'_1, r'_2 – модули радиусов-векторов $\vec{r}'_1, \vec{r}'_2$, представлены две точки в системе K' , а парами $(r_1, \vec{r}_1)$, $(r_2, \vec{r}_2)$, где $r_1,$

r_2 – модули радиусов-векторов $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$, $\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$, определены их отображения посредством (5) в системе K . Тогда при любых вещественных постоянных a, b величинам $\vec{r}' = a\vec{r}_1' + b\vec{r}_2'$, $h' = ar_1' + br_2'$, определённым в системе K' , будут соответствовать согласно (5) величины $\vec{r} = a\vec{r}_1 + b\vec{r}_2$, $h = ar_1 + br_2$, определённые в системе K , в которой смещение d начала системы K' определяется значением $d = ad_1 + bd_2$, $d_1 = x_1 - x_1'$, $d_2 = x_2 - x_2'$. И при этом $h^2 - \vec{r}^2 = h'^2 - \vec{r}'^2$.

Следствие. Пусть в системе K' определена исходящая из начала O' непрерывная спрямляемая линия L' . На её участке $O'M$ определим непрерывную ломаную, составленную векторами-хордами так, что начало следующего совпадает с концом предыдущего. Сумме этих векторов-хорд, равной радиусу-вектору $\vec{r}'$ точки M , поставим в соответствие сумму h' их модулей. Преобразуем пару, составленную этими суммами, по формулам (5), считая $\beta \in (-1, 1)$ заданной постоянной, и, рассматривая эти суммы как интегральные, совершим предельный переход, в котором h' переходит в длину l' участка $O'M$ линии L' . В результате формулы (5) примут вид

$$x = (x' + \beta l')(1 - \beta^2)^{\frac{1}{2}}, y = y', z = z', \quad (6)$$

$$l = (l' + \beta x')(1 - \beta^2)^{\frac{1}{2}},$$

где x', y', z' – координаты точки M в системе K' , и будут определять отображение линии L' на линию L в системе K , исходящую из её начала, так, что x, y, z, l – координаты точки M и длина участка OM линии L в системе K , в которой смещение d начала O' системы K' определяется формулой

$$d = x - x' = (x'(1 - (1 - \beta^2)^{\frac{1}{2}}) + \beta l')(1 - \beta^2)^{\frac{1}{2}}.$$

Причём для радиусов-векторов $\vec{r}', \vec{r}$ и значений l', l , определяющих точку M в системах K' и K , выполняется соотношение $l^2 - \vec{r}^2 = l'^2 - \vec{r}'^2 \geq 0$.

Таким образом, геометрическое существо преобразований (6) состоит в том, что перемещение точки M из начала системы K' по какой-либо непрерывной спрямляемой линии L' «вынуждает» систему K' перемещаться из начала системы K вдоль оси X -ов. При этом результатом сложения этих двух перемещений оказывается перемещение точки M из начала системы K , определяющее исходящую из её начала непрерывную спрямляемую линию L .

В. Можно, очевидно, указать множество линий, исходящих из начала системы K' , например, объединённых каким-либо признаком, затем найти, исполь-

зуя (6), их отображения в системе K и ввести в рассмотрение множество точек пересечения этих линий с их отображениями. Множеством таких точек может быть представлена поверхность F , перемещающаяся в системах K' и K при перемещении системы K' в системе K , инвариантная относительно преобразований (6) в том смысле, что любая её точка, определяемая в системах K' и K парами $(l', \vec{r}')$, $(l, \vec{r})$, преобразующимися по формулам (6) при одном и том же значении $d = \text{const}$ смещения системы K' в системе K .

Проиллюстрируем это замечание и, вместе с тем, свойства преобразований (6) в случае, когда множество линий, исходящих из начала системы K' – прямолинейные лучи.

1. Если L' – прямой луч, то и его отображение L – прямой луч. Точка M пересечения лучей L', L и начала O', O систем K', K определяют эллипсоид F , фокусы которого находятся в началах систем K', K , а эксцентриситет e определяется значением

$$e = |\beta| (1 + (1 - \beta^2)^{\frac{1}{2}})^{-1}. \quad (7)$$

Все точки поверхности F являются, как и точка M , точками пересечения лучей, исходящих из начал систем K', K , и при этом, если d – смещение начала системы K' в системе K , а $(\rho', \vec{r}'), (\rho, \vec{r})$ – пары, в которых ρ', ρ – модули радиусов-векторов $\vec{r}', \vec{r}$ какой-либо точки поверхности F , определённые в системах K' и K , то $\rho' + \rho = \frac{d}{e} = \text{const}$.

2. Пусть Π – плоскость, перпендикулярная прямой, проходящей через начала систем K', K , пересекающая эллипсоид F или касающаяся его. И пусть $\vec{r}' = (x', y', z')$, $\vec{r} = (x, y, z)$ – радиусы-векторы любой точки P плоскости Π , определённые в системах K' и K . Тогда пары $(\rho', \vec{r}'), (\rho, \vec{r})$, в которых ρ', ρ – модули радиусов-векторов $\vec{r}', \vec{r}$ точек поверхности F , принадлежащих также и плоскости Π , преобразовываются по формулам

$$x = (x' + \beta \rho')(1 - \beta^2)^{\frac{1}{2}}, y = y', z = z', \quad (8)$$

$$\rho = (\rho' + \beta x')(1 - \beta^2)^{\frac{1}{2}}.$$

И при этом $\rho^2 - \vec{r}^2 = \rho'^2 - \vec{r}'^2 = s^2$, где $s^2 > 0$, если точка P находится внутри эллипсоида F ; $s^2 = 0$, если эта точка лежит на поверхности F и $s^2 < 0$, если она находится вне эллипсоида F .

3. Уравнения эллипса, полученного в сечении эллипсоида F какой-либо плоскостью, проходящей через его фокусы, в полярных системах координат с полюсами в началах систем K', K могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} \rho' &= p - ex', \rho = p + ex, \\ \rho' + \rho &= \frac{d}{e}, d = p\beta(1 - \beta^2)^{-\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (9)$$

где p – параметр эллипсоида F , определённый значением ρ' в плоскости $x' = 0$ в системе K' или значением ρ в плоскости $x = 0$ системы K и для определённости принято $\beta = \text{const} \in (0,1)$. Если теперь, используя (9), исключить ρ', ρ из (8), то с учётом (7) получим

$$x = d + x', y = y', z = z', d = p\beta(1 - \beta^2)^{-\frac{1}{2}}.$$

4. При использовании преобразований (8), в которых значение $\beta = \text{const} \in (-1,1)$ считается известным, точка P указывается в системе K' парой $(\rho', \vec{r}')$, где $\vec{r}' = (x', y', z')$ – радиус-вектор точки P , а значение $\rho' \geq |x'|$, которое можно истолковать как радиус сферы Φ' с центром в начале системы K' , определяется по одному из следующих двух вариантов.

В одном варианте считаются известными величины p, e , определяющие эллипсоид F , и значение ρ' вычисляется по первой из формул (9), в которую подставляется координата x' точки P . В этом случае точки с различными значениями координаты x' определяются в системе K' при различных значениях ρ' и при одном и том же значении d смещения системы K' в системе K .

Согласно другому варианту значение ρ' не вычисляется, а указывается вместе с радиусом-вектором $\vec{r}'$ точки P так, что по первой из формул (9) может быть вычислено значение параметра p . В этом случае точкам с различными значениями координаты x' и одним и тем же значением ρ' будут соответствовать различные значения параметра p и, следовательно, они будут определены в системе K при различных значениях смещения d в ней системы K' .

5. Укажем значение β_1 , например, $\beta_1 \in (0,1)$, отличающееся от значения β , которым определён указанный выше эллипсоид F , и применим преобразования (8), определённые вместе со значением β_1 , к паре $(\rho', \vec{r}')$, определяющей указанную выше точку P в системе K' . Тогда получим пару $(\rho_1, \vec{r}_1 = (x_1, y_1 = y', z_1 = z'))$,

$$x_1 = (x' + \beta_1 \rho')(1 - \beta_1^2)^{-\frac{1}{2}}, y_1 = y', z_1 = z', \quad (10)$$

$$\rho_1 = (\rho' + \beta_1 x')(1 - \beta_1^2)^{-\frac{1}{2}},$$

определяющую точку P в системе K_1 . При этом начала систем K', K_1 и значение β_1 определяют эллипсоид F_1 .

Исключим теперь из (8), (10) величины ρ', x' . Тогда подучим преобразования

$$x_1 = (x + \beta_2 \rho)(1 - \beta_2^2)^{-\frac{1}{2}}, y_1 = y, z_1 = z,$$

$$\rho_1 = (\rho + \beta_2 x)(1 - \beta_2^2)^{-\frac{1}{2}};$$

$$\beta_2 = (\beta_1 - \beta)(1 - \beta\beta_1)^{-1},$$

посредством которых точка P определяется в системе K_1 по её определению парой $(\rho, \vec{r})$ в системе K . При этом начала систем K, K_1 и значение β_2 определяют эллипсоид F_2 .

6. Станем перемещать систему K' в системе K в положительном направлении оси X -ов из положения, в котором они были совмещены, и будем полагать, что при этом происходит перемещение поверхности эллипсоида F в этих системах такое, что его фокусы остаются совмещёнными с началами систем K', K , а эксцентриситет не меняется. Положим, кроме того, что плоскость Π , определённая так, как это указано в пункте 2, остается неподвижной в системе K' . Тогда окружность, полученная в пересечении плоскости Π с поверхностью F , будет расширяться вместе с увеличением модулей ρ' и ρ радиусов-векторов точек этой окружности, определенных в системах K' и K . При этом, если система K' сместится в системе K на расстояние Δd , то значения ρ' и ρ изменятся на $\Delta \rho'$ и $\Delta \rho$ и при этом будут выполняться условия

$$\frac{\Delta d}{\Delta \rho'} = \beta(1 - \beta^2)^{-\frac{1}{2}}, \quad \frac{\Delta d}{\Delta \rho} = \beta. \quad (11)$$

Эти отношения не зависят от выбора координаты $x' = \text{const}$, определяющей плоскость Π в системе K' . Можно поэтому полагать, что плоскость Π определена уравнением $x' = 0$ и что перемещение системы K' в системе K измеряется от положения, в котором эти системы были совмещены. Тогда соотношения (11) принимают вид

$$\frac{d}{p} = \beta(1 - \beta^2)^{-\frac{1}{2}}, \quad d(p^2 + d^2)^{-\frac{1}{2}} = \beta. \quad (12)$$

§2. Кинематическая интерпретация преобразований в $E_{(1,3)}^4$

Введём в рассмотрение следующий процесс. Происходит монотонное расширение сферы Φ' , при котором её точки перемещаются по лучам, исходящим из начала системы K' , а её радиус p неограниченно

увеличивается, начиная со значения $p = 0$. Назовем скоростью этого процесса изменение радиуса p сферы Φ' на величину $c = \text{const} > 0$. При этом промежуток времени, за который этот радиус увеличивается на величину c , обретает смысл единицы времени, а моменты времени и его промежутки определяются значениями $t' = \frac{p}{c}$, $\Delta t' = \frac{\Delta p}{c}$. Будем полагать, что таким образом определены часы T' в системе K' .

Положим далее, что система K' движется в системе K в положительном направлении оси X -ов и что в качестве начального выбран момент совмещения этих систем. Относительное движение систем K' , K таково, что его можно определить как равномерное в следующем смысле. В системе K определяется сфера Φ с центром в начале системы K , пересекающая сферу Φ' . Пересечение этих сфер является общим основанием конусов с вершинами в началах систем K' и K , а углы при их вершинах остаются постоянными в процессе относительного движения систем K' и K и расширения сфер Φ' и Φ .

Скорость движения системы K' в системе K может быть определена с помощью соотношений (11), (12). Отметим в этой связи, что плоскость, в которой пересекаются сферы Φ' и Φ , определена указанными условиями так, что она перемещается в системах K' и K . Такое определение отличает эту плоскость от плоскости Π , указанной в пункте 6 §1, с использованием которой введены в рассмотрение отношения (11). Можно, однако, ввести в рассмотрение, наряду с системами K' и K , систему K_0 и сферу Φ_0 с центром в начале K_0 такие, что пересечение сфер Φ' и Φ будет совмещено с пересечением сферы Φ_0 плоскостью, проходящей через начало K_0 и покоящейся в K_0 . Система K_0 рассматривается при этом как промежуточная, относительно которой происходит движение систем K' и K . Соответственно, переход от какой-либо системы K' к какой-либо другой системе K можно осуществить через посредство системы K_0 так, как это указано в пункте 5 §1. Учитывая это замечание, ограничимся рассмотрением перехода от системы K_0 к какой-либо другой системе, движущейся относительно K_0 . В этой связи будем полагать, что система K' это и есть система K_0 . Тогда скорость системы K' в системе K можно определить значением u , представленным согласно (12) в виде

$$u = \frac{d}{p} c = \beta c (1 - \beta^2)^{-\frac{1}{2}} = c \cdot \text{ctg } \varphi, \quad (13)$$

$$\beta = \cos \varphi.$$

При этом введен в рассмотрение прямоугольный треугольник OMO' , в котором O', O — начала систем

K' , K , а M — любая точка пересечения сфер Φ' и Φ , определённого в плоскости $x' = 0$ в системе K' .

Примем по определению, что скорость расширения сферы Φ , обусловленная увеличением радиуса p сферы Φ' и движением системы K' в системе K , определяется в системе K тем же значением c , что и скорость расширения сферы Φ' в системе K . В результате таким условием определяются часы T в системе K , демонстрирующие время значениями $t = \frac{OM}{c}$ и, следовательно, скорость системы K' в системе K , измеренная по часам T , определяется согласно (12) значением v ,

$$v = \frac{d}{OM} c = \beta c = c \cdot \cos \varphi. \quad (14)$$

Таким образом, принятием по определению одной и той же величины c в качестве скорости расширения сфер Φ' и Φ в системах K' и K определяются различные единицы времени в этих системах. В результате различными значениями t' , t и u , v определяются один и тот же момент времени и одна и та же скорость системы K' в системе K . То есть осуществляется перенормировка значений времени и скорости согласно следующим правилам

$$t = t' \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}, \quad u = v \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}, \quad v = \beta c.$$

При этом неограниченным значениям скорости u соответствуют значения v , ограниченные значением c .

1. Событие, произошедшее в точке P , указанной радиусом-вектором $\vec{r}'$ в системе K' , может быть определено в системах K' и K либо одновременно, либо неодновременно. Это значит, что в одном случае точка P определяется в системах K' и K при одном и том же значении радиуса $p = ct'$ сферы Φ' , а в другом — в системе K' при значении $p = ct'_1$, а в системе K при значении $p_1 = ct'_1$, $t'_1 \neq t'$.

В первом случае смещение d системы K' в системе K , измеренное в системе K' и определённое значением $d = ut'$, равно величине этого смещения, измеренного в системе K и определённого значением $d = vt$, так как величина этого смещения измерена в этих системах в один и тот же момент. Это обстоятельство, собственно, и позволяет определить следующие преобразования при переходе от системы K' к системе K

$$x = ut' + x' = vt + x', \quad y = y',$$

$$z = z', \quad t = t' \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (15)$$

Во втором случае точка P определяется в системе K' при значении $d = ut'$ смещения системы K' в системе K , а в системе K — при значении

$d_1 = vt_1 = ut'_1$, отличающемся от значения $d = ut'$, и, следовательно преобразования (15) следует заменить иными.

Покажем, что указанные случаи определения событий в системах K' и K реализуются при использовании преобразований (8), которые запишем с учётом обозначений $v = \beta c$, $\rho' = ct'$, $\rho = ct$ в виде

$$x = (x' + vt')\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{1}{2}}, y = y', z = z',$$

$$\tau = \left(\tau' + \frac{v}{c^2}x'\right)\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (16)$$

и дополним следующими из (9) зависимостями

$$\tau' = t' - \frac{e}{c}x', \tau = t' + \frac{e}{c}x, \tau' + \tau = \frac{d}{ec}. \quad (17)$$

Как отмечено в пункте 4 §1, использование преобразований (8) сопряжено с двумя вариантами определения точки P в системе K' . Применительно к форме (16) этих преобразований и когда точка P определяется в системе K' радиусом-вектором $\vec{r}' = (x', y', z')$ в момент t' эти варианты таковы.

Во-первых, при переходе от системы K' к системе K точке P ставится в соответствие пара $(\tau', \vec{r}')$, в которой значение τ' вычисляется по первой из формул (17), согласно которой $\tau' = t'$ лишь, если точка P находится в плоскости $x' = 0$ в системе K' . Тогда посредством преобразований (16), применённых к паре $(\tau', \vec{r}')$, точка P определяется в системе K в тот же момент, что и в системе K' . При этом, наряду с (16), имеют место и преобразования (15).

Во-вторых, при переходе от системы K' к системе K преобразования (16) применяются непосредственно к паре $(t', \vec{r}')$. При этом в соответствии с первым из уравнений (17) это означает, что значение t' принимается в качестве значения τ' , соответствующего вычисляемому по значениям x' , $\tau' = t'$ значению $t'_1 = t' + \frac{e}{c}x'$. В результате посредством (16) точка P , определённая в системе K' в момент t' , определяется в системе K парой $(\tau, \vec{r})$ в момент t'_1 , равный t' лишь, если точка P находится в плоскости $x' = 0$.

2. Дополним, наконец, рассмотрение преобразований (16) следующим замечанием. Согласно (16), (17), если $x' = \text{const}$, то $d\tau' = dt'$, $d\tau = dt$. Следовательно, если точка P покоится в системе K' , а соответственные оси систем K' и K не обязательно параллельны, то ее движение в системе K определяется согласно (16) условием

$$c^2 dt'^2 = c^2 dt^2 - d\vec{r}^2. \quad (18)$$

Учтем, что $d\vec{r} = \vec{u}dt' = \vec{v}dt$, и, разделив равенство (18) на dt'^2 , запишем его в виде

$$u_0^2 - \vec{u}^2 = c^2, \quad (19)$$

$$u_0 = c \frac{dt}{dt'} = c \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (20)$$

$$\vec{u} = \frac{d\vec{r}}{dt} \frac{dt}{dt'} = \vec{v} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Примем теперь во внимание определение величин u , v согласно (13), (14), в котором они являются функциями угла φ при вершине O в прямоугольном треугольнике OMO' . При этом равенство (19) можно определить в качестве следствия равенства

$$OM^2 - OO'^2 = O'M^2 = p^2 = c^2 t'^2,$$

которое, очевидно, не зависит от того, меняется угол φ или нет в процессе относительного движения систем K' и K .

Так, если полагать, что относительное движение систем K' и K таково, что угол φ меняется вместе с изменением радиуса $p = ct'$ сферы Φ' , то величины

$\frac{OO'}{p}c$ и $\frac{OO'}{OM}c$ определяются в качестве значений

мгновенной скорости системы K' в системе K . В этом случае относительное движение систем K' и K оказывается неравномерным, а движение точки P в системе K – ускоренным.

Учитывая это замечание, продифференцируем (19) и (20) по t' и при этом получим

$$u_0 \frac{du_0}{dt'} - \vec{u} \frac{d\vec{u}}{dt'} = 0;$$

$$\frac{du_0}{dt'} = c \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{dt} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{1}{2}},$$

$$\frac{d\vec{u}}{dt'} = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{dt} \left(\vec{v} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right). \quad (21)$$

Таким образом, формулы (20), (21) определяют преобразование скорости $\vec{v}$ и ускорения $\frac{d\vec{v}}{dt}$ точки P ,

измеренных по часам T в системе K , при переходе к их определению в этой же системе K скоростью $\vec{u}$ и ускорением $\frac{d\vec{u}}{dt'}$, измеренным по часам T' . При этом

величины u_0 и $\frac{du_0}{dt'}$ допускают два прочтения. Во-первых, этими величинами определены скорость и ускорение расширения сферы Φ , измеренные в системе K по часам T' . Во-вторых, величиной $\frac{u_0}{c}$ пред-

ставлен коэффициент пропорциональности, связывающий показания t' и t часов T' и T , а величиной

$\frac{1}{c} \frac{du_0}{dt'}$ – изменение этого коэффициента, обусловленное неравномерностью относительного движения систем K' и K , а потому и неравномерностью хода часов T в системе K .

1. Н.В. Ефимов, *Высшая геометрия*, Наука, Москва (1978).
2. "Принцип относительности", Сборник работ по специальной теории относительности, Атомиздат, Москва (1973).
3. А.П. Волченко, Тезисы докладов Международной научной конференции "Лобачевский и современная геометрия", Часть 2, Казань, 18-22 августа 1992г.
4. А.П. Волченко, Доклад на Международной научной конференции «Дифференциальные уравнения и их приложения», Саранск, 16-20 мая 1998г, Средневолжское математическое общество, Препринт № 6.
5. А.П. Волченко, Труды Средневолжского математического общества, Т.1. №1, Саранск, (1998).

On the problem of the realization of four-dimensional pseudo-euclidean space $E_{(1,3)}^4$

A.P. Volchenko

A theory alternative to special theory of relativity (STR) is offered for consideration. In the alternative theory, the STR postulate of the constancy of the velocity of light in vacuum is interpreted as the condition by means of which the unit of time is determined. Namely: a second equals the period of time it takes the vertex of a light ray to cover in vacuum in every inertial system a distance of the same length of 299 792 458 m. A hypothesis, arguing that under the stated definition the unit of time is determined differently in different inertial systems, is studied.

Запись поляризации света, создаваемой анизотропными кристаллами, посредством фотоиндуцированного дихроизма в светочувствительных плёнках

Л.А. Агеев, В.К. Милославский, Арашмид Нагал

Харьковский государственный университет,

Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы 4

E-mail: vladimir.k.miloslavsky@univer.kharkov.ua

Показана возможность записи спектральной зависимости состояния поляризации света, создаваемой анизотропными кристаллами, посредством фотоиндуцированного дихроизма в светочувствительных плёнках AgCl с примесью гранулярного Ag. Записи состояния поляризации во всей видимой области спектра способствует присущий пленкам AgCl - Ag эффект частотной фотоадаптации, который определяет также хорошую цветопередачу спектра облучающего пучка. Обнаружена принципиальная возможность определения величины и дисперсии фотоиндуцированного дихроизма путём анализа регистрируемой в пленке картины в поляризованном свете.

Показана можливість запису стану поляризації світла, яка утворюється анізотропними кристаллами, за допомогою фотоіндукованого дихроїзму у світлочутливих плівках AgCl з домішкою гранульованого Ag. Запису стану поляризації у всій видимій області спектра сприяє присутній у плівках AgCl-Ag ефект частотної фотоадаптації, який визначає також добру передачу кольору спектра опромінюючого пучка. Виявлено принципову можливість визначення величини і дисперсії фотоіндукованого дихроїзму шляхом аналізу картини, яка спостерігається у плівці в поляризованому світлі.

PACS: 42.70.Gi, 42.25.Ja

Введение

Фотоиндуцированный дихроизм (ФД), наведенный в светочувствительных пленках или кристаллах (эффект Вейгерта) находит применение в голографии и фотографической технике. Известно использование ФД для голографической записи состояния поляризации объектной волны [1, 2], для записи и считывания двух голограмм на одном фото анизотропном кристалле [3]; ФД может также использоваться для записи двух изображений в ортогонально поляризованных пучках [4] и для формирования голографических решёток с высокой дифракционной эффективностью [5]. В представленной работе мы сообщаем об использовании ФД, наведенного в тонких светочувствительных пленках, для записи состояния поляризации света, прошедшего через прозрачные двулучепреломляющие пластины.

В качестве индикатора состояния поляризации нами использованы тонкие пленки хлористого серебра, допированные гранулярным серебром. Мельчайшие гранулы Ag создают в AgCl широкую коллоидную полосу поглощения с максимумом при 510 - 520 нм, в связи с чем пленка AgCl-Ag становится фоточувствительной к падающему излучению во всей видимой области. Под действием линейно поляризованного монохроматического излучения полоса поглощения расщепляется на две поляризованные компоненты и в пленке возникает ФД с максимумом при длине волны λ_0 облучающего пучка [6, 7]. Эта особенность ФД позволяет использовать пленки AgCl-Ag для записи состояния поляризации света, прошедшего через кристаллические пластинки, при различных длинах волн индуцирующего пучка.

Эксперимент и его результаты

Тонкие, толщиной около 100 нм, пленки AgCl были нанесены в вакууме на прозрачные стеклянные подложки. Напыление пленок AgCl осуществлялось из ленточного молибденового испарителя. Затем на пленку AgCl осаждается очень тонкий, толщиной около 10 нм, слой Ag. В процессе осаждения серебро в результате термодиффузии проникает в пленку AgCl и выделяется в ней в виде мельчайших, диаметром около 10 нм, гранул и создает вышеупомянутую коллоидную полосу [8].

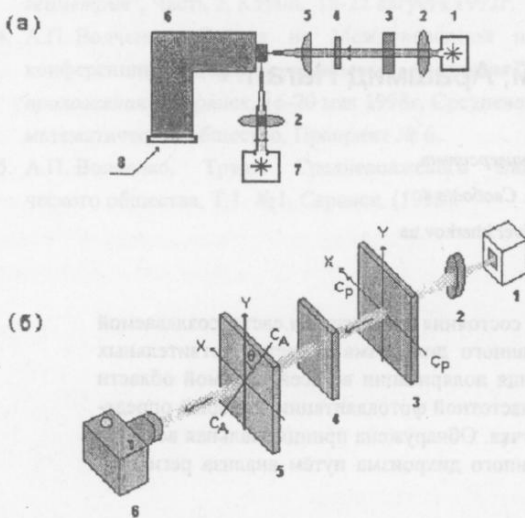


Рис. 1. Схема облучения плёнки AgCl - Ag (а) и схема наблюдения записанной на плёнке спектральной картины дихроизма (б).

а): 1 – ксеноновая лампа ДКСШ-200; 2 – сферический конденсор; 3 – поляризатор; 4 – кристаллическая пластинка; 5 – цилиндрический конденсор; 6 – спектрограф; 7 – ртутная лампа ДРШ-250; 8 – образец AgCl - Ag в фокальной плоскости спектрографа.

б): 1 – лампа накаливания; 2 – сферическая линза; 3 – поляризатор, C_p – направление линейной поляризации; 4 – дихроичный образец AgCl - Ag; 5 – анализатор, C_A – направление линейной поляризации, изменяемое поворотом анализатора на угол θ ; 6 – фотоаппарат.

Для демонстрации записи различных состояний поляризации была использована спектральная зависимость разности фаз для ортогонально поляризованных волн в кристаллической анизотропной пластинке. С этой целью применялась следующая установка (рис. 1а). Перед входной щелью спектрографа были последовательно помещены источник непрерывного спектра (Xe лампа сверхвысокого давления ДКСШ-200), линза для создания параллельного пучка,

поляризатор, кристаллическая сапфировая пластина толщиной $h = 0.115$ см и цилиндрическая линза, фокусирующая световой пучок на щель. Фоточувствительный слой на стеклянной подложке размером $5 \times 5 \times 0.15$ см помещался в фокальной плоскости спектрографа (обратная линейная дисперсия 11.5 нм/мм при $\lambda = 546$ нм). Кристалл с оптической осью C , параллельной поверхности пластины, ориентировался осью C параллельно плоскости падения света на призму спектрографа. Поляризатор был установлен под углом $\Psi = \angle(E_0, C)$ (E_0 – вектор поляризации падающего на кристалл света), близким к 45° . Угол Ψ подбирался для компенсации поляризующего действия призмы спектрографа ($\text{tg } \Psi = \frac{A_p}{A_s}$, где

A_p и A_s – амплитуды p - и s -поляризованного света, прошедшего через призму). При такой установке поляризатора в фокальной плоскости наблюдается непрерывный спектр от источника, однако сохраняется зависящее от длины волны состояние поляризации, задаваемое кристаллом, от линейной до круговой. Для устранения поляризующего действия призмы возможен иной вариант установки, в которой поляризатор и кристалл помещаются после объектива выходного коллиматора близко к фокальной плоскости.

Заметный дихроизм в пленке AgCl-Ag достигается при временах экспозиции около 1 час. Максимальный дихроизм имеет место при длинах волн λ_m подчиняющихся условию $m\lambda_m = 2(n_o - n_e)h$, где n_o и n_e – главные значения показателя преломления кристалла, m – целое число. При длинах волн $\lambda_m + 1/2$ на фоточувствительный слой падает циркулярной поляризованный свет и дихроизм в пленке отсутствует. Таким образом, дихроичные участки фоточувствительного экспонированного слоя представляют собой перемежающиеся узкие вертикальные полосы, расположенные в точках x_m вдоль спектра, подчиняющиеся условию $\beta x_m = m\pi$, где коэффициент β зависит от линейной дисперсии спектрографа и разности фаз для ортогональных волн, выходящих из кристалла. В районе этих полос облученную пленку можно уподобить одноосному кристаллу с оптической осью C , параллельной вектору поляризации E_0 падающей на пленку линейно поляризованной волны. При m равным четному (нечетному) числу оптические оси анизотропной пленки расположены соответственно под углом 45° и -45° к оси x . Для наблюдения и регистрации записанного состояния поляризации использовалась схема (рис. 1б). Параллельный пучок света от источника белого света (лампа накаливания) проходит через поляризатор P ($E_p \parallel x$) и падает на слой AgCl-Ag, в котором записано состояние поляризации. Прошедший через слой световой пучок анализируется с помощью анализатора, плоскость поляризации кото-

рого составляет в общем случае угол θ с осью y (при $\theta = 0^\circ$ поляризатор и анализатор скрещены). Картина на поверхности образца в прошедшем через анализатор свете наблюдается визуально и фотографируется на цветной и черно-белой пленке. На рис. 2 показана серия фотографий: $\theta = 0^\circ$ (в), $\theta = \pm 2^\circ$ (б, г), $\theta = \pm 6^\circ$ (а, д). На рис. 3 показаны картины в отсутствии анализатора. В последнем случае использовалась иная установка поляризатора ($\angle(E_p, x) = \pm \frac{\pi}{4}$).

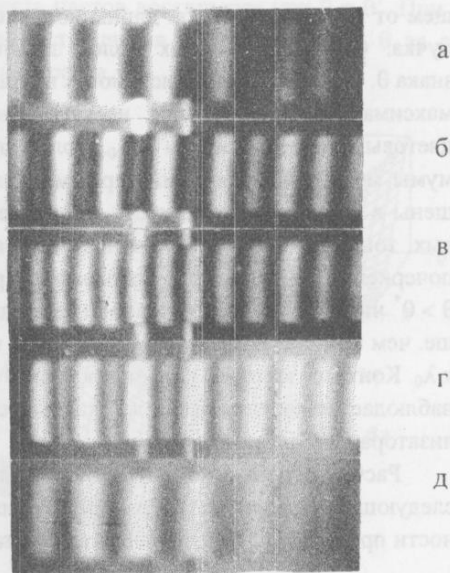


Рис. 2. Спектральные картины дихроизма, наблюдаемые на образце по схеме рис. 1б: (в) $\theta = 0^\circ$; (б, г) $\theta = \pm 2^\circ$; (а, д) $\theta = \pm 6^\circ$. Правильное спектральное положение полос обеспечено совмещением реперных линий Hg: $\lambda = 578$ нм (левая), $\lambda = 546$ нм (правая).

Обсуждение результатов

Пусть на слой AgCl - Ag падает линейно-поляризованная волна с вектором поляризации E_0 . Под действием света исходная коллоидная полоса Ag в AgCl расщепляется на поляризованные компоненты. Форма полос становится сложной: в полосе, измеренной при поляризации пробного пучка $E \parallel E_0$, возникает спектральный провал, связанный с выжиганием дыры в неоднородно уширенной исходной полосе [9]. Фоточувствительный слой становится оптически анизотропным. Анизотропия проявляется в виде линейного дихроизма и двулучепреломления [10]. Мера линейного дихроизма является разность $\Delta D = D_\perp - D_\parallel$, где $D_{\perp \parallel} = -\ln T_{\perp \parallel}$, $T_\perp$ и $T_\parallel$ - пропускание слоя для поляризации пробного пучка $E \perp E_0$ и $E \parallel E_0$ соответственно. Типичный спектр $\Delta D(\lambda)$ для плёнки AgCl - Ag, облученной линейно-

поляризованным светом He - Ne лазера ($\lambda_0 = 633$ нм) (рис. 4) свидетельствует, что при $\lambda \approx \lambda_0$ величина $\Delta D > 0$ и достигает максимального значения; при $\lambda < \lambda_0$, ΔD изменяет свой знак и величина $|\Delta D_{\min}| < |\Delta D_{\max}|$. Максимум ΔD в плёнках AgCl - Ag достигается при $\lambda \approx \lambda_0$ независимо от длины волны λ_0 облучающего пучка (явление фотоадаптации [9, 11]) в пределах всей коллоидной полосы Ag.

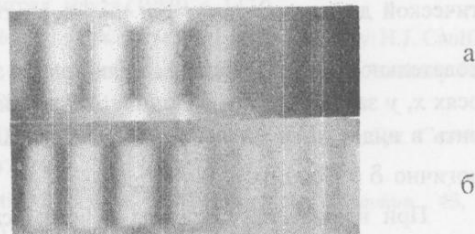


Рис. 3. Взаимно дополняющие картины спектральных полос дихроизма, наблюдаемые на образце в линейно поляризованном белом свете (без анализатора). а, б) $E_p \perp x$, $E_p \parallel x$ соответственно, x - направление развертки спектра.

Вектор Джонса дихроичной фазовой пластинки толщиной d равен:

$$A = A_0 e^{-0.5 K_0 d} e^{-i \delta_\parallel} [\rho^{-\frac{1}{2}}, \rho^{\frac{1}{2}} \exp(-i \delta)], \quad (1)$$

где K_0 - средний коэффициент поглощения анизотропного слоя,

$$\delta_\parallel = \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right) n_\parallel d,$$

$$\rho = \left(\frac{T_\perp}{T_\parallel} \right)^{\frac{1}{2}} = \exp(-0.5 \Delta D) \text{ и } \delta = \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right) (n_\perp - n_\parallel) d.$$

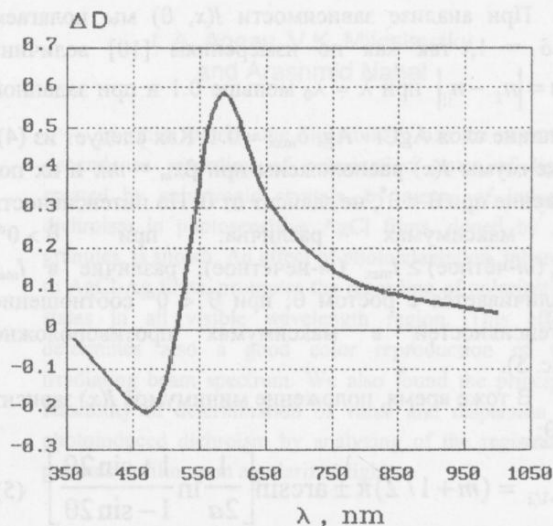


Рис. 4. Кривая спектральной зависимости дихроизма, индуцированного в плёнке AgCl - Ag излучением He - Ne лазера, $\lambda_0 = 633$ нм.

В условиях записи состояния поляризации в кристалле сапфира с помощью AgCl - Ag, линейно поляризованный свет с вектором поляризации E_0 , составляющем угол с осью x $\angle(E_0, x) = \frac{\pi}{4} \left(-\frac{\pi}{4} \right)$ падает

на фоточувствительный слой в точках x_m , где $\beta x_m = m\pi$ при чётном (нечётном) значении m . В промежуточных точках состояние поляризации изменяется от эллиптической до (при $\beta x_{m+1/2} = \left(m + \frac{1}{2}\right)\pi$ круговой. Следовательно, в этих условиях величина и знак ΔD в осях x, y зависят от x и величину ΔD можно представить в виде $\Delta D = 2a \cos(\beta x)$, где $2a = \Delta D_{\max}$. Аналогично $\delta = b \cos(\beta x)$, $b = \delta_{\max}$.

При наблюдении картины в белом свете в отсутствие анализатора при $\angle(E_p, x) = \pi/4$ (E_p – вектор поляризации, задаваемый поляризатором) интенсивность света, прошедшего через слой AgCl - Ag равна:

$$I = I_0 \exp(-K_0 d) \exp[a \cos(\beta x)] \quad (2)$$

При этом $I_{\max}(I_{\min})$ достигается при $\beta x_m = m\pi$, m – чётное (нечётное) число. Контраст наблюдаемой картины (рис. 3) невелик, зависит от величины дихроизма и равен:

$$V = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}} = \tanh a \quad (3)$$

Полосы соответствующие максимумам окрашены и цветовой тон полос близок к длине волны облучающего пучка λ_0 , что связано с эффектом фотоадап-

тации. Однако насыщенность цвета небольшая за счет разбавления белым светом.

Более сложная картина наблюдается в установке использующей анализатор (рис. 1б). В скрещенных поляризаторах ($\theta = 0^\circ$) наблюдается удвоенная система почти эквидистантных (с поправкой на дисперсию спектрографа) полос и максимумы бесцветны (рис. 2). Картина резко изменяется при повороте анализатора на небольшой угол θ . При этом черные полосы попарно сближаются и сливаются при значении θ^* , зависящем от координаты x , т.е. длины волны облучающего пучка. Смещение черных полос зависит также от знака θ . Полосы, где интенсивность прошедшего света максимальна, приобретают насыщенную окраску с цветовым тоном, близким к λ_0 . Более слабые максимумы между сближенными черными полосами окрашены в дополнительные цвета. Распределение цветовых тонов вдоль спектра влияет на распределение почернения черно-белых фотографий (рис. 2). При $\theta > \theta^*$ число максимумов становится в два раза меньше, чем при $\theta = 0^\circ$ и цветовой тон ярких полос близок к λ_0 . Контраст картины падает с ростом θ и при $\theta = \pi/4$ наблюдается картина такая же, как в отсутствие анализатора при $\angle(E_p, x) = \pi/4$.

Расчет с помощью матриц Джонса приводит к следующей зависимости распределения интенсивности прошедшего через анализатор света вдоль оси x :

$$I = \frac{I_0}{4} \exp(-K_0 d) [(1 + \sin 2\theta)\rho^{-1} - 2 \cos \delta \cos 2\theta + (1 - \sin 2\theta)\rho] \quad (4)$$

При анализе зависимости $I(x, \theta)$ мы полагаем $\cos \delta = 1$, так как по измерениям [10] величина $\Delta n = |n_{\perp} - n_{\parallel}|$ при $\lambda = \lambda_0$ меньше 0.1 и при заданной толщине слоя AgCl - Ag, $\delta_{\max} \approx 0.1$. Как следует из (4), максимумы $I(x)$ расположены при $\beta x_m = m\pi$ и их положение при $\theta < \theta^*$, не зависит от θ . Но интенсивность в максимумах различна: при $\theta > 0^\circ$, $I_{\max}(m\text{-чётное}) \geq I_{\max}(m\text{-нечётное})$, различие в $I_{\max}$ увеличивается с ростом θ ; при $\theta < 0^\circ$ соотношение интенсивностей в максимумах противоположно (рис. 5).

В тоже время, положение минимумов $I(x)$ зависит от θ :

$$\beta x_{m+1/2} = (m + 1/2)\pi \pm \arcsin \left[\frac{1}{2a} \ln \frac{1 + \sin 2\theta}{1 - \sin 2\theta} \right] \quad (5)$$

Подстановка (5) в (4) даёт $I_{\min} = 0$, т.е. при использовании анализатора контраст наблюдаемой картины наибольший ($V=1$), знаки “+” и “-” соответ-

ствуют чётному и нечётному m . В скрещенных поляризаторах ($\theta = 0^\circ$) второе слагаемое в (5) исчезает и минимумы $I(x, 0)$ соответствуют воздействию на фоточувствительный слой циркулярно-поляризованного света. При увеличении θ минимумы $I(x)$ сближаются и сливаются в один при:

$$\theta^* = \frac{1}{2} \arcsin [\tanh(a)] \quad (6)$$

Слияние и сближение минимумов зависит от величины дихроизма $\Delta D_{\max}$ облучённой пленки, чем можно воспользоваться для определения его зависимости от длины волны облучающего пучка. При $a = 0.3$, что соответствует $\Delta D_{\max} = 0.6$ на рис. 4, $\theta^* = 8^\circ 29'$, что близко к данным эксперимента для красной области спектра. При $\theta > \theta^*$ максимумы $I(x)$ расположены также при $\beta x_m = m\pi$, но при чётных m ($\theta > 0^\circ$); при нечётных значениях m имеют место минимумы. С ростом θ контраст наблюдаемых полос

падает и при $\theta \rightarrow \pi/4$, $V(\theta) \rightarrow \tanh a$, что соответствует контрасту полос (3) в отсутствии анализатора.

Распределение интенсивности в полосах и их контраст сказываются на окраске полос и насыщенности цветов. При $\theta = 0^\circ$ анализатор одинаково пропускает свет при $E \parallel E_0$ и $E \perp E_0$ за счёт чего максимумы $I(x)$ ахроматичны. При небольшом повороте анализатора на угол $\pm\theta$ интенсивность излучения, прошедшего через анализатор, различна для $E \parallel E_0$ и $E \perp E_0$, и полосы приобретают окраску. Наибольшая насыщенность цветов достигается при $\theta = \theta^*$. При $\theta > \theta^*$ насыщенность цветов падает с ростом θ за счёт снижения контраста.

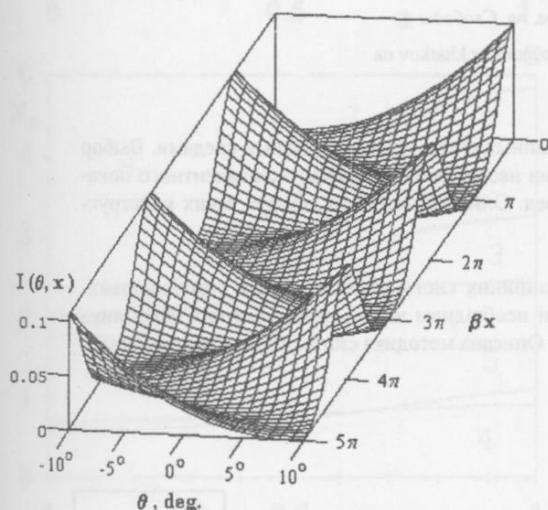


Рис. 5. Расчётная по формуле (4), при $a = 0.3$, зависимость интенсивности света, пропускаемого анализатором (схема рис. 1б), от фазы βx .

а) $\theta = 0^\circ$; б, в) $\theta = \pm 2^\circ$; г) $\theta = +6^\circ$; д) $\theta = +9^\circ$.

Выводы

Приведенные экспериментальные данные свидетельствуют о возможности записи состояния поляризации света, создаваемой кристаллическими пластинками, без использования стандартной схемы наблюдения интерференции поляризованных волн в скрещенных или параллельных поляризаторах. Запись состояния поляризации в пленках $\text{AgCl} - \text{Ag}$ сопровождается одновременно удовлетворительной цветопередачей спектрального состава индуцирующего дихроизм излучения в видимой области. Анализ записанной картины в скрещенных поляризаторах приводит к удвоенной системе полос, что может быть использовано для более точного определения дисперсии двулучепреломления в тонких кристаллах или для анализа распределения напряжений в деформированных об-

разках с помощью эффекта фотоупругости. Исследование картины в скрещенных поляризаторах при различных θ позволяет также при одной экспозиции определить дисперсию фотоиндуцированного дихроизма. Дальнейшие исследования должны быть, по-видимому, направлены на повышение чувствительности фотодихроичных материалов.

1. Ш.Д. Какичашвили, *Поляризационная голография*, Ленинград, Наука (1989), с. 142.
2. *Handbook of optical holography*, Edited by H.J. Caulfield, NY, London, Toronto, Sydney, San Franc., Academy Press, V.1, Chapter 5, (1979), 374 p.
3. M.P. Petrov, S.I. Stepanov, A.A. Kamshilin, *Opt. Commun.*, **21**, 297 (1977).
4. M. Attia, S. Debrus, M.P. Henriot, *Opt. Commun.*, **45**, 235 (1983).
5. T. Todorov, L. Nikolova, N. Tomova *Appl. Opt.*, **23**, 4588 (1984).
6. L.A. Ageev, V.K. Miloslavsky, *Opt. Eng.*, **34**, 960 (1995).
7. Л.А. Агеев, В.К. Милославский, *Опт. и спектр.*, **45**, 537 (1978).
8. Л.А. Агеев, Х.И. Эль-Ашхаб, *ЖПС*, **60**, 152 (1994).
9. Л.А. Агеев, В.К. Милославский, М.В. Варминский, *Опт. и спектр.*, **83**, 159 (1997).
10. Л.А. Агеев, В.К. Милославский, В.И. Лымар, *ЖПС*, **57**, 331 (1992).
11. Л.А. Агеев, В.К. Милославский, Х.И. Эль-Ашхаб, *Опт. и спектр.*, **73**, 364 (1992).

Recording of light polarization, created by anisotropic crystals, by means of photoinduced dichroism in photosensitive films

L.A. Ageev, V.K. Miloslavsky
and Arashmid Nahal

In this work, the feasibility of the spectral dependence recording of polarization states of light, created by anisotropic crystals, by means of induced dichroism in photosensitive AgCl films, doped by Ag granules, is shown. An effect of photoadaptation, inherent to $\text{AgCl} - \text{Ag}$ films, promotes the recording of polarization states in all visible wavelength region. This effect determines also a good color reproduction of the irradiating beam spectrum. We also found the principal feasibility of determination of value and dispersion of photoinduced dichroism by analyzing of the registered patterns in film upon a polarized light.

Согласование интерференционных систем с обрамляющими средами

А.П. Овчаренко

Харьковский государственный университет,

Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы 4

E-mail: Alexander.P.Ovcharenko@univer.kharkov.ua

Предложен новый метод согласования интерференционных систем с окружающими средами. Выбор конструкции дополнительных слоёв основан на изменении необходимым образом эквивалентного показателя преломления не основной системы, а внешних сред. Описана методика синтеза таких конструкций.

Запропонований новий метод узгодження інтерференційних систем з оточуючими середовищами. Вибір конструкції додаткових шарів заснований на зміні необхідним чином еквівалентного показника заломлення не основної системи, а зовнішніх середовищ. Описана методика синтезу таких конструкцій.

PACS 42.79.B

В подавляющем числе использований элементов записи, считывания, преобразования оптической информации их характеристики должны быть согласованы необходимым для решаемой задачи образом с параметрами используемого излучения. В качестве требуемого значения показателя преломления подложки n_s может быть использован эквивалентный показатель преломления N_s системы подложка + набор осажженных слоев.

Пусть на подложке S (см. рис. 1) находится слой диэлектрика A, и на него осаждается слой диэлектрика B (показатели преломления n_A и n_B соответственно). Если под A и B понимать четвертьволновые для контрольной длины волны λ_k слои, то конструкцию системы можно описать выражением $S_0\beta B\alpha A$, где S_0 – вторая обрамляющая среда, из которой падает свет с показателем преломления n_0 (обычно, например при вакуумном осаждении покрытия равен 1), а множители α и β определяют оптические толщины слоёв в единицах $\lambda_k/4$. Частный случай такой системы и ее применения для создания отрезающих фильтров рассмотрен нами в работе [1], а некоторые свойства комбинации двух плёнок с толщинами менее $\lambda_k/4$ описаны в [2].

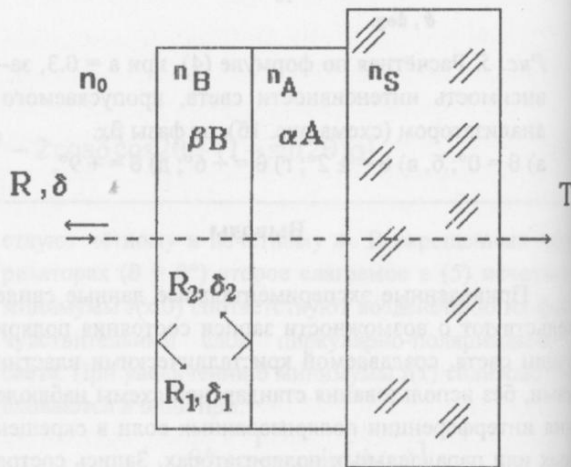


Рис. 1. Основная двухслойная система для создания эквивалентной подложки.

Пропускание такой системы (без учета второй границы подложки) может быть представлено выражением [3]

$$T = T_0 \{1 + F \sin^2 \Phi\}^{-1}, \quad (1)$$

$$\text{где } T_0 = (1 - R_1)(1 - R_2)(1 - \sqrt{R_1 R_2})^{-2},$$

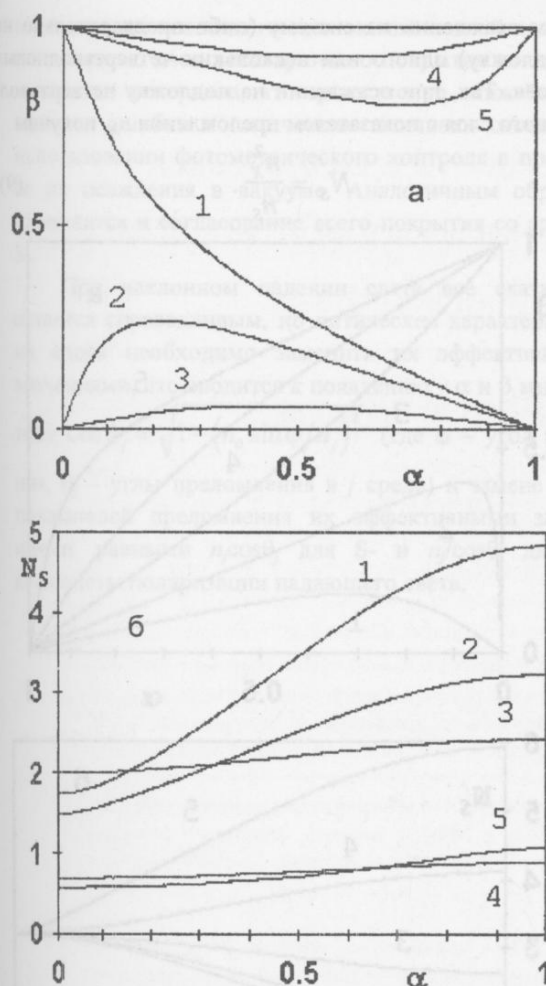


Рис. 2. Связь $\beta(\alpha)$ – (а) и $N_s(\alpha)$ – (б) при различных показателях преломления подложки.

$F = 4\sqrt{R_1 R_2} (1 - \sqrt{R_1 R_2})^{-2}$, R_1, R_2 – коэффициенты отражения на границах слоя В; δ_1, δ_2 – соответствующие им сдвиги фаз при падении света на границы изнутри слоя; $\Phi = [0,5(\delta_1 + \delta_2) - \varphi_B]$ в общем случае, но в нашей задаче (см. рис. 1), $\delta_1 \equiv 0$ и $\Phi = [0,5\delta_2 - \varphi_B]$, фазовая толщина слоя В равна

$$\varphi_B = \frac{2\pi n_B t_B}{\lambda} = 0,5\pi\nu\beta,$$

где t_B – геометрическая толщина и $\nu = \lambda_k/\lambda$, λ – текущая длина волны (при осаждении равна λ_k и тогда $\nu = 1$). Сдвиг фазы при отражении от всего покрытия равен

$$\text{tg } \delta_2 = \frac{\sqrt{R_{AS}}(1 - R_{AB})\sin(\delta_{AS} - 2\varphi_A)}{\sqrt{R_{AB}}(1 + R_{AS})\cos\delta_{BA} + \sqrt{R_{AS}}(1 + R_{AB})\cos(\delta_{AS} - 2\varphi_A)}, \quad (6)$$

где индексы обозначают соответствующую границу либо слой. Тогда связь экстремального значения β с α ,

$$\text{tg } \delta = \frac{\sqrt{R_2}(1 - R_1)\sin 2\Phi}{\sqrt{R_1}(1 + R_2) + \sqrt{R_2}(1 + R_1)\cos 2\Phi}. \quad (2)$$

Экстремальные значения пропускания (1) имеют место при толщинах слоя В, удовлетворяющих условию $\Phi = \Phi_e = 0,5 m\pi$ ($m = 0, 1, 2 \dots$). Тогда, как видно из (2), в экстремумах $\text{tg } \delta \equiv 0$.

С другой стороны, если воспользоваться эквивалентными показателями преломления рассматриваемой системы η_1 – со стороны падения света, η_2 – со стороны подложки и эквивалентной толщиной γ , то её матрицу интерференции A_{ij} можно представить в виде [4]

$$A_{ij} = \begin{pmatrix} (\eta_2/\eta_1)^{1/2} \cos \gamma & i(\eta_1 \eta_2)^{-1/2} \sin \gamma \\ i(\eta_1 \eta_2)^{1/2} \sin \gamma & (\eta_1/\eta_2)^{1/2} \cos \gamma \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где

$$\eta_1^2 = \frac{A_{21}A_{22}}{A_{12}A_{11}}; \quad \eta_2^2 = \frac{A_{21}A_{11}}{A_{12}A_{22}}; \quad \cos^2 \gamma = A_{11}A_{22}; \quad (4)$$

Выражение для сдвига фазы (2), записанное через элементы матрицы интерференции, имеет вид

$$\text{tg } \delta = \frac{2n_0(A_{12}A_{22}n_s^2 - A_{11}A_{21})}{A_{11}^2n_0^2 - A_{22}^2n_s^2 + A_{12}^2n_0^2n_s^2 - A_{21}^2} \quad (5)$$

Условие $\text{tg } \delta = 0$ может быть выполнено за счёт одновременного равенства 0 матричных элементов, стоящих на одной из диагоналей, но это реализуемо на λ_k при α и β превышающих 1, что выходит за рамки нашей задачи. Тогда из сравнения (2), (4), (5) видно, что в моменты достижения экстремальных значений пропускания и $\alpha < 1$ эквивалентный показатель преломления $\eta_2 \equiv n_s$, т.е. исчезает граница двухслойник-подложка, и вся представленная на рисунке 1 система может рассматриваться как некая новая “эквивалентная” подложка с показателем преломления $N_s \equiv \eta_1$. Получаемые таким образом значения N_s могут быть как много больше, так и меньше значений n_0 и n_s . Отметим, что случай $N_s = \eta_1 = n_0$ соответствует просветляющему покрытию [4].

Связь минимальной экстремальной толщины слоя В и толщины слоя А следует (см. (2)) из условия $\sin(2\Phi_e) = \sin(\delta_2 - 2\varphi_B) = 0$ при $m = 0$, а δ_2 аналогично (2) определяется выражением

выраженная через показатели преломления, окончательно принимает вид

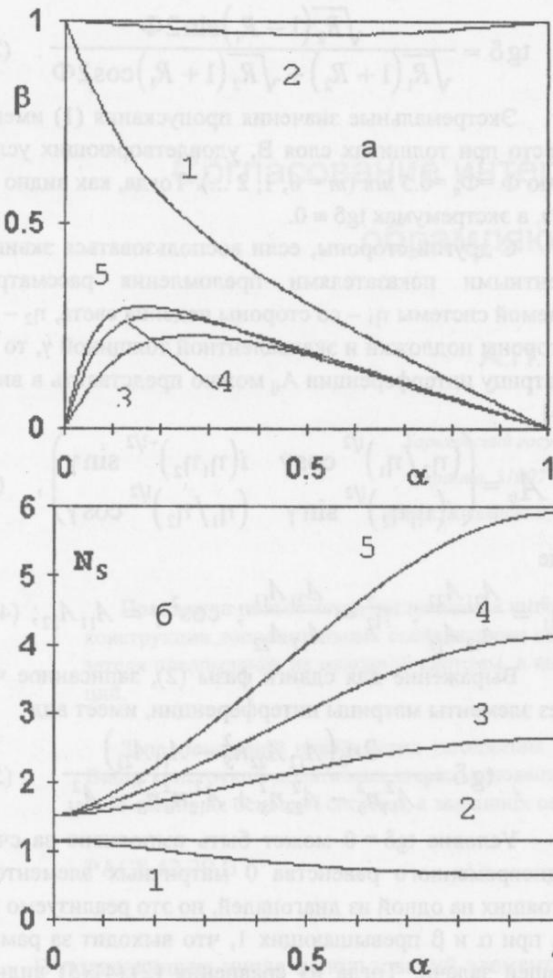


Рис. 3. Связь $\beta(\alpha)$ – (а) и $N_s(\alpha)$ – (б) при различных показателях преломления слоя А.

$$\operatorname{tg} \beta \pi = \frac{2n_A n_B (n_A^2 - n_S^2) \sin \alpha \pi}{(n_A^2 - n_B^2)(n_A^2 + n_S^2) - (n_A^2 + n_B^2)(n_A^2 - n_S^2) \cos \alpha \pi} \quad (7)$$

В частности, если потребовать выполнения условия $\alpha = \beta$, то получим:

$$\cos \alpha \pi = \frac{(n_A - n_B)(n_A^2 + n_S^2)}{(n_A + n_B)(n_A^2 - n_S^2)} \quad (8)$$

На рис. 2–4 приведены зависимости экстремальных значений $\beta(\alpha)$ и соответствующих им значений $N_s(\alpha)$ при изменении показателя преломления подложки (рис.2), слоя А (рис.3) и слоя В (рис.4) в диапазоне от 1 до 3 с шагом 0.5 (кривые 1–5 соответственно) и значениях $n_A = 1.32$, $n_B = 2.2$ и $n_S = 1.52$. Как видно из приведенных данных, при указанных показателях преломления и толщинах слоев может быть получен весьма широкий диапазон значений N_s . Дальнейшее расширение этого диапазона возможно при использовании полученных значений в качестве исходных и осаждении дополнительного двухслойника. Другая возможность заключается в дополнитель-

ном осаждении на систему (либо предварительно на подложку) одного или нескольких четвертьволновых слоёв. Так, при осаждении на подложку четвертьволнового слоя с показателем преломления n_X , получим

$$N_s = \frac{n_X^2}{n_S} \quad (9)$$

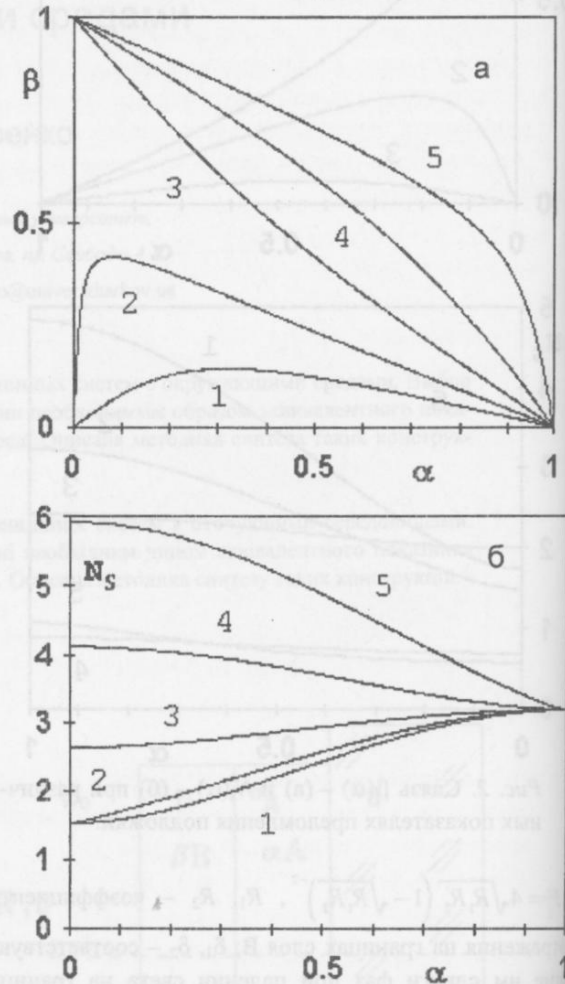


Рис. 4. Связь $\beta(\alpha)$ – (а) и $N_s(\alpha)$ – (б) при различных показателях преломления слоя В.

На рисунках такая ситуация реализуется при $\alpha, \beta < 1$ и ($\alpha \rightarrow 1$ и $\beta \rightarrow 0$) – рис. 2,б, кривые 1, 2, 3; рис. 3,б, кривые 1, 3, 4, 5 и все кривые рис. 4,б, либо ($\alpha \rightarrow 0$ и $\beta \rightarrow 1$) – рис. 2,б, кривые 1, 4, 5; рис. 3,б, кривые 1, 2 и рис. 4,б, кривые 3, 4, 5.

При $\alpha \rightarrow 1$ и $\beta \rightarrow 1$ и $\alpha, \beta < 1$ значение N_s стремится к

$$N_s = \frac{n_B^2 n_S}{n_A^2} \quad (10)$$

(рис. 2,б, кривые 4, 5; рис. 3,б, кривая 2). При $\alpha \rightarrow 0$ и $\beta \rightarrow 0$, естественно $N_s \rightarrow n_S$.

Существенной особенностью описанного подхода к созданию подложки с требуемым показателем преломления является принципиальная возможность

изготовления последнего слоя эквивалентной подложки и первого слоя последующего покрытия из одного и того же материала, что существенно снижает возможные ошибки в оптических толщинах слоев при использовании фотометрического контроля в процессе их осаждения в вакууме. Аналогичным образом проводится и согласование всего покрытия со средой S_0 .

При наклонном падении света все сказанное остается справедливым, но оптические характеристики слоев необходимо заменить их эффективными значениями, что сводится к появлению у α и β множителя $\cos\theta_j = \sqrt{1 - (n_0 \sin\phi/n_j)^2}$ (где ϕ – угол падения, θ_j – углы преломления в j среде) и замене всех показателей преломления их эффективными значениями, равными $n_j \cos\theta_j$ для S- и $n_j/\cos\theta_j$ для P-компоненты поляризации падающего света.

1. А.П. Овчаренко, Е.А. Лупашко, И.Н. Шкляревский, *Опт. и спектр.* 60, 831 (1986).
2. A.J. Vermeulen, *Opt. Acta*, 18 531 (1971).
3. Г.В. Розенберг, *Оптика тонкослойных покрытий*, Физматгиз, Москва (1958).
4. А.П. Овчаренко, Э. Баудах, *Опт. и спектр.* 64, 429 (1988).

Coordination of interference systems with surrounding media

A.P. Ovcharenko

New method of the coordination of interference systems with surrounding media is proposed. The choice of a design of additional layers is based on change by a necessary manner of an equivalent index of the not basic system, but external media. A method of synthesis of such designs is described.

Комбинационное рассеяние света в смешанных кристаллах $K_{1-x}(NH_4)_xH_2PO_4$: анализ колебательного спектра в параэлектрической фазе

А.В. Ванькевич, Ю.А. Попков, И.А. Таранова

Харьковский государственный университет,

Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы 4

E-mail: Yury.A.Popkov@univer.kharkov.ua

Методом комбинационного рассеяния света (КРС) при комнатной температуре в широком диапазоне частот ($0-3500\text{см}^{-1}$) и концентраций ($x = 0+1$) изучен колебательный спектр смешанных кристаллов KADP. Определены значения частот и полуширин линий внутренних колебаний тетраэдрических групп PO_4 и NH_4 . Проведен теоретико-групповой анализ колебательного спектра и дана классификация линий КРС в соответствии с этим анализом.

Установлено, что в смешанных кристаллах KADP в зависимости от концентрации аммония характер поведения внутренних колебаний ионных комплексов (PO_4 и NH_4) и внешних колебаний решетки ($K-H_2PO_4$ и $NH_4-H_2PO_4$) существенно различен: поведение внутренних колебаний – одномодовое, а внешних – двухмодовое.

За допомогою методу комбінаційного розсіяння світла (КРС) при кімнатній температурі у широкому діапазоні частот ($0-3500\text{см}^{-1}$) та концентрацій ($x = 0+1$) вивчено спектр коливань змішаних кристалів KADP. Визначено значення частот та напівширин ліній внутрішніх коливань тетраедричних груп PO_4 і NH_4 . Здійснений теоретико-груповий аналіз спектру коливань та дана класифікація ліній КРС згідно з цим аналізом.

Встановлено, що у змішаних кристалах KADP у залежності від концентрації амонію характер поведінки внутрішніх коливань іонних комплексів (PO_4 та NH_4) та зовнішніх коливань решітки ($K-H_2PO_4$ та $NH_4-H_2PO_4$) суттєво різні: поведінка внутрішніх коливань – одномодова, а зовнішніх – двохоорова.

PACS: 77.80.Bh

Смешанные кристаллы $K_{1-x}(NH_4)_xH_2PO_4$ (KADP) принадлежат к классу твёрдых растворов сегнетоэлектрик - антисегнетоэлектрик семейства KDP с общей формулой $A_{1-x}B_xMO_4$ (где A - K, Rb, Cs; B - NH_4 ; M - P или As). Повышенный интерес к данной группе соединений вызван наличием у них в зависимости от содержания ингредиентов различных низкотемпературных фаз. Так, в кристалле KADP, в области концентраций $x < 0,22$ реализуется сегнетоэлектрическая фаза, при $x > 0,72$ – антисегнетоэлектрическая, а в промежуточной области концентраций ($0,22 < x < 0,72$) обнаружено новое состояние, получившее название структурного (дипольного, протонного) стекла [1-3]. Состояние стекла – следствие различия упорядочения ионов при фазовых переходах

в чистых составляющих, что приводит к их фрустрации в смешанных кристаллах.

Хотя переход в состояние стекла, в отличие от фазовых переходов в сегнето- и антисегнетоэлектрические фазы, и не сопровождается изменением общей симметрии кристаллов [4], однако он связан с "замораживанием" локальных искажений структуры [5]. Метод комбинационного рассеяния света (КРС) – один из немногих экспериментальных методов, позволяющих не только зафиксировать такие локальные изменения в структуре, но и проследить динамику "замерзания" каждой отдельной структурной единицы.

В данной статье представлены результаты анализа спектров КРС смешанных кристаллов KADP:

параэлектрической фазе. Спектры КРС кристаллов в низкотемпературных фазах и их анализ будут опубликованы в дальнейшем.

Методика эксперимента

Измерения спектров КРС проводились на автоматизированном КРС-спектрометре, выполненном на базе двойного монохроматора ДФС-24. В качестве источника возбуждения применялся аргоновый лазер модели ЛГН-403, мощность излучения которого составляла порядка 150 мВт на длине волны 4880 Å. Использовалась 90° – геометрия рассеяния. Шаг сканирования – 2 см^{-1} . При регистрации использовалась схема счёта фотонов и автоматизированная система управления, сбора и обработки информации. Обработка спектроскопической информации проводилась по оригинальным программам. Детали приготовления и классификации образцов, а также особенности экспериментальной установки публиковались ранее [6,7]. Система координат относительно кристаллографиче-

ских осей имеет вид: $X||a$, $Y||b$, $Z||c$. В работе исследовались смешанные монокристаллы $K_{1-x}A_xDP$ с концентрацией аммония $x = 0.00; 0.02; 0.04; 0.08; 0.22; 0.32; 0.53; 0.74; 0.82; 1.00$.

Теоретико-групповой анализ фундаментальных колебаний

При проведении анализа фундаментальных колебаний кристаллической решётки в молекулярных кристаллах, обычно выделяются ионные комплексы, силы связи внутри которых значительно превосходят взаимодействия между этими комплексами и отдельными атомами. Таким образом, все колебания в молекулярных кристаллах можно разделить на "внешние" и "внутренние". Первые осуществляются отдельными атомами и ионными комплексами, движущимися без искажения своей формы как целое. Вторые соответствуют деформационным колебаниям изолированных ионных комплексов, рассматриваемых как отдельные молекулы.

	A_1	A_2	B_1	B_2	E
Акустические				1	1
Внешние			2	1	3
Внутренние PO_4	$\nu_1 + \nu_2$	$\nu_1 + \nu_2$	$\nu_2 + \nu_3 + \nu_4$	$\nu_2 + \nu_3 + \nu_4$	$2\nu_3 + 2\nu_4$
Внутренние NH_4	$\nu_1 + \nu_2$	$\nu_1 + \nu_2$	$\nu_2 + \nu_3 + \nu_4$	$\nu_2 + \nu_3 + \nu_4$	$2\nu_3 + 2\nu_4$
Либрация PO_4	1	1			2
Либрация NH_4	1	1			2
Валентные	1	2	1	2	3
Всего	7	8	9	10	19

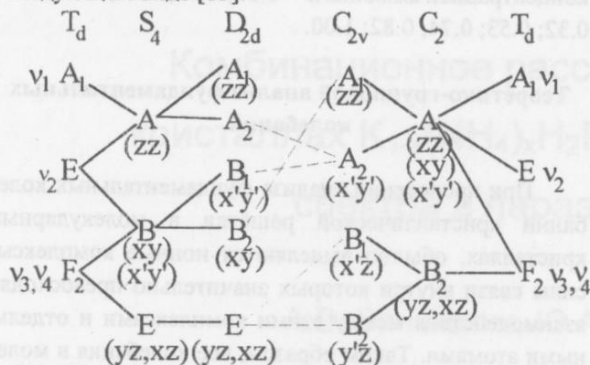
Таблица 1. Симметрия фундаментальных колебаний кристалла ADP в параэлектрической фазе

Основные особенности структуры чистых кристаллов KDP и ADP подробно описаны в работах [см. например 8-10]. В параэлектрической фазе все смешанные кристаллы KADP, также как чистые ингредиенты, имеют тетрагональную симметрию с пространственной группой D_{2d}^{12} и двумя формульными единицами в элементарной ячейке ($z = 2$) [5]. Теоретико-групповой анализ колебательного спектра кристалла KDP в параэлектрической и сегнетоэлектрической фазах проведен Шуром в работах [11,12]. В колебательном спектре чистого кристалла ADP добавляются лишь внутренние и либрационные колебания иона аммония. Для смешанных кристаллов KADP, также как и для кристалла ADP, имеется в общем случае 72 колебательные моды [5]. Эти моды соответствуют трём акустическим, девяти – "внешним" колебаниям групп H_2PO_4 относительно К (NH_4), восемнадцати

"внутренним" колебаниям групп PO_4 , так же восемнадцати "внутренним" колебаниям групп NH_4 , по шесть либрационных колебаниям групп PO_4 и NH_4 и двенадцати колебаниям "кислых" протонов. Для данной пространственной группы 18 оптических мод дважды вырождены (колебания Е симметрии) и, следовательно, всего возможна 51 оптическая колебательная мода.

Позиционная симметрия молекулы PO_4 для параэлектрической фазы определена как S_4 , однако недавний анализ температурной зависимости спектров КРС чистых кристаллов KDP, проведенный в работе [13] позволил авторам предположить, что позиционная симметрия молекулы PO_4 в параэлектрической фазе, такая же как и в сегнетофазе – C_2 . Позиционная симметрия молекулы NH_4 в параэлектрической фазе – C_2 и C_1 – в антисегнетоэлектрической фазе [14].

Корреляционная диаграмма для внутренних колебаний молекулы PO_4 может быть представлена в следующем виде [13]:



Внутренние колебания молекул PO_4 и NH_4 даны в обозначениях симметрии нормальных колебаний свободных молекул от которых они произошли [15].

В таблице 1 представлена классификация фундаментальных колебаний решётки кристалла ADP в параэлектрической фазе по типам колебаний для данной группы симметрии [5].

Согласно правилам отбора в спектрах комбинационного рассеяния для класса D_{2d} тетрагонально группы активны колебания A_1 , B_1 , B_2 и E симметрии колебания B_2 и E симметрии активны также в ИК спектрах [16], моды A_2 – "тихие", не активны ни КРС, ни ИК спектрах. Тензоры рассеяния для молекул различной симметрии имеют вид:

$$A_1 = \begin{pmatrix} a & & \\ & a & \\ & & b \end{pmatrix}; \quad B_1 = \begin{pmatrix} c & & \\ & -c & \\ & & \end{pmatrix};$$

$$B_2(z) = \begin{pmatrix} & d & \\ d & & \\ & & \end{pmatrix}; \quad E(y) = \begin{pmatrix} & e & \\ & & \\ e & & \end{pmatrix};$$

$$E(x) = \begin{pmatrix} & & \\ & e & \\ e & & \end{pmatrix}.$$

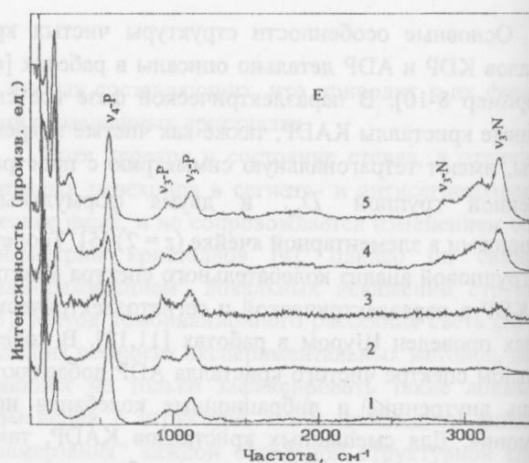
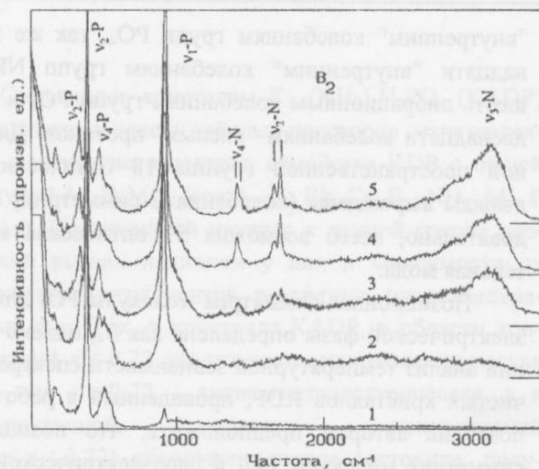
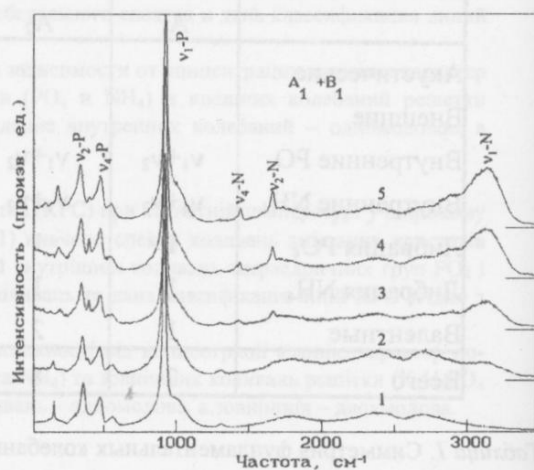
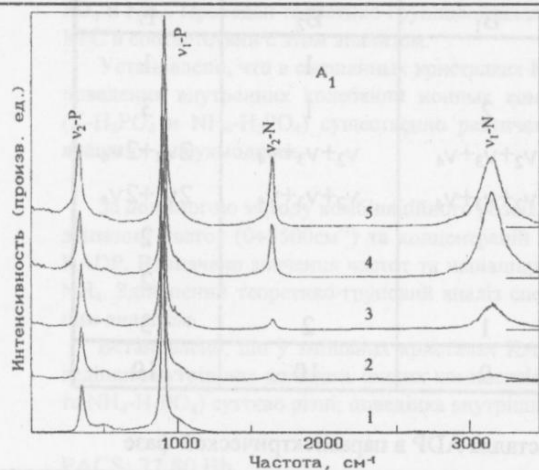


Рис. 1. Спектры КРС A_1 , A_1+B_1 , B_2 и E симметрии смешанных кристаллов $\text{K}_{1-x}\text{A}_x\text{DP}$ (1- $x = 0,00$; 2- $x = 0,08$; 3- $x = 0,32$; 4- $x = 0,74$; 5- $x = 1,00$) при комнатной температуре при нескольких концентрациях. Спектральное разрешение 2cm^{-1} .

Экспериментальные результаты и их обсуждение

На рис.1 представлены спектры КРС смешанных кристаллов $K_{1-x}A_xDP$ нескольких концентраций при комнатной температуре в различных геометриях рассеяния. Как видно из представленных рисунков, все линии колебательного спектра достаточно интенсивны и хорошо поляризованы, что может свидетельствовать о высоком качестве монокристаллов. Высокое качество монокристаллов подтверждает так же отсутствие резких аномалий в спектрах КРС при изменении концентраций аммония во всем диапазоне.

Весь спектр КРС смешанных кристаллов семейства KDP, который охватывает диапазон от 0 до 3500см^{-1} , можно условно разбить на несколько поддиапазонов. Линии в области частот до 250см^{-1} – это внешние колебания решетки, то есть колебания К и

(или) NH_4 относительно группы H_2PO_4 и либрационные колебания PO_4 . Диапазон частот $250 - 1250\text{см}^{-1}$ – область внутренних колебаний PO_4 и либрационных колебаний NH_4 . Внутренние колебания NH_4 и валентные колебания лежат в области частот $1250 - 3500\text{см}^{-1}$.

Количество и поляризация наблюдаемых в спектрах КРС линий находятся в хорошем соответствии с результатами теоргруппового анализа и данными других исследований [см., например, 5]. На рис.1 отмечены внутренние колебания ионов PO_4 и NH_4 с указанием их типов симметрии.

В таблицах 2 и 3 приведены, соответственно, значения частот внутренних колебаний ионов PO_4 и NH_4 при комнатной температуре (параэлектрическая фаза) смешанных кристаллов $K_{1-x}A_xDP$ для всех исследуемых концентраций.

х	$\nu_1(A_1)$		$\nu_2(A_1)$		$\nu_2(B_2)$		ν_3		ν_3		ν_4		ν_4	
	час.	пол.	час.	пол.	час.	пол.	час.	пол.	час.	пол.	час.	пол.	час.	пол.
1.00	923	25	336	38	398	16	~962	~120	~1118	~100	476	28	537	57
0.82	921	26	342	28	397	15	~960	~115	~1112	~110	475	28	533	57
0.74	921	26	343	30	396	13	~958	~120	~1114	~110	475	27	532	57
0.53	919	28	345	34	395	11	~958	~120	~1114	~115	474	32	533	59
0.32	917	25	349	26	393	10	~965	~115	~1112	~115	472	32	531	59
0.22	916	24	352	34	392	10	~960	~120	~1114	~115	475	26	532	58
0.08	916	24	354	29	391	8	~956	~120	~1118	~110	473	27	529	58
0.04	912	24	356	28	391	9	~952	~125	~1118	~110	471	28	529	57
0.02	914	24	355	34	391	9	~956	~125	~1112	~110	474	25	529	56
0.00	914	22	355	36	391	9	~964	~130	~1120	~105	475	25	527	54

Таблица. 2. Частоты внутренних колебаний тетраэдра PO_4 в смешанных кристаллах $K_{1-x}(NH_4)_xH_2PO_4$ для различных концентраций при комнатной температуре

х	$\nu_1(A_1)$		$\nu_2(A_1)$		$\nu_2(B_2)$		ν_3		ν_3		ν_4		ν_4	
	час.	пол.	час.	пол.	час.	пол.	час.	пол.	час.	пол.	час.	пол.	час.	пол.
1.00	3162	165	1658	29	1703	17	2864	169	3237	90	1408	24	1437	17
0.82	3165	177	1658	25	1702	17	2862	173	3239	93	1407	26	1433	18
0.74	3166	170	1660	28	1704	15	2865	172	3241	99	1413	22	1434	17
0.53	3168	179	1661	26	1707	16	2865	175	3241	99	1411	28	1434	20
0.32	3170	185	1662	24	1710	22					1411	25	1428	21
0.22	3170	183	1664	32										
0.08	3169	189												
0.04	3167	180												

Таблица 3. Частоты и полуширины внутренних колебаний ионов аммония в смешанных кристаллах $K_{1-x}A_xDP$ для различных концентраций при комнатной температуре.

Экспериментальные результаты показывают, что концентрационное поведение колебательных мод смешанного кристалла можно в первом приближении разбить на два основных класса. При одномодовом поведении в спектре присутствует одна полоса, частота которой непрерывно меняется с концентрацией от частоты одного чистого кристалла до частоты другого. При двухмодовом поведении во всём интервале концентраций наблюдаются две полосы, частоты которых близки к частотам колебаний предельных чистых кристаллов, а интенсивность каждой полосы примерно пропорциональна концентрации соответствующей компоненты кристалла [17].

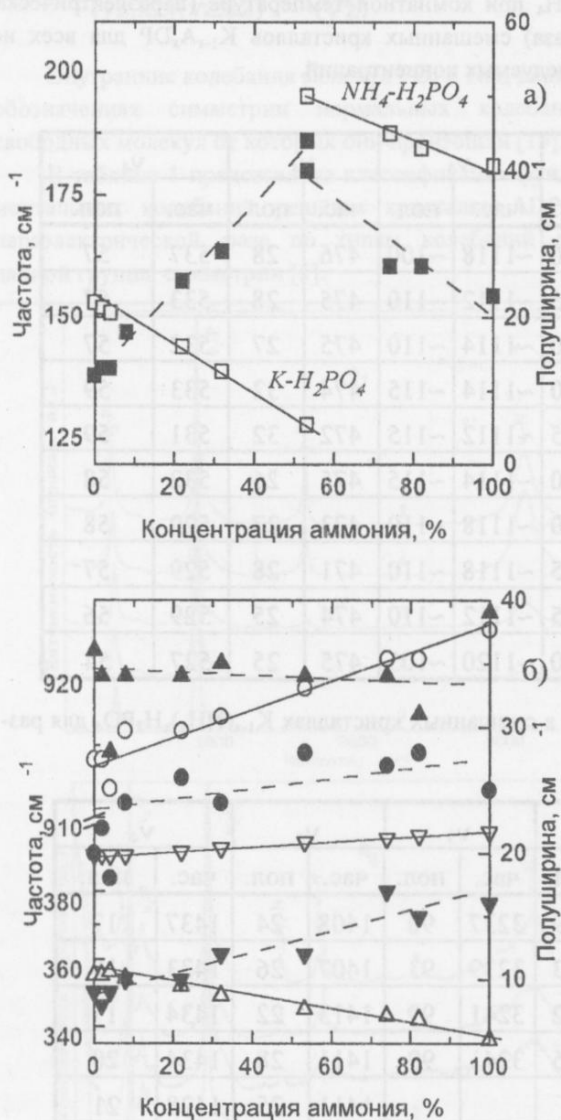


Рис. 2. Зависимость частот и полуширин внешних (а) и внутренних PO_4 (б) колебаний в смешанных кристаллах $K_{1-x}A_xDP$ от концентрации (открытые значки – частоты: $\square$ – внешние колебания решётки; $\circ$ – ν_1 , ∇ – $\nu_2(B_2)$, Δ – $\nu_2(A_1)$ – внутренние колебания PO_4 , закрытые значки – полуширины соответствующих колебаний).

В спектрах КРС смешанных кристаллов $KADP$ наблюдается существенное различие в поведении внешних и внутренних колебаний в зависимости от концентрации аммония. Интенсивность линий КРС внутренних колебаний ионов NH_4 понижается с уменьшением концентрации аммония в смешанных кристаллах. Их количество и поляризация остается неизменной во всем диапазоне концентраций. Как видно из данных, приведенных в таблице 3, значения частот имеют практически линейную зависимость от концентрации. Полуширины соответствующих линий остаются так же практически постоянными.

На рис.2а представлены зависимости частоты и полуширины (ширина линии на половине высоты) нескольких внутренних колебаний иона PO_4 при комнатной температуре в зависимости от содержания аммония. Как видно из представленных зависимостей, для внутренних колебаний PO_4 наблюдается линейная зависимость изменения частоты от концентрации аммония для всех внутренних мод. Частоты внутренних колебаний при изменении концентрации от чистого KDP до чистого ADP существенно изменяется, так для колебания ν_1 это изменение составляет величину $\sim 10 cm^{-1}$. Такая линейная зависимость частот внутренних колебаний может служить своеобразным тестом для определения содержания аммония в смешанных кристаллах. Полуширины же внутренних колебаний смешанных кристаллов остаются практически постоянными во всем диапазоне концентраций. Линейная зависимость частоты при практически постоянной полуширине свидетельствует об одномодовом характере поведения внутренних колебаний тетраэдра PO_4 в зависимости от концентрации аммония.

Поведение же внешних колебаний решетки в смешанных кристаллах $KADP$ в зависимости от концентрации аммония существенно отличается от описанного выше. На рис.2б представлены зависимости частоты и полуширины одного из внешних ($K-H_2PO_4$ и $NH_4-H_2PO_4$) при комнатной температуре в зависимости от содержания аммония. Если в чистых образцах KDP и ADP разность частот внешних колебаний решетки составляет величину порядка $15 cm^{-1}$, то в середине диапазона концентраций такая разность достигает величины порядка $70 cm^{-1}$. Также как и для внутренних колебаний, наблюдается линейная зависимость изменения частот внешних колебаний в зависимости от концентрации, однако направления смещения частот противоположны. При увеличении концентрации аммония в кристалле KDP частота колебания $K-H_2PO_4$ понижается, а частота колебания $(NH_4)-H_2PO_4$ с понижением концентрации аммония в кристалле ADP повышается. Полуширины внешних колебаний решетки, начиная от чистого KDP и ADP , растут линейно и при приближении к середине концентрационного диапазона наблюдается существен-

ное, примерно в 4 раза, увеличение полуширины обеих линий.

Таким образом, как следует из полученных результатов, для смешанных кристаллов KADP поведение "внешних" и "внутренних" колебаний в зависимости от концентрации аммония существенно различно: "внешние" решёточные колебания имеют двухмодовый характер поведения, а внутренние колебания PO_4 - одномодовый.

1. E. Courtens, *Ferroelectrics*, **72**, 229 (1987).
2. V.H. Schmidt, *Ferroelectrics*, **72**, 157 (1987).
3. U.T. Hochli, K. Knorr, A. Loide, *Advances in Physics*, **39**, 405 (1990).
4. E. Courtens, T.F. Rosenbaum, S.E. Magler, P.M. Harn, *Phys. Rev.*, **B 29**, 515 (1984).
5. E. Courtens, H. Vogt, *J.Chim.Phys.* (Paris), **82**, 317 (1985).
6. Ю.А. Попков, А.В. Ванькевич, Л.А. Шувалов, Р.М. Федосюк, *ФНТ*, **19**, 195 (1993).
7. А.В. Ванькевич, Ю.А. Попков, *Применение персональных компьютеров в научных исследованиях и учебном процессе*, Материалы конф. 18-20 января 1994, Харьков, 14 (1994).
8. М. Лайнци, А. Гласс, *Сегнетоэлектрики и родственные им материалы*, Мир, Москва (1981).
9. Г.А. Смоленский, В.А. Боков, В.А. Исупов и др., *Физика сегнетоэлектрических явлений*, Наука, Ленинград (1985).
10. Л.А. Шувалов, А.А. Урусовская, И.С. Желудев и др., *Современная кристаллография (в четырех томах)*, Том 4., Наука, Москва (1981).
11. М.С. Шур, *Кристаллография*, **11**, 449 (1966).
12. М.С. Шур, *Кристаллография*, **12**, 215 (1967).
13. M. Tokunaga, Y. Tominaga, I. Tatsuzaki, *Ferroelectrics*, **63**,

171 (1985).

14. M. Kasahara, M. Tokunaga, I. Tatsuzaki, *J. Phys. Soc. Japan*, **55**, 367 (1986).
15. М.В. Волькенштейн, М.А. Ельяшкевич, Б.И. Степанов, *Колебания молекул*, Т.2, Изд.теор.лит., Москва-Ленинград (1949).
16. А. Пуле, Ж.-П. Матье, *Колебательные спектры и симметрия кристаллов*, Мир, Москва (1973).
17. С.В. Карпов, А.А. Шульгин, *Колебания окисных решёток*, Наука, Москва (1980)

Raman scattering of light in mixed crystals $K_{1-x}(NH_4)_xH_2PO_4$: analysis of vibrational spectrum in paraelectric phase

Yu.A. Popkov, A.V. Van'kevich, I.A. Taranova

Vibrational spectrum of mixed crystals KADP in the wide region of frequencies ($0-3500\text{cm}^{-1}$) and concentration ($x=0-1$) at room temperature has been studied by Raman scattering of light. Frequencies and half-width values of lines of tetrahedrons PO_4 and NH_4 intrinsic vibrations were determined. The theory of groups analysis of vibrational spectrum was performed. In accordance to this analysis classification of lines is provided.

It has been established that the character of behavior of extrinsic lattice vibrations ($K-H_2PO_4$ and $NH_4-H_2PO_4$) and intrinsic vibrations of PO_4 and NH_4 groups in dependence on ammonium concentrations is substantially different: the intrinsic vibrations behavior is one-mode but the extrinsic one is two-mode.

Спектроскопічні властивості та електронна структура 6-тіопурину

Ю.В. Рубін

Фізико-технічний інститут низьких температур НАН України

Україна, 310164, м. Харків, просп. Леніна, 47

Проведено вивчення спектрів УФ поглинання та люмінесценції при 77 К нейтральної та іонних форм 6-тіопурину. Методом CNDO/S здійснений розрахунок енергій електронно-збуджених станів та елементів електронної структури 6-тіопурину. Побудовано діаграму електронно-збуджених станів 6-тіопурину.

Проведено изучение спектров УФ поглощения и люминесценции при 77 К нейтральной и ионных форм 6-тиопурина. Методом CNDO/S проведен расчёт энергий электронно-возбуждённых состояний и элементов электронной структуры 6-тиопурина. Построена диаграмма электронно-возбуждённых состояний 6-тиопурина.

PACS 31.50.+w ; 33.50.-j

6-Тіопурин є аналогом гіпоксантину (пурину) та має у своєму складі сірку замість кисню. Викликає інтерес вивчення впливу заміщення кисню атомом сірки на спектроскопічні властивості та електронну структуру органічних сполук. Хоча спектроскопічні властивості 6-тіопурину вивчалися раніше [1-3], проте причини аномально великого низькочастотного зсуву спектрів УФ поглинання та люмінесценції 6-тіопурину порівняно з незаміщеними пуринами, значного зростання сили осцилятора першої смуги поглинання, відсутність флуоресценції в спектрі люмінесценції залишалися повністю не з'ясованими. Раніше ми здійснили докладне вивчення спектроскопічних властивостей інших органічних молекул, що містять сірку – 4-тіоурацилу та 6-тіогуаніну [3,4].

Метою наших досліджень є вивчення спектроскопічних властивостей та електронної структури 6-тіопурину в основному та нижніх електронно-збуджених станах.

Методика експерименту

Ми здійснили вивчення 6-тіопурину з ацетильним замісником по N9 – 6SPR, який є фіксованим N9H-таутомером 6SP, а також вивчення цієї сполуки з додатковим метилюванням по сірці – 10Me6SPR, котрий є моделлю SH-таутомера. Препарати були синтезовані в Інституті Органічного синтезу Латвії.

Слід зазначити, що гіпоксантин з приєднанням цукру, рібози по N9 має назву інозин [5]. Отже, 6-тіопурин аналогом гіпоксантину, а експериментально досліджений нами 6-тіопурин з ацетильним замісником по N9 (6SPR) є аналогом інозину.

Ми провели дослідження спектра УФ поглинання 6SPR у воді при 300 К та спектрів люмінесценції в етанолі при 77К. Проведено також вивчення спектра УФ поглинання 10Me6SPR у воді при pH = 6. Спектри УФ поглинання 6SPR вимірювали при значеннях pH достатньо віддалених від рК 6-тіопурину, а саме при pH1, pH6, pH11 (згідно з даними [6] константи іонізації 6-тіопурину дорівнюють 2.5 та 7.7). Тому спектри можна вважати індивідуальними спектрами різних форм 6SPR: відповідно катіону, нейтральної форми та аніону. pH досліджуваних розчинів змінювали за допомогою 1N розчинів NaOH та HCl. Спектри УФ поглинання реєстрували на спектрофотометрі Specord UV-VIS, а спектри люмінесценції при 77 К на установці, описаній раніше [7].

За допомогою напівемпіричного методу CNDO/S по програмам, описаним в [8], був проведений розрахунок енергій електронно-збуджених станів нейтральної та іонних форм 6SP, а також елементів електронної структури (зарядів на атомах, порядку зв'язків) в основному та нижніх збуджених станах. Розрахунок енергій електронно-збуджених станів катіона 6SPR був виконаний у припущенні, що приєднання протонів

відбувається по N7, як це має місце у 6-тіогуаніні та гіпоксантині [3,7]. Відрив протона у аніона 6SPR відбувається по N1 – це єдиний лабільний протон у 6SPR.

Дані про спектроскопічні властивості та електронну структуру гіпоксантину та інозину узяті з роботи [5].

Результати та обговорення

На рис. 1 показані індивідуальні спектри УФ поглинання нейтральної, катіонної та аніонної форм 6SPR, а також спектр нейтральної форми інозину та 10Me6SPR. Як бачимо на рисунку, спектр УФ поглинання нейтральної форми 6SPR зміщений у низькочастотну область відносно нейтральної форми інозину на $9 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1}$ [5]. Спектр поглинання нейтральної форми 6SPR має інтенсивну смугу з максимумом в області $30.9 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1}$, півширина смуги $W = 3000 \text{ cm}^{-1}$, асиметрія $P = 1.6$. Коефіцієнт молярної екстинкції (ϵ) у 6SPR значно вищий, ніж у інозину. Спектр УФ поглинання нейтральної форми 10Me6SPR зміщений у низькочастотну область відносно нейтральної форми інозину, але цей зсув для 10Me6SPR менший, ніж для

6SPR. Коефіцієнт молярної екстинкції у 10Me6SPR більший, ніж у інозину, але менший, ніж у 6SPR.

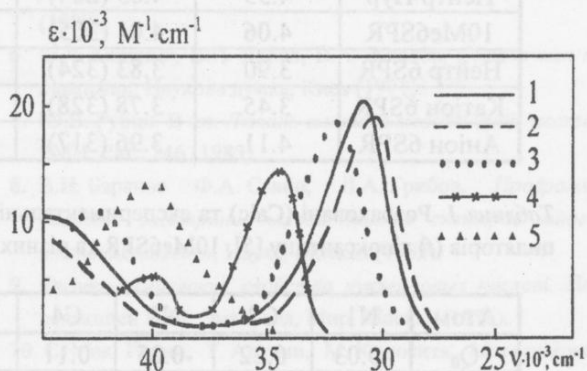


Рис. 1. Спектри УФ поглинання 6SPR, 10Me6SPR та інозину [5]: 1 – спектр нейтральної форми 6SPR, 2 – спектр катіона 6SPR, 3 – спектр аніона 6SPR, 4 – спектр 10Me6SPR, 5 – спектр інозину. По осі ординат відкладені значення коефіцієнту молярної екстинкції досліджених речовин (ϵ)(розмірність – $\text{Моль}^{-1} \text{ cm}^{-1}$).

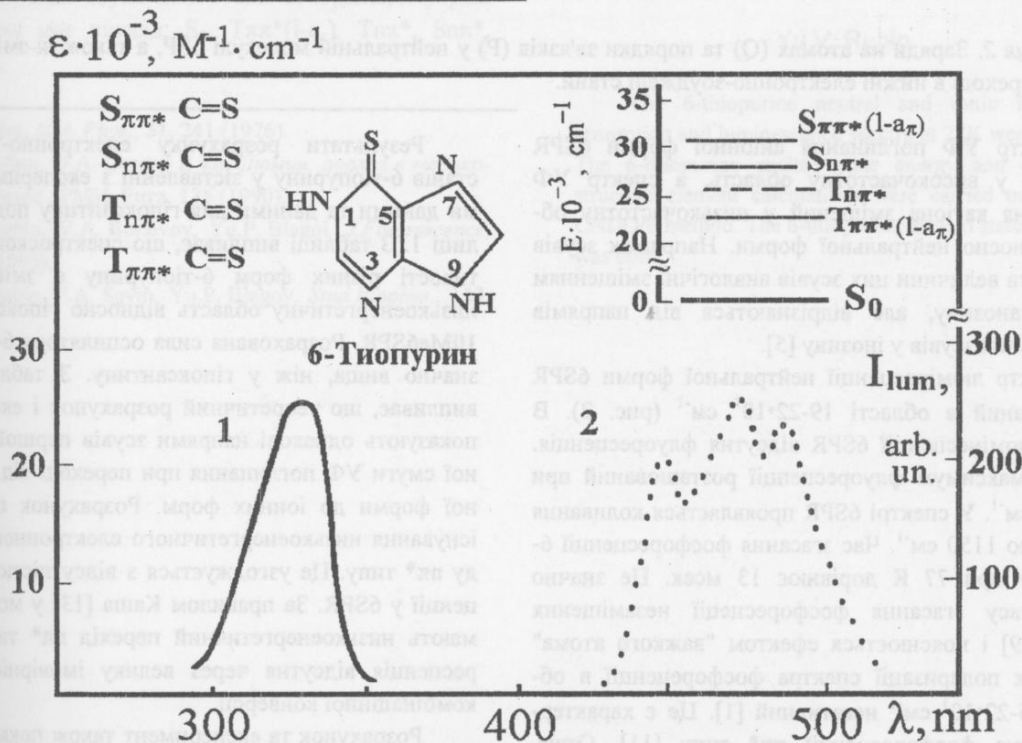


Рис. 2. Спектр УФ поглинання у воді (1) та спектр люмінесценції в етанолі при 77 К (2) нейтральної форми 6SPR, локалізація збудження в нижніх електронно-збуджених станах (ліворуч угорі), діаграма електронно-збуджених станів 6SP (праворуч угорі). По осі ординат ліворуч відкладені значення коефіцієнту молярної екстинкції ϵ (розмірність – $\text{Моль}^{-1} \text{ cm}^{-1}$), праворуч – значення інтенсивності люмінесценції (I_{lum}) у відносних одиницях.

Форма	E(Спл*)		f	E пл*	E(Тпл*)	
	Calc. (ев)	Exp. (ев,нм)			Calc. (ев)	Exp. (ев,нм)
Нейтр Нур	4.53	4.63 (264)	0.29	4.46	—	—
10Me6SPR	4.06	4.01 (305)	0.23	4.97	3.49	—
Нейтр 6SPR	3.90	3.83 (324)	0.47	3.13	2.91	2.75 (452)
Катіон 6SPR	3.45	3.78 (328)	0.45	2.36	2.26	—
Аніон 6SPR	4.11	3.96 (317)	0.41	3.83	3.32	—

Таблиця 1. Розраховані (Calc) та експериментальні (Exp) енергії електронно-збуджених станів (E) і сили осциляторів (f) гіпоксантину [5], 10Me6SPR та різних іонних форм 6SPR.

Атом	N1	C2	N3	C4	C5	C6	N7	C8	N9	S10
Q ₀	-0.03	0.22	-0.25	0.11	-0.03	0.27	-0.20	0.13	-0.03	-0.46
$\Delta Q_{\text{Спл}^*}$	0.04	0	-0.02	0.07	-0.09	0.46	0.04	-0.01	0	-0.49
$\Delta Q_{\text{Тпл}^*}$	0.04	-0.01	-0.01	0.08	-0.08	0.46	0.03	-0.03	0.01	-0.50
$\Delta Q_{\text{пл}^*}$	0.06	0	0.03	0.08	-0.03	0.54	0.02	0.02	0	-0.72

Зв'язки	1-2	1-6	2-3	3-4	4-5	4-9	5-6	5-7	6-10	7-8	8-9
P ₀	0.49	0.48	0.80	0.41	0.65	0.49	0.44	0.47	0.67	0.79	0.49
$\Delta P_{\text{Спл}^*}$	0	-0.18	-0	-0.01	-0.08	-0.02	0.06	-0.01	-0.41	-0.03	0
$\Delta P_{\text{Тпл}^*}$	0.01	-0.18	-0.01	-0.02	-0.08	-0.03	0.05	-0	-0.43	-0.03	0.01
$\Delta P_{\text{пл}^*}$	-0.01	-0.23	0.01	-0.05	0.02	-0.02	-0.04	0.01	-0.32	-0.02	0.01

Таблиця 2. Заряди на атомах (Q) та порядки зв'язків (P) у нейтральній молекулі 6SP, а також їх змінювання при переході в нижні електронно-збуджені стани.

Спектр УФ поглинання аніонної форми 6SPR зміщений у височастотну область, а спектр УФ поглинання катіона зміщений у низькочастотну область відносно нейтральної форми. Напрямок зсувів спектрів та величини цих зсувів аналогічні зміщенням у 6-тіогуанозину, але відрізняються від напрямів спектральних зсувів у інозину [5].

Спектр люмінесценції нейтральної форми 6SPR розташований в області $19\text{--}22 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ (рис. 2). В спектрі люмінесценції 6SPR відсутня флуоресценція. Перший максимум флуоресценції розташований при $22.2 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$. У спектрі 6SPR проявляється коливання з частотою 1150 см^{-1} . Час згасання фосфоресценції 6-тіопурину при 77 К дорівнює 13 мсек. Це значно менше часу згасання фосфоресценції незаміщених пуринів [9] і пояснюється ефектом "важкого атома" [10]. Знак поляризації спектра фосфоресценції в області $20.5\text{--}22 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ негативний [1]. Це є характерною рисою фосфоресценції пл* типу [11]. Отже, спектри УФ поглинання та люмінесценції 6SPR та 10Me6SPR зсунуті у довгохвильовий (низькочастотний) бік відносно спектрів інозину. Це зумовлено заміною кисню у молекулі інозину сіркою, яка, зокрема, має нижчий від кисню потенціал іонізації [12]. В той же час слід зазначити, що величини зсувів спектрів 6SPR та 10Me6SPR відмінні одна від одної.

Результати розрахунку електронно-збуджених станів 6-тіопурину у зіставленні з експериментальними даними та даними для гіпоксантину подані в таблиці 1. З таблиці випливає, що спектроскопічні властивості різних форм 6-тіопурину є зміщеними в низькоенергетичну область відносно гіпоксантину та 10Me6SPR. Розрахована сила осцилятора 6-тіопурину значно вища, ніж у гіпоксантину. З таблиці також випливає, що теоретичний розрахунок і експеримент показують однакові напрями зсувів першої інтенсивної смуги УФ поглинання при переході від нейтральної форми до іонних форм. Розрахунок передбачає існування низькоенергетичного електронного переходу пл* типу. Це узгоджується з відсутністю флуоресценції у 6SPR. За правилом Каша [13] у молекул, що мають низькоенергетичний перехід пл* типу, флуоресценція відсутня через велику імовірність інтеркомбінаційної конверсії.

Розрахунок та експеримент також показують, що спектральні характеристики 10Me6SP зміщуються в височастотну область відносно спектральних характеристик 6SP. Отже, в полярних розчинниках 6SP існує у вигляді тіонної форми, і тіон-тіольну таутомерну рівновагу 6SPR зміщено в бік тіонної форми.

Аналіз елементів електронної структури у збуджених станах показує (табл. 2, рис. 2), що збудження

нижньому синглетному та триплетних $\pi\pi^*$ станах і стані $\pi\pi^*$ типу локалізовано на фрагменті $C=S$. Отже, локалізація збудження на фрагменті $C=S$ (а не на фрагменті $C2=N3$, як у гіпоксантину [5]), великий низькочастотний зсув спектрів поглинання та фосфоресценції у порівнянні з гіпоксантином (у 6SP та гіпоксантину однакові за розміром π -системи), значне зростання сили осцилятора першої інтенсивної смуги УФ поглинання 6SPR – усе це дозволяє зробити висновки, що перша інтенсивна смуга УФ поглинання і смуга фосфоресценції 6SP зумовлені існуванням у 6SP електронних переходів внутрішньомолекулярного переносу заряду – електронних переходів $I-a_\pi$ типу згідно з класифікацією М. Каша [13]. У цілому діаграма збуджених станів для нейтральної форми 6SP, імовірно, має вигляд, зображений на рис. 2.

Таким чином, проведені дослідження показали, що відмінності спектроскопічних властивостей 6-тіопурину у порівнянні з гіпоксантином, який містить кисень, зумовлені зменшенням потенціалу іонізації сірки відносно кисню, існуванням електронного переходу внутрішньомолекулярного переносу заряду, наявністю низькоенергетичного електронного переходу $\pi\pi^*$ типу та ефектом "важкого атома". Послідовність електронно-збуджених станів нейтральної форми 6-тіопурину має вигляд: S_0 , $T\pi\pi^*(I-a_\pi)$, $T\pi\pi^*$, $S\pi\pi^*$, $S\pi\pi^*(I-a_\pi)$.

205 (1988).

5. Ю.В. Морозов, Н.П. Бажулина, *Электронное строение и реакционная способность молекул*, Наука, Москва (1989).
6. Ф.Л. Калинин, В.П. Лобов, В.А. Жидков, *Справочник по биохимии*, Наукова думка, Киев (1971).
7. Ю.В. Рубин. В кн. *Люмин. анализ в медико-биол. исслед.*, РМИ, Рига 246 (1983).
8. В.И. Баранов, Ф.А. Савин, Л.А. Грибов, *Программа расчёта электронно-колебательных спектров многоатомных молекул*, Наука, Москва (1983).
9. *Физико-химические свойства нуклеиновых кислот*, Под редакцией Н.М. Эмануэля, Мир, Москва (1976).
10. С. Мак Глинн, Т. Адзуми, М. Киносита, *Молекулярная спектроскопия триплетного состояния*, Мир, Москва (1973).
11. Р.Н. Нурмухаметов, *Поглощение и люминесценция ароматических соединений*, Химия, Москва (1971).
12. Э.В. Шпольский, *Атомная физика*, Наука, Москва (1974).
13. М. Kasha, *Disc. Faraday Soc.*, 9, 14 (1950).

Spectroscopic properties and electronic structure of 6-thiopurine

Yu.V. Rubin

The 6-thiopurine neutral and ionic form UV absorption and luminescence spectra at 77K were studied. The 6-thiopurine excited state energy and electronic structure element calculations were carried out by the CNDO/S method. The 6-thiopurine excited states diagram was built.

1. J. Lancelot, *Mol. Phys.*, 31, 241 (1976).
2. Ю.В. Рубин, Ф.А. Савин, В кн. *Люмин. анализ в медико-биол. исслед.*, РМИ, Рига, 135 (1990).
3. Yu.V. Rubin, V.A. Bokovoy, Yu.P. Blagoi, *J.Fluorescence*, 5, 263 (1995).
4. Yu.V. Rubin, F.A. Savin, Yu.P. Blagoy, *Stud.Biophys.*, 123,

Фундаментальные оптические потери в прозрачных полимерных матрицах

В.Г. Сенчишин

Харьковский государственный университет,

Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы 4

Рассмотрены основные закономерности оптических потерь и современное представление о возможных механизмах светоослабления в прозрачных полимерных стёклах. Для полимеров с ароматическими группами (полистирол) и на примере модельных соединений (бензол, толуол) оценен вклад в суммарное затухание излучения в светопрозрачной среде таких источников оптических потерь, как длинноволновый хвост собственного электронного поглощения, двухквантовое электронное, синглет-триплетное поглощение, а также поглощение обертонов колебаний СН-связей.

Розглянуто основні закономірності оптичних втрат і сучасне уявлення про можливі механізми світлопоглинання у прозорих полімерних склах. Для полімерів з ароматичними групами (полістирол) і на прикладі модельних сполук (бензол, толуол) оцінено вклад в сумарне загасання випромінювання у світлопрозорому середовищі таких джерел оптичних втрат, як довгохвильовий хвіст власного електронного поглинання, двохквантове електронне, синглет-триплетне поглинання, а також поглинання обертонів коливань СН-зв'язків.

PACS: 29.40. Wk, 29.40. Vj

Развитие новых областей современной техники и в особенности волоконной и лазерной оптики, сцинтилляционной техники и техники изготовления люминесцентных солнечных концентраторов, где требуются полимерные материалы с очень высокой степенью прозрачности, вызвало интенсификацию исследований в области оптически прозрачных полимеров (ОПП), таких как полистирол, полиметилметакрилат, поливинилтолуол, поливинилсилол и др. [1-10].

Особое внимание при исследовании свойств ОПП уделяется фундаментальным оптическим потерям, являющимися неустраняемыми и определяющими теоретический предел прозрачности среды. Целью настоящей работы является рассмотрение факторов, вносящих вклад в оптическое поглощение прозрачными полимерами, и определения в этих полимерах "окоп" прозрачности.

Как известно, одной из важных причин светопоглощения ОПП является длинноволновой "хвост" собственного электронного поглощения материала, связанного с разрешёнными синглет-синглетными переходами. В работе [9] авторами представлены

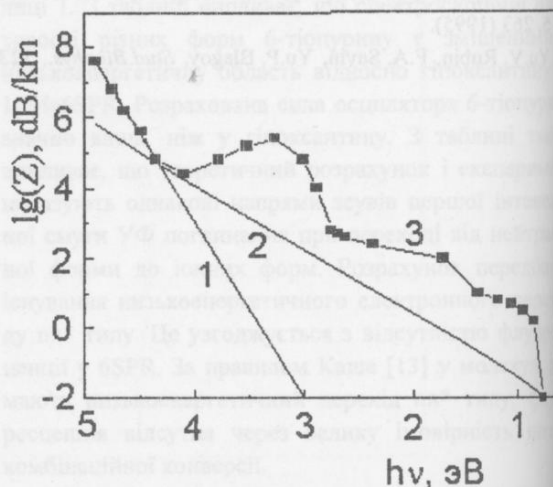


Рис. 1. Кривая зависимости светоослабления в полимерах от энергии фотонов (3) и теоретические экспоненты (1,2) к ней.

полученные экспериментально зависимости электронного поглощения от энергии фотонов для прозрачных полимеров (полистирол, полиметилметакрилат, поливинилтолуол, поливинилсилол) и показаны теоретические

ческие экспоненты к ним (рис.1). Прецизионные измерения края полосы УФ-поглощения трудны из-за вуалирующего действия примесного поглощения, а также из-за появления в этой области спектра слабой полосы поглощения $T_1 \leftarrow S_0$, относящейся к процессу, обратному фосфоресценции. Зависимость коэффициента поглощения длинноволновой хвостовой части полосы $S_1 \leftarrow S_0$ от энергии фотонов в общем виде может быть представлена следующим образом [9]:

$$K(h\nu, T) = k_0 e^{-\sigma(h\nu_0 - h\nu)/kT}, \quad (1)$$

где K – коэффициент поглощения; k_0 и $h\nu_0$ – постоянные; соотношение σ/kT описывает наклон спектрального края поглощения.

Для выделения из длинноволнового хвоста общего поглощения слабой полосы $T_1 \leftarrow S_0$, необходимо разложить полную интенсивность поглощения на обе компоненты. Такое разделение обычно проводят путём экстраполяции логарифмического коэффициента поглощения полосы $S_1 \leftarrow S_0$ от высоких к низким энергиям, в предположении, что в области высоких частот влияние поглощения $T_1 \leftarrow S_0$ не существенно [14]. Более крутая часть рассматриваемой зависимости (кривая 1 на рис.1) – длинноволновой хвост спектра поглощения органических соединений в УФ-области. Экстраполяция этой кривой даёт пренебрежимо малый вклад в затухание фотонов с энергией менее 3,5 эВ, т.е. при длинах волн, превышающих 0,35 мкм. Принципиально важным результатом, следующим из экстраполяции второй экспоненты (кривая 2 на рис. 1), является то, что длинноволновой хвост собственного электронного поглощения хотя и простирается в видимую область спектра, однако при длинах волн больших 0,62 мкм (энергия фотонов менее 2 эВ) даёт вклад менее 1 дБ/км, а при длинах волн 0,8 мкм (энергия фотонов $h\nu = 1,55$ эВ) – менее 0,1 дБ/км.

Более сложным, на наш взгляд, является вопрос о природе длинноволновой полосы поглощения прозрачных ароматических полимеров. Так например, у полистирола спектр поглощения в этой области имеет максимумы 37155, 37680, 38100, 38650 см^{-1} и, так как полистирол состоит из большого числа соединённых углеродными связями фенильных колец, естественно было бы предположить, что между фенильными кольцами существует общая цепь сопряжения. В таком случае длинноволновую полосу поглощения в полистироле следовало бы отнести за счёт экситонного поглощения, предложенного для аморфного кристалла [11-12]. Но, как показывают сравнения спектров поглощения полистирола с его низкомолекулярным аналогом – этилбензолом, который имеет максимумы при 37250, 37765, 38195, и 38650 см^{-1} , значительных отличий в их положениях не наблюдается. Это скорее всего может свидетельствовать об отсутствии общей цепи сопряжения в макромолекулах полистирола. В

пользу последнего соображения мы можем привести и тот экспериментальный факт, что с понижением температуры число, положение и ширина этих полос поглощения не меняется [3].

Данные, полученные в этих экспериментах, свидетельствуют о том, что длинноволновая полоса поглощения полистирола соответствует молекулярному синглет-синглетному поглощению π - π^* -типа. К выше-сказанному следует добавить, что при изучении поглощения полистирола в длинноволновой области спектра необходимо учитывать ещё и то обстоятельство, что его мономер имеет максимум поглощения при 34218 см^{-1} , а в области края поглощения полистирола мономер-стирол имеет непрерывное поглощение, поэтому как было показано нами ранее [13], даже незначительная примесь незаполимеризовавшегося мономера может сильно влиять на границу поглощения полистирола.

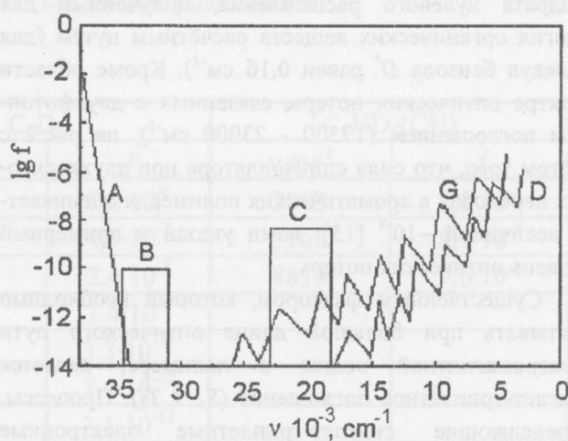


Рис. 2. Фундаментальные оптические потери в углеводородных матрицах (содержащих ароматические ядра): А – электронное поглощение, В – синглет-триплетное поглощение, С – область двухквантовых поглощений, G – поглощение обертонов $n = 1,2,3, \dots$ валентных колебаний C-H-связи, D – поглощение обертонов $n = 1,2,3, \dots$ валентных колебаний C-D-связи

Другими важными механизмами оптических потерь в полимерах являются: двухквантовое электронное поглощение, поглощение высокочастотных колебаний C-H-связей и синглет-триплетное поглощение. Эффект одновременного поглощения двух квантов падающей электромагнитной волны и связанные с ним оптические потери в прозрачных полимерах наблюдаются всегда, когда в макромолекулах полимера имеется промежуточное состояние с энергией, близкой энергии средней точки между двумя энергетическими уровнями. Рассматриваемый нами тип переходов между двумя несоседними триплетными подуровнями триплетных состояний в оптически

прозрачных полимерах представляет собой общее явление в абсорбционной спектроскопии органических соединений и наиболее легко может быть обнаружен в спектрах ЭПР [17].

В настоящей работе спектральная область оптических потерь в ароматических соединениях (рис.2), обусловленных двухквантовым электронным поглощением, определена методом ЭПР. Измерения проведены в соответствии с тем, что для триплетного состояния T_1 переходы между двумя подуровнями проявляются при магнитных полях, удовлетворяющих условию [14]:

$$(g\beta H)^2 = (h\nu)^2 - \frac{(D^2 + 3E^2)^2}{3}, \quad (2)$$

где g – спектрометрический фактор, β – магнетон Бора, H – напряжённость магнитного поля и $(D^2 + 3E^2)^{1/2} = D^*$ – квадратный корень из среднего квадрата нулевого расщепления, полученный для многих органических веществ расчётным путём (для молекул бензола D^* равен $0,16 \text{ см}^{-1}$). Кроме области спектра оптических потерь, связанных с двухфотонным поглощением ($17500 - 23000 \text{ см}^{-1}$), на рис.2 с учётом того, что сила сцинтиллятора при двухквантовых переходах в ароматических полимерах оценивается величиной $\sim 10^{-8}$ [15], нами указан и примерный уровень оптических потерь.

Существенным фактором, который необходимо учитывать при большой длине оптического пути электромагнитной волны в полимере, является синглет-триплетное поглощение ($S_0 \rightarrow T_1$). Процессы, определяющие синглет-триплетные электронные переходы, являются запрещёнными. Они весьма чувствительны к малым возмущающим эффектам, которые в полимерах могут быть вызваны присутствием кислорода, ионов металла и т.п. Теоретический расчёт сил осцилляторов с учетом таких эффектов сложен, и поэтому экспериментальные данные трудно сопоставимы с теорией [14-16]. Вероятность перехода между состояниями различной мультиплетности может быть отличной от нуля только при наличии спин-орбитального взаимодействия. Синглет-триплетные переходы разрешаются вследствие спин-орбитального взаимодействия $T_{\pi\pi^*}$ -состояния с $S_{\pi\pi^*}$, $S_{\sigma\pi^*}$, $S_{\pi\sigma^*}$ -состояниями и S_0 -состояния с $T_{\pi\pi^*}$, $T_{\sigma\pi^*}$, $T_{\pi\sigma^*}$ -состояниями хромофорных систем [14].

При взаимодействии $S_{\pi\pi^*}$ и $T_{\pi\pi^*}$ -состояний плоских хромофорных центров матричный элемент спин-орбитального взаимодействия выражается через трёх-центровый интеграл, содержащий только $2p_z$ -атомные функции (одно- и двухцентровые интегралы равны нулю). Вследствие малого перекрытия $2p_z$ -функций различных атомов и быстрого убывания энергии взаимодействия с увеличением межатомного расстояния (r^{-3}) величина этого элемента мала ($\sim 0,3 \text{ см}^{-1}$) [15].

Для макромолекул типа полистирола, обладающих хромофорными группами с элементами симметрии матричные элементы оператора спин-орбитального взаимодействия подчиняются правилам отбора и силу этого как и для многих ароматических углеводородов нижнее $T_{\pi\pi^*}$ -состояние не связано спин-орбитальной связью с основным электронным состоянием. Величина спин-орбитальной связи состояний $T_{\pi\pi^*}$ с состояниями $S_{\sigma\pi^*}$, $S_{\pi\sigma^*}$ относительно велика, силы осцилляторов перехода $S_0 \rightarrow S_{\sigma\pi^*}$, $S_0 \rightarrow S_{\pi\sigma^*}$ наоборот, незначительны. Аналогично этому значения сил осцилляторов перехода $S_0 \rightarrow S_{\pi\pi^*}$ велики, а значения матричного элемента спин-орбитальной связи $T_{\pi\pi^*}$ и $S_{\pi\pi^*}$ -состояний малы. Значение f -числа для синглет-триплетных переходов изолированных молекул заключено в интервале $10^{-10} - 10^{-5}$ [13]. Для молекул бензола расчёт сил осцилляторов $S_0 \rightarrow T_1$ перехода даёт величину $8,5 \cdot 10^{-11}$. Введение заместителей в молекулу бензола приводит к увеличению сил осциллятора синглет-триплетного перехода.

Поглощение, связанное с высокочастотными колебаниями С-Н-связей бензольного кольца, наибольшее значение имеет для полимеров с ароматическими ядрами. Положение максимумов полос абсорбции этой природы для полистирола рассматривалось в работах [4,5], но надёжной интерпретации спектров в них не дано из-за слабой интенсивности обертонов наложения вибронных полос составных частот. Наблюдаемая в ИК-области абсорбция определяется переходами между колебательными уровнями различных связей (С-Н-, С=О и т.д.), в зависимости от входящих в состав полимерной матрицы атомов и атомных групп. В большинстве случаев эти колебания необходимо рассматривать как ангармонические осцилляторы, уровни энергии для которых определяются известным выражением [18]:

$$E_n = h(\nu_0(n + 1/2) - \nu_0\chi(n + 1/2)^2), \quad (3)$$

где n – порядок обертона, $\nu_0 = \frac{1}{2} \pi c \sqrt{\frac{k_p}{\mu}}$ (здесь k_p –

силовая постоянная, μ – приведенная масса, c – скорость света, χ – константа ангармоничности). Тогда положение колебаний с частотой ν_n можно вычислить из соотношения:

$$\nu_n = \frac{E_n - E_0}{h} = \nu_0 n - \chi \nu_0 n(n + 1). \quad (4)$$

Вводя частоту основного колебания ангармонического осциллятора (ν_a), и заменив в уравнении (4) ν_0 на ν_a , определим положение соответствующего обертона

$$\nu_n = \nu_a \frac{n - \chi(n + 1)}{1 - \chi/2}. \quad (5)$$

Сила осциллятора обертона, с учётом нормированности и полноты набора колебательных волновых функций, может быть представлена уравнением [15]:

$$f = \frac{4\pi\nu}{3} \sum_q |d_{nn}^q|^2 (4\pi\mu_q \nu_q)^{-1}, \quad (6)$$

где μ_q и ν_q – приведенная масса и частота осциллятора q ; ν – частота, соответствующая максимуму электронной колебательной частоты; d_{nn}^q – матричный элемент для переходов $\pi \rightarrow \pi^*$, равный $\sqrt{2} \langle \pi | \vec{r} | \pi^* \rangle$;

($\vec{r} = \sum_i \vec{r}_i$ – сумма радиус-векторов, характеризующих положение электронов молекул). При расчётах сил осцилляторов были использованы значения матричных элементов для $\pi \rightarrow \pi^*$ переходов в молекулах бензола [15] и константы ангармоничности колебаний С-Н, С-D и С-F - связей [4]. Нами был проведен анализ поглощения обертонов колебаний С-Н-связей в модельных соединениях – бензоле и толуоле, а также рассмотрено влияние дейтерозамещения на область и

интенсивность полос поглощения (табл. 1). Как видно из данных, приведенных в табл.1, частичное замещение водорода дейтерием и фтором в бензольном кольце приводит к изменению силы осциллятора. Так, в ряду соединений C_6H_6 , C_6HD_5 , C_6HF_5 сила осцилляторов 3СН-обертона равны $40 \cdot 10^{-9}$, $9,6 \cdot 10^{-9}$, $6,3 \cdot 10^{-9}$, соответственно. Полная замена С-Н на С-D приводит к заметному изменению области поглощения. Исключение составляет область $8700 - 8800 \text{ см}^{-1}$, где частоты 3СН и 4СD практически совпадают, различие наблюдается лишь в величине силы осциллятора. Частоты колебаний 6СН и 8СD по величине близки, но силы осцилляторов этих колебаний отличаются уже на два порядка. Фторирование бензола приводит к увеличению прозрачности в области первого обертона (3100 см^{-1}) в 29 раз, тогда как дейтерирование – всего лишь в 7 раз. С увеличением квантового числа обертона соотношение значений сил осцилляторов СН- и СD-колебаний уменьшается.

n^*	C_6H_6		C_6D_6		$C_6HD_5(CH)$	
	$\nu, \text{см}^{-1}$	f	$\nu, \text{см}^{-1}$	f	$\nu, \text{см}^{-1}$	f
1	3074	$1,9 \cdot 10^{-5}$	2290	$7,2 \cdot 10^{-6}$	3063	$2,6 \cdot 10^{-6}$
2	5972	$6,6 \cdot 10^{-7}$	4497	$4,9 \cdot 10^{-7}$	5968	$8,1 \cdot 10^{-8}$
3	8786	$4,0 \cdot 10^{-8}$	6644	$2,4 \cdot 10^{-8}$	8810	$9,6 \cdot 10^{-9}$
4	11498	$3,3 \cdot 10^{-9}$	8734	$1,4 \cdot 10^{-9}$		
5	14072	$4,1 \cdot 10^{-10}$	10763	$3,3 \cdot 10^{-11}$		
6	16550	$6,7 \cdot 10^{-11}$	12746	$7,4 \cdot 10^{-12}$		
7	17904	$1,4 \cdot 10^{-11}$	14672	$2,1 \cdot 10^{-12}$		
8	21146	$3,5 \cdot 10^{-12}$	16525	$6,0 \cdot 10^{-13}$		
9	23276	$5,0 \cdot 10^{-13}$				
n^*	$C_6HD_5(CD)$		C_6HF_5			
	$\nu, \text{см}^{-1}$	f	$\nu, \text{см}^{-1}$	f		
1	2285	$6,5 \cdot 10^{-6}$	3104	$6,5 \cdot 10^{-7}$		
2	4491	$4,4 \cdot 10^{-7}$	6087	$1,5 \cdot 10^{-7}$		
3	6640	$2,2 \cdot 10^{-8}$	8965	$6,3 \cdot 10^{-9}$		
4	8736	$5,3 \cdot 10^{-9}$				

Таблица 1. Силы осцилляторов и частоты обертонов валентных СН-колебаний в бензоле и его производных.

* n – порядок обертона

Из сказанного следует, что эффективность дейтерирования, как и любого другого замещения водорода на более тяжёлый атом с целью уменьшения оптических потерь в области СН-колебаний, необходимо рассматривать для каждого обертона в отдельности. Например, в области $8700-8800 \text{ см}^{-1}$ неполное дейтерирование практически не меняет силы осциллятора.

Для толуола частота 5СН-орто-положения имеет значение $\nu = 13965 \text{ см}^{-1}$ и сила осциллятора $f = 1,5 \cdot 10^{-10}$, а для мета- и пара-положений

$\nu = 14061 \text{ см}^{-1}$, $f = 3,1 \cdot 10^{-10}$. Абсорбция в области колебаний 5СН-связи алкильных групп имеет следующие параметры: $\nu = 13413 \text{ см}^{-1}$ и $f = 1,4 \cdot 10^{-10}$. По величине силы осциллятора поглощение, обусловленное обертонами валентных колебаний 5СН-связи алкильных заместителей, в 2-3 раза меньше, чем для 5СН-колебаний бензольного кольца. Таким образом, изменение симметрии молекулы бензола путём частичной замены атомов водорода приводит к незначительным изменениям сил осцилляторов переходов, но

заметно варьирует область поглощения обертонов. Введением заместителей с тяжёлыми атомами можно уменьшить оптические потери в области абсорбции обертонов в 4-5 раз. Полное замещение ещё более усиливает эффект, хотя в последнем случае значительно увеличиваются потери за счёт батохромного смещения длинноволнового края полосы электронного поглощения.

На рис.2 представлены оценки фундаментальных оптических потерь в полимерных матрицах, содержащих бензольное кольцо, без учёта релеевских потерь. Как видно из рис. 2, область максимальной прозрачности полимеров лежит в диапазоне $24\text{--}30 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$. Близкие оптические характеристики имеют и большинство других прозрачных полимеров.

В заключение можно отметить, что, в отличие от неорганических стёкол, в которых теоретический предел оптических потерь строго определён, в прозрачных полимерах окна прозрачности можно выбирать путём подбора соответствующего полимера, смещая области абсорбции обертонов или области синглет-триплетного поглощения.

1. Н.Н. Барашков, О.А. Гундер, *Флуоресцирующие полимеры*, Химия, Москва (1987).
2. В.Г. Сенчишин, Т.В. Сахно, Н.Н. Барашков и др., *Органические материалы для люминесцентных солнечных концентраторов*, НИИТЭХИМ, Москва (1992).
3. В.Г. Сенчишин, Н.В. Везезуб, С.Н. Лавриненко, *Технология производства полимерных оптических изделий*, Техника, Киев (1992).
4. T. Kaino, M. Fuji, S. Nara, *J. Appl. Phys.*, **4**, 145 (1981).
5. Б.П. Берковский, В.И. Косяков, А.В. Котов и др., *Журн. прикл. спектроскоп.*, **46**, 145 (1987).
6. I. Takaaki, N. Eisuke, Y. Koino, *Proc. SPIE*, **1799**, 67 (1993).
7. Т.В. Сахно, Н.Н. Барашков, В.Г. Сенчишин, *Журн. прикл. спектроскоп.*, **54**, 338 (1991).
8. C. Emslie, *J. Mater. Sci.*, **23**, 2281 (1988).
9. Э.Ф. Силиныш, М.В. Курик, В. Чапек, *Электронные процессы в органических молекулярных кристаллах: Явления локализации и поляризации*, Зинатне, Рига (1988).
10. *Справочник по волоконно-оптическим линиям связи*, Под ред. С.В. Свешникова, Л.М. Андрушко, Техника, Киев (1987).
11. F. Urbach *Phys. Rev.*, **92**, 1324 (1953).
12. В.Л. Броуде, Г.В. Климушева, А.Л. Либерман и др., *Спектры поглощения молекулярных кристаллов*, Наукова думка, Киев (1965).
13. В.Г. Сенчишин, В.Б. Битеман, О.А. Гундер, *Влияние остаточного мономера на перенос энергии в пластмассовых сцинтилляторах*, в сб. «Монокристаллы и сцинтилляторы, их получение и свойства», ВНИИМонокристаллов, Харьков, №3 (1979).
14. С. Мак-Глинн, Т. Адзуми, М. Киносита, *Молекулярная спектроскопия триплетного состояния*, Мир, Москва (1972).
15. В.Г. Плотноков, *Успехи химии*, **49**, 327 (1980).
16. В.Г. Сенчишин, В.Б. Битеман, О.А. Гундери др., *Безызлучательные переходы в галоидпроизводных бензола*, в сб. «Методы получения и исследование монокристаллов и сцинтилляторов», ВНИИМонокристаллов, Харьков (1980).
17. M.S. Groot, J.H. Waals, *Physika*, **29**, 1128 (1963).
18. А.С. Давыдов, *Теория твёрдого тела*, Наука, Москва (1976).

Fundamental optical losses in transparent polymer matrix

V.G. Senchishin

The basic law of optical losses and the modern ideas about possible mechanisms of light attenuation in the transparent glasses was investigated

The deposit of optical losses to the summary attenuation in light transparent media for polymers with aromatic groups (polystyrene) and for the adequate models (benzene, toluene) was estimated.

The basic sources of light absorption: the long wave edge of own electronic absorption, two-quantum electronic absorption, singlet-triplet absorption and the absorption of overtones of CH-bonds oscillation was analyzed in detail.

Синтез гідроксиапатиту поєднанням хімічної та твердофазної реакцій

М.В. Ткаченко, І.Г. Іванов, З.З. Зиман

Харківський державний університет,
Україна, 310077, м. Харків, майд. Свободи, 4

Показана можливість одержання однофазного стехіометричного гідроксиапатиту шляхом двохступеневого процесу. На першому етапі хімічної реакції між $\text{Ca}(\text{OH})_2$ і H_3PO_4 утворюється однорідна дрібнодисперсна шихта, а на другому – у пресовці із шихти шляхом реакції у твердій фазі при температурах $\sim 800^\circ\text{C}$ відбувається остаточний синтез продукту. Дифрактометричні та ІЧ дослідження, а також вимірювання пористості та об'ємної усадки показали, що інтенсивне спікання пресовок з утворенням кераміки відбувається в інтервалі температур 1000 - 1100°C.

Показана можливість получения однофазного стехиометричного гидроксипатита путем двухступенчатого процесса. На первом этапе в результате химической реакции между $\text{Ca}(\text{OH})_2$ и H_3PO_4 образуется однородная мелкодисперсная шихта, а на втором – в прессовке из шихты путем реакции в твердой фазе при температурах $\sim 800^\circ\text{C}$ происходит окончательный синтез продукта. Дифрактометрические и ИК исследования, а также измерения пористости и объемной усадки показали, что интенсивное спекание пресовок с образованием керамики происходит в интервале температур 1000 - 1100°C.

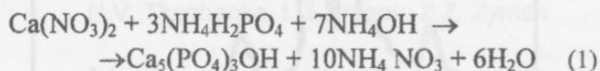
УДК 576,3/7,002:531/534

Гідроксиапатит $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$ (ГА), який є основною неорганічною складовою частиною твердих тканин живого організму, проявляє чудову біосумісність і добре інтегрується з тканинами кістки завдяки взаємодії на межі поділу і проростанню нових тканин в його пористу структуру. Ці властивості роблять ГА перспективним матеріалом для пластики кістки у стоматологічній та ортопедичній хірургії [1-3].

ГА у вигляді порошку значного використання поки що не знайшов, так як досить легко "вимивається" із кісткових дефектів тілесною рідиною. Та він широко використовується у вигляді гранул, брикетів і стержнів, які спікаються із порошкових заготовок при температурах $\sim 1100-1200^\circ\text{C}$. При спіканні є проблема стійкості ГА до розпаду, бо при цьому частково втрачаються групи OH^- ; це може викликати перехід ГА у інші сполуки, часто – у трикальційфосфат $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ і оксигідроксиапатит $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_{2-2x}\text{O}_x$. Запобігти розпаду ГА при указаних температурах можна, якщо застосувати заготовки із стехіометричного порошку. Та одержання стехіометричного ГА є досить складною задачею, оскільки

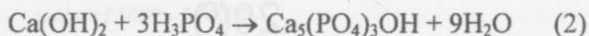
на фазовій діаграмі стану [4] йому належить досить вузька смуга (а відомі сполуки мають технологічні вади), яка відповідає концентрації $\text{Ca/P} \approx 1,67$.

Розроблено декілька способів одержання ГА із водних розчинів [5]. Найбільш поширений [6] ґрунтується на одержанні осаду з водних розчинів кальційфосфатних солей згідно з реакцією:



При таких позитивних рисах цього методу, як можливість добре контролювати реакцію синтезу і висока активність одержаного порошку до спікання, негативним є той факт, що при відмивці осаду від нітрату амонію виникають проблеми шкідливих умов праці.

У більш "чистому" способі одержання ГА [7] використовують реакцію:



У цьому випадку реакція йде з утворенням тільки ГА і води, що дає перспективу створення безвідходного циклу виробництва ГА. Та суттєвим не-

доліком способу є велика тривалість реакції, коли у водну суспензію $\text{Ca}(\text{OH})_2$ повільно, по краплі, добавляється ортофосфорна кислота H_3PO_4 , а потім потрібно ще чимало часу для так званого "дозрівання" осаду (до тижня). Оскільки така процедура здійснюється у повітряній атмосфері, в якій є вуглекислий газ, то продукт забруднюється: окрім ГА утворюється карбонатапатит [8].

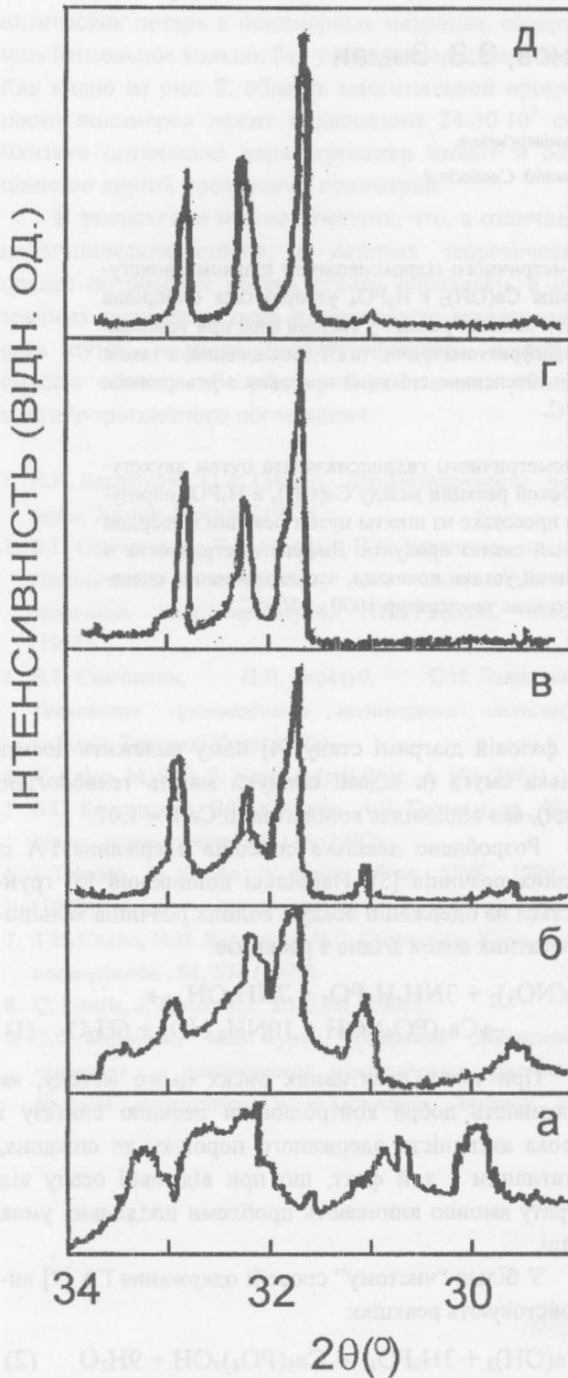


Рис. 1. Дифрактограми продуктів, одержаних при різних температурах.

У цій роботі запропонована методика одержання ГА, яка виходить із способу [7], та надалі має суттєві відмінності. Використана реакція (2). У водну суспензію одного моля гідроокису кальцію при кімнатній температурі додавали 3 моля ортофосфорної кислоти. Одержане реакційне середовище перемішували у магнітній мішалці протягом години, а потім поміщали у керамічний вібротолін. Така процедура приводила до доброї гомогенізації реакційної суміші і її помолу, що підвищувало швидкість реакції між $\text{Ca}(\text{OH})_2$ і H_3PO_4 . Внаслідок цієї реакції при кімнатній температурі утворювалася однорідна дрібнодисперсна шихта із дрібнокристалічного ГА і частинок $\text{Ca}(\text{OH})_2$, покритих шаром $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$, або CaHPO_4 . Дисперсність шихти у першу чергу залежала від дисперсності використаного гідроокису кальцію. А для одержання гомогенної дрібнодисперсної шихти достатньо 1-1,5 годинного помолу. Шихту відокремлювали від суспензії за допомогою вакуумної методики, або ж випаровуванням води у сушильці при температурі $\sim 120^\circ\text{C}$.

Для рентгенівських та ІЧ досліджень із одержаної шихти у пресформі типу пуансон-матриця під тиском 100 МПа пресували зразки циліндричної форми (висота 3,6 мм, діаметр 6,9 мм). Зразки відпалювали при температурах від 600 до 1200°C . Термічну обробку шихти починали з 600°C . При більш низькій температурі у шихті може залишатися гідроокис кальцію, температура розкладу якого 580°C , тобто реакція синтезу у твердій фазі з утворенням ГА за таких умов не йде.

На рис.1 приведені дифрактограми від продуктів при різних температурах синтезу; час синтезу одна година. Дифрактограма від шихти (а) має вид, типовий для дрібнокристалічної речовини, яка являє собою суміш гідроокису кальцію, дикальційфосфату і гідроксиапатиту. Синтез шихти при 600°C трансформує дифрактограму (б). Хоч зразок ще є багатофазним, та складається переважно з β -трикальційфосфату і гідроксиапатиту, до того ж відсотковий вміст останнього збільшився. З підвищенням температури до 700°C рентгенограма показує збільшення вмісту ГА і ріст його кристалічності у зразку (в). При 800°C дифракційна картина є типовою для ГА (г). Дальше підвищення температури до 1200°C не приводить до суттєвої зміни дифрактограм (д).

ІЧ-спектри підтверджують структурну однофазність одержаних продуктів і дають додаткову інформацію. На рис. 2 приведений ІЧ-спектр зразка, який спечений при 1000°C . Як це і характерно для ГА, піки PO_4^{3-} знаходяться при 475, 570, 600, 962 cm^{-1} та в інтервалі $1000 - 1130\text{ cm}^{-1}$. Поглинання при 630 і 3580 cm^{-1} показує наявність іонів OH^- в ГА. При смугі 875 cm^{-1} немає виступу, який відповідає іонам HPO_4^{2-} і з'являється у випадку кальційдефіцитного ГА [8,9]. Отже, рис.2 є типовим спектром стехіометричного ГА.

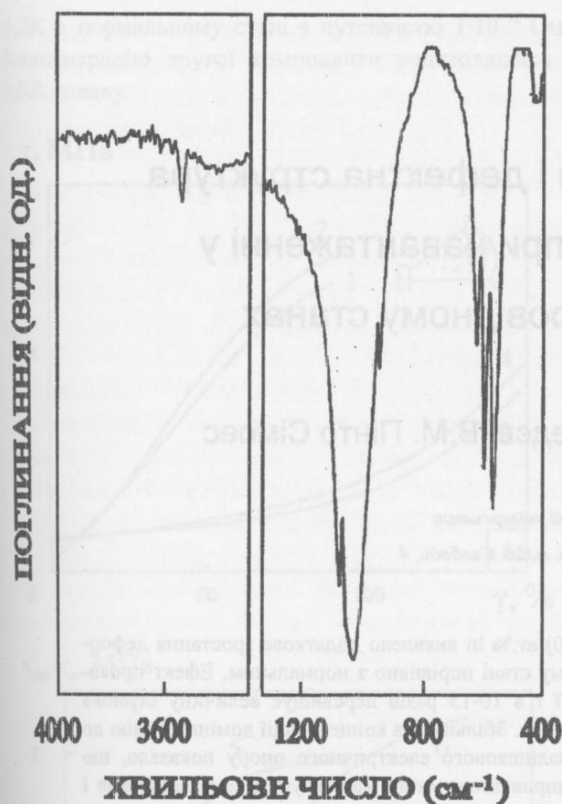


Рис. 2. ІЧ-спектр стехіометричного ГА.

Проведено попередні дослідження пористості $\frac{\rho_T - \rho}{\rho_T}$ (де ρ_T – теоретична густина) і об'ємної усадки $\frac{V}{V_0}$ (де V_0 – початковий об'єм) зразків, які були

спресовані з шихти, залежно від температури спікання. Результати досліджень подано у таблиці.

T, °C	V/V ₀ , %	($\rho_T - \rho$)/ ρ_T , %
900	17,7	50,6
1000	26,3	44,6
1100	41,0	32,3
1200	46,5	25

Таблиця

Із даних таблиці видно, що інтенсивна усадка зразків має місце в інтервалі 1000-1100°C. У цьому ж інтервалі відбувається значне зменшення пористості. При підвищенні температури, тобто в інтервалі 1100-

1200°C, хоч і спостерігається подальше збільшення густини кераміки, та воно менш інтенсивне. Для одержання зразків з більшою густиною за цих температур слід збільшити час спікання.

Таким чином, у даній роботі показана можливість одержання однофазного продукту із стехіометричного гідроксиапатиту шляхом поєднання хімічної реакції на початковій стадії для одержання шихти і твердофазної реакції синтезу на кінцевій стадії. Установлено, що синтез ГА відбувається при температурі ~800°C. Інтенсивне спікання порошкових зразків з утворенням кераміки має місце у інтервалі температур 1000-1100°C.

1. C. Rey, M. Freehe, M. Heughebaert, J.C. Heughebaert, I.L. Lacout, A. Lebugle, I. Szilagyi, M. Vignoles, *Bioceramics*, 4, Eds. W. Bonfield, G.W. Hastings, K.E. Tanner, Butterworth - Heinemann Ltd., 57 (1991).
2. L.L. Hench, *J. Amer. Ceram. Soc.*, 74, 1487, (1991).
3. Z. Zyman, I. Ivanov, V. Glushko, N. Dedukh, S. Malyskhina, *Biomaterials*, 19, 1076 (1998).
4. K.de Groot, C.P.A.T. Klein, J.G.C. Wolke, J.M.de Blicke-Hogervorst, *Handbook of Bioactive Ceramics*, 2, Eds. Yamamuro S.T. et al., C.R.C. Press, 3 (1990).
5. R.W. Mooney, V.A. Aia, *Chem. Rev.*, 61, 434 (1961).
6. M. Jarcho, C.H. Bolen, M.B. Thomas, J. Bobick, J.F. Kay and R.H. Doremus, *J. Mater. Sci.*, 11, 2027 (1976).
7. V. Akao, H. Aoki and K. Kato, *J. Mater. Sci.*, 16, 809 (1981).
8. A. Osaka, J. Miura, K. Takeuchi, M. Asada and K. Takahaschi, *J. Mater. Sci. Mater. Med.*, 2, 51 (1991).
9. H. Chair, J. Heughebaert and M. Heughebaert, *J. Mater. Chem.*, 5, 895 (1995).

Hydroxyapatite synthesis by integration of a chemical and a solid state reactions

N.V. Tkachenko, I.G. Ivanov, Z.Z. Zyman

A single-phase stoichiometric hydroxyapatite is prepared by a two-stage process. At the first stage, a homogeneous fine-dispersion charge emerges as a result of a chemical reaction of Ca(OH)_2 and H_3PO_4 under certain conditions, and at the second stage, a final product is synthesized by a solid state reaction at temperature of ~ 800°C in pressing made of the charge. X-ray diffraction and IR-analysis as well as porosimetry and volume shrinking studies revealed an intensive sintering for pressings with ceramics production in the temperature range of 1000 - 1100°C.

Деформуюче напруження і дефектна структура сплавів системи Pb-In при навантаженні у нормальному і надпровідному станах

В.С. Криловський, В.П. Лебедєв, В.М. Пінто Сімоес

Харківський державний університет
Україна, 310077, м. Харків, майд. Свободи, 4

На моно- та полікристалах сплавів системи Pb-(0-10) ат.% In виявлено додаткове зростання деформуючого напруження при навантаженні в надпровідному стані порівняно з нормальним. Ефект проявляється при середніх та великих ступенях деформації і в 10-15 разів перевищує величину стрибка зміцнення $\delta\sigma_{н,над}$ при переході в надпровідний стан. Збільшення концентрації домішок індію до 10% не впливає на величину ефекту. Вимірювання залишкового електричного опору показало, що більший коефіцієнт зміцнення при навантаженні в надпровідному стані має структурне походження і пов'язаний з більш інтенсивною генерацією крапкових і лінійних дефектів.

На моно- і полікристалах сплавів системи Pb-(0-10) ат.% In обнаружено дополнительное возрастание деформирующего напряжения при нагружении в сверхпроводящем состоянии по сравнению с нормальным. Эффект проявляется при средних и больших степенях деформации и в 10-15 раз превосходит величину скачка напряжения $\delta\sigma_{нс}$ при переходе в сверхпроводящее состояние. Увеличение концентрации примеси индия до 10% не влияет на величину эффекта. Измерение остаточного электросопротивления показало, что больший коэффициент упрочнения при нагружении в сверхпроводящем состоянии имеет структурную природу и связан с более интенсивной генерацией точечных и линейных дефектов.

PACS: 83.50.Pk

У більшості робіт [1] по експериментальному вивченню електрон-дислокаційної взаємодії в нормальному і надпровідному стані металу застосовували диференціальну методику, зв'язану з чергуванням станів і визначенням зміни деформуючої напруги $\delta\sigma_{н,над}$ у процесі надпровідного переходу.

Однак ранні дослідження [2,3,4] закономірностей формування структурних недосконалостей кристалічної ґратки показали, що деформація металу у надпровідному стані приводить до більш високої інтенсивності їхнього утворення і розходження в характері їхнього розподілу по об'єму, що, у свою чергу, зумовлює різну поведінку металу під час навантаження. Так для чистого свинцю [1] спостерігали зростання рівня деформуючої напруги і коефіцієнта зміцнення.

У зв'язку з цим була поставлена задача продовження початих досліджень закономірностей деформаційного зміцнення і формування дефектної структу-

ри моно- і полікристалів свинцю з додаванням легуючих атомів на системі сплавів Pb-In при навантаженні тільки в нормальному або тільки надпровідному станах.

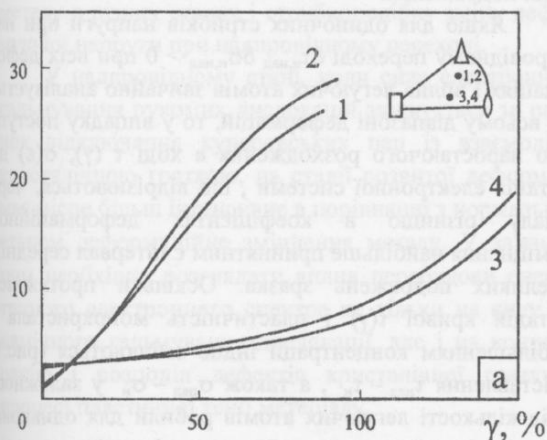
Дослідження були виконані на моно- (із орієнтацією, близькою до центра стереографічного трикутника) і полікристалах хімічно чистого свинцю (99,9996% і 99,98%) і сплавів Pb- (7. 10^{-4} ÷ 10) ат. %In з відно-

шенням $\frac{P_{300K}}{P_{4.2K}} = (1.4 \cdot 10^4 - 10)$. Зразки у виді плоско-

паралельних пластин із розмірами робочої частини $1 \times 5 \times (10-30)$ мм деформували розтягом із швидкістю $5 \cdot 10^{-4}$ с $^{-1}$ при 4,2 К. Похибка у визначенні напруги складала $\pm 10^5$ Па, а деформації $\pm 10^{-1}\%$. Зміну стану металу-надпровідника здійснювали магнітним полем надпровідного соленоїда подовжньої щодо осі розтягу орієнтації. Вимірювання питомого електричного опору ρ по чотирьохзондовій методиці проводили при

4,2K в нормальному стані з чутливістю $1 \cdot 10^{-12}$ Ом·м. Концентрацію другої компоненти контролювали по RRR сплаву.

τ , МПа



$\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}}$, МПа

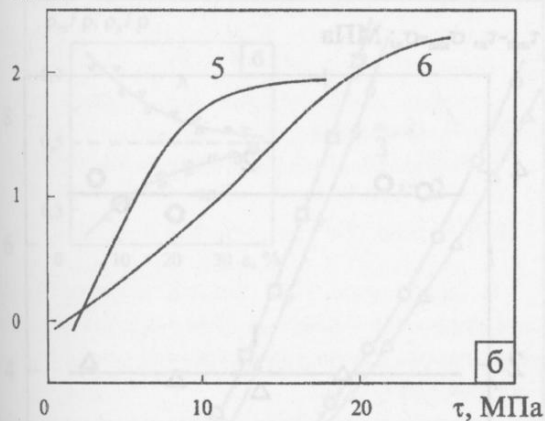
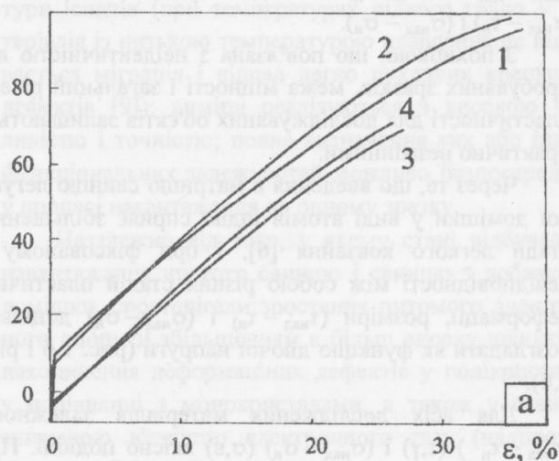


Рис. 1. Монокристали свинцю (1,2,5) та Pb-5 ат.% In (3,4,6): а – криві τ (γ) для нормального (1,3) та надпровідного (2,4) станів; б – різниця в зсувному напруженні ($\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}}$) як функція τ (5,6).

При додаванні в кристал великої кількості легуючих атомів вклад у питомий електричний опір домішкових дефектів $\rho_{\text{д}}$ значно перевищує вклад власних дефектів $\rho_{\text{в}}$ ($\rho_{\text{д}} \gg \rho_{\text{в}}$) і виділення внеску власних дефектів, що утворилися в процесі деформування, стає скрутним. Крім того, при цьому виникає значна похибка в обчисленні $\rho(\epsilon)$ через зменшення RRR до (1 - 10) і некоректне обчислення геометричного чинника як функції ϵ . Похибка обчислення розміру зразка, що змінюється в процесі деформації $\pm 0,1\%$ обмежує придатність методики залишкового електроопору для оцінки перекрученості матеріалу концентрацією домішки $C < (1,0 - 10)$ ат.%. У зв'язку з цим закономірності зміни питомого електричного опору в

залежності від ступеня відносного подовження ϵ , стану електронної системи, предисторії зразка вивчали на моно- і полікристалах хімічно чистого свинцю (99,9996%) і з добавками індію до $C < 1$ ат.%.

σ , МПа



$\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}}$, МПа

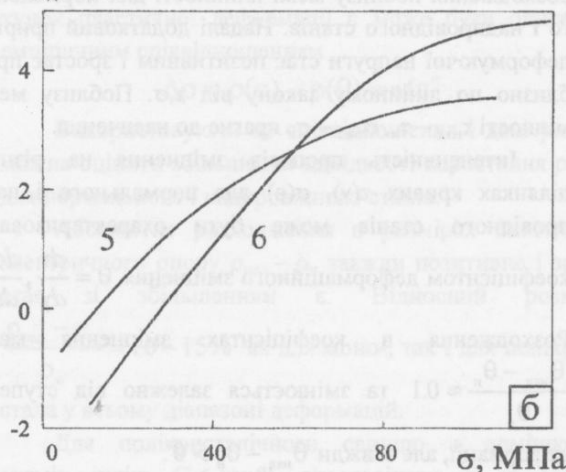


Рис. 2. Полікристали свинцю (1,2,5) та Pb-1 ат.% In (3,4,6): а – криві σ (ϵ) для нормального (1,3) та надпровідного (2,4) станів; б – різниця в зсувному напруженні ($\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}}$) як функція σ (5,6).

Вплив стану електронної системи на поведінку моно- і полікристалічного свинцю і його сплавів у процесі їх пластичної течії з постійною швидкістю ілюструють рис. 1 і 2. Приведені криві деформаційного зміцнення є результатом усереднення по декількох зразках.

Деформація зазначених об'єктів із фіксованою густиною нормальних електронів завжди супроводжується більш високим рівнем деформуючої напруги у надпровідному стані у порівнянні з нормальним ($\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}}$, $\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}}$) при середніх і великих ступенях деформації (рис. 1,а і 2,а). Оскільки межа плинності у

нормальному стані вища, чим у надпровідному, на початкових ділянках пластичної течії ($\gamma < 10 \div 15\%$, $\varepsilon < 5 \div 10\%$) мала місце інверсія кривих $\tau(\gamma)$, $\sigma(\varepsilon)$. Надалі через розходження в коефіцієнтах деформаційного зміцнення $\theta_{\text{над}} > \theta_{\text{н}}$ з'являється перевищення $\tau_{\text{над}} > \tau_{\text{н}}$, $\sigma_{\text{над}} > \sigma_{\text{н}}$, що надалі будемо визначати як $(\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}})$ і $(\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}})$.

З похибкою, що пов'язана з неідентичністю випробуваних зразків, межа міцності і загальний рівень пластичності для досліджуваних об'єктів залишаються практично незмінними.

Через те, що введення в матрицю свинцю легуючої домішки у виді атомів індію сприяє збільшенню стадії легкого ковзання [6], і при фіксованому γ невідповідності між собою різних стадій пластичної деформації, розміри $(\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}})$ і $(\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}})$ доцільно розглядати як функцію діючої напруги (рис. 1,б і рис. 2,б).

Для всіх досліджених матеріалів залежності $(\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}})(\tau, \gamma)$ і $(\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}})(\sigma, \varepsilon)$ якісно подібні. При малих деформаціях $\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}}$, $\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}}$ – негативні через розходження поблизу межі плинності для нормального і надпровідного станів. Надалі додатковий приріст деформуючої напруги стає позитивним і зростає приблизно по лінійному закону від τ, σ . Поблизу межі міцності $\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}}$, $\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}}$ прагне до насичення.

Інтенсивність процесів зміцнення на різних ділянках кривих $\tau(\gamma)$, $\sigma(\varepsilon)$ для нормального і надпровідного станів може бути охарактеризована коефіцієнтом деформаційного зміцнення $\theta = \frac{d\tau}{d\gamma}, \frac{d\sigma}{d\varepsilon}$.

Розходження в коефіцієнтах зміцнення має $\frac{\theta_{\text{над}} - \theta_{\text{н}}}{\theta_{\text{н}}} \approx 0.1$ та змінюється залежно від ступеня деформації, але завжди $\theta_{\text{над}} - \theta_{\text{н}} > 0$.

Зіставлення абсолютних значень додаткового зміцнення і одиночного стрибка напруги при зміні станів металу може бути оцінене як $\frac{\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}}}{\delta\tau_{\text{н, над}}} \approx 15$ і

$\frac{\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}}}{\delta\sigma_{\text{н, над}}} \approx 10$. Таке співвідношення зберігається для

широкого інтервалу деформацій.

Вплив кількості легуючих атомів у матриці основного металу – свинцю на різницю в зростанні деформуючої напруги $\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}}$, $\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}}$ моно- і полікристалів вивчали до концентрації індію 10 ат. %. Більш висока концентрація домішки істотно змінює фізичні характеристики металу (наприклад, пружні модулі і т.д.).

Якісна картина явища більш інтенсивного зростання деформуючої напруги при навантаженні в надпровідному стані, характерна для чистого металу,

зберігається і для сплавів системи Pb-In: більш високий рівень межі плинності в нормальному стані і більший коефіцієнт зміцнення в надпровідному стані $(\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}})$, $(\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}}) > 0$ при середніх і великих ступенях подовження.

Якщо для одиночних стрибків напруги при надпровідному переході $\delta\tau_{\text{н, над}}$, $\delta\sigma_{\text{н, над}} > 0$ при всіх деформаціях і вплив легуючих атомів звичайно аналізується у всьому діапазоні деформацій, то у випадку поступово наростаючого розходження в ході $\tau(\gamma)$, $\sigma(\varepsilon)$ для станів електронної системи, що відрізняються, через малу різницю в коефіцієнтах деформаційного зміцнення найбільше прийнятним є інтервал середніх і великих подовжень зразка. Оскільки протяжність стадій кривої $\tau(\gamma)$ і пластичність монокристала зі збільшенням концентрації індію змінюються (рис.1), зіставлення $\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}}$, а також $\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}}$ у залежності від кількості легуючих атомів робили для однакових рівнів діючої напруги τ або σ , що відповідають стадії лінійного зміцнення металу.

$\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}}$, $\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}}$, МПа

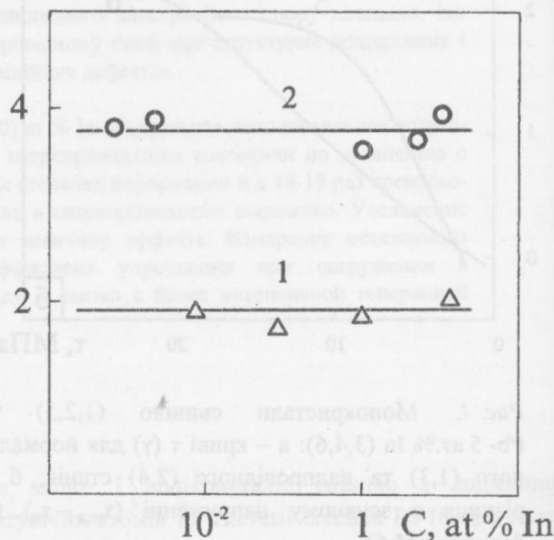


Рис. 3. Зміни $(\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}})$ і $(\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}})$ від концентрації In для моно- (1) і полікристалів (2).

На рис.3 приведені залежності приросту $\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}}$, $\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}}$ від концентрації індію в сплаві для моно- (а) і полікристала (б) відповідно для рівня $\tau = 18$ МПа і $\sigma = 60$ МПа. В обох випадках в діапазоні 0 +10 ат. % In має місце незалежність $\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}}$, $\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}}$ від концентрації індію.

Зіставлення $\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}}$, $\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}} = f(C)$ (рис.4) із залежністю $\delta\tau_{\text{н, над}}$, $\delta\sigma_{\text{н, над}}$ від концентрації індію [5] вказує на різний характер впливу домішки на процес зміцнення в різних станах і стрибкоподібну зміну напруги при надпровідному переході. Необхідно відзначити їхню повну сумісність у процесі активного

деформування матеріалу: стрибок напруги спостерігається на кривій $\tau(\gamma)$, $\sigma(\epsilon)$ як після тривалого деформування в нормальному, так і надпровідному стані. Все це може свідчити про різний вплив чинника легування на процеси зміцнення при навантаженні металу в різних станах і стрибкоподібну зміну деформуючої напруги при надпровідному переході.

У надпровідному стані, коли сила електронного гальмування рухомих дислокацій знижується за рахунок відключення куперовських пар із взаємодії з кристалічною ґраткою, на стадії розвитку деформації має місце більш інтенсивне в порівнянні з нормальним станом деформаційне зміцнення металу. У зв'язку з цим необхідно розглядати вплив перебудови енергетичного електронного спектра не тільки на силу динамічного гальмування дислокації, але і на концентрацію і розподіл дефектів кристалічної ґратки в процесі пластичної течії матеріалу.

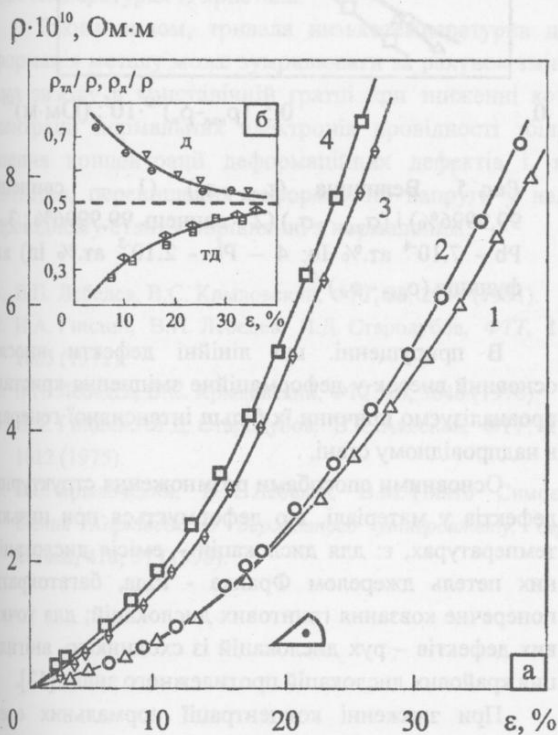


Рис. 4. Величина питомого електричного опору при різних ступенях деформації моно- (1,2) і полікристала (3,4) свинцю (99,9996%) після навантаження у нормальному (1,3) і надпровідному стані (2,4) (а). Відносний вклад точкових $\frac{\rho_t}{\rho}$ і лінійних дефектів $\frac{\rho_d}{\rho}$ відповідно для деформації у нормальному ($\square, \triangle$) і надпровідному ($\ominus, \nabla$) станах (б).

Методика виміру залишкового питомого електроопору ρ виявилася найбільше ефективною при вивченні структурних змін після низькотемпературної деформації металу [7,8]. Хоча цей метод і є непрямим, проте він має цілий ряд переваг, основними з яких є: вимір електроопору здійснюється без зміни температури іспитів (при температурах рідкого гелію у матеріалів із низькою температурою плавлення не відбувається міграція і відпал легко рухливих крапкових дефектів [9]); виміри реалізуються з високою чутливістю і точністю; повне визначення тих або інших функціональних залежностей можливо безпосередньо у процесі навантаження на одному зразку.

Незалежно від того, у якому стані відбувалося навантаження чистого свинцю і свинцю з добавками домішки, спостерігали зростання питомого електричного опору зі збільшенням ϵ більш високу швидкість накопичення деформаційних дефектів у полікристалах у порівнянні з монокристаллами, а також у стані зі зниженою в'язкістю електронного газу (надпровідному стані) (рис.4).

Зростання питомого електричного опору ρ за рахунок пластичної деформації ϵ може бути описано емпіричним співвідношенням

$$\Delta\rho = \rho(\epsilon) - \rho(0) = A\epsilon^n.$$

Використовуючи це співвідношення і дані рис.4 можна оцінити збільшення швидкості наростання $\rho(\epsilon)$ для нормального і надпровідного станів.

Абсолютне розходження в розмірах питомого електричного опору $\rho_{\text{над}} - \rho_n$ завжди позитивне і зростає зі збільшенням ϵ . Відносний розмір $\frac{\rho_{\text{над}} - \rho_n}{\rho_n} = 10 - 15\%$ як для моно-, так і для полікристала у всьому діапазоні деформацій.

Для полікристалічного свинцю з домішкою атомів індію $C < 1 \text{ ат.}\%$ спостерігали ті ж закономірності, що і для чистого матеріала: $(\rho_{\text{над}} - \rho_n) > 0$, ця різниця зростає з ϵ і від концентрації домішки не залежить (рис.4). Це корелює з незалежністю від концентрації індію розміру $\sigma_{\text{над}} - \sigma_n$ на стадії розвитку пластичного плину (рис.3).

Деформація матеріалу без домішок сторонніх атомів супроводжується генерацією дефектів кристалічної ґратки, що сприяє зростанню електричного опору на величину

$$\rho(\epsilon) - \rho(0) = \rho_{\text{тл}}(\epsilon) + \rho_{\text{д}}(\epsilon) = C_{\text{тл}}(\epsilon)\rho_{\text{тл}}^0 + N_{\text{д}}(\epsilon)\rho_{\text{д}}^0,$$

де $C_{\text{тл}}(\epsilon)$ і $N_{\text{д}}(\epsilon)$ – концентрація точкових і лінійних дефектів, $\rho_{\text{тл}}^0$ і $\rho_{\text{д}}^0$ – питомий електричний опір одиничної концентрації точкових дефектів і дислокацій.

Для встановлення типу і концентрації деформаційних дефектів, відповідальних за різницю в електричному опорі після навантаження в нормальному і надпровідному станах, робили поділ внесків точкових

і протяжних дефектів шляхом відпалювальних експериментів [9].

На рис. 4,6 приведені відносні внески точкових $\rho_{\text{тд}}/\rho$ і лінійних $\rho_{\text{л}}/\rho$ дефектів у електроопір свинцю, деформованого в різних станах. Більш високий рівень $\rho(\epsilon)$ після деформації у надпровідному стані рівною мірою обумовлений як точковими дефектами, так і дислокаціями.

Таким чином, перебудова електронного енергетичного спектра в надпровідному стані свинцю і сплавів свинцю з індієм сприяє: більш високому коефіцієнту деформаційного зміцнення у надпровідному стані, більшому значенню питомого електричного опору ρ при таких умовах деформування, більш інтенсивній генерації деформаційних дефектів (в однаковій мірі точкових і лінійних).

Теоретичні моделі [10-12], що пояснюють стрибок деформуючої напруги при надпровідному переході $\delta\tau_{\text{н,над}}, \delta\sigma_{\text{н,над}} = f(\gamma, \epsilon, C)$, ґрунтуються на зниженні сили динамічного гальмування дислокацій при зміні в'язкості газу нормальних електронів або ж на зниженні висоти потенційного бар'єра на шляху рухомих дислокацій [13]. Однак, у жодній із цих робіт не розглядається вплив стану електронної системи на формування дефектної структури в процесі пластичної течії металу.

У припущенні визначального внеску в структурне зміцнення матеріалу дислокацій [14] і оцінці їх концентрації по величині залишкового електричного

опору $N_{\text{д}} = \frac{\rho_{\text{д}}}{\rho_{\text{д}}^0}$ можна отримати

$$\tau(\gamma), \sigma(\epsilon) = \tau_0, \sigma_0 + \alpha Gb N_{\text{д}}^{1/2} = \tau_0, \sigma_0 + \alpha Gb(\rho_{\text{д}}^0)^{1/2},$$

де τ_0, σ_0 – рівень напруг при вихідному стані структури металу; коефіцієнт, що визначає механізм взаємодії між дислокаціями $\alpha = 0,1-1,0$; G – модуль зсуву і b – вектор Бюргерса. В наближенні рівного внеску крапкових дефектів і дислокацій в питомий електричний опір

$$\begin{aligned} \tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}}, \sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}} &= \alpha Gb \left(\frac{\rho_{\text{д,над}} - \rho_{\text{д,н}}}{\rho_{\text{д}}^0} \right)^{1/2} \approx \\ &\approx \frac{1}{2} \alpha Gb \left(\frac{\rho_{\text{над}} - \rho_{\text{н}}}{\rho_{\text{д}}^0} \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Використовуючи отримані експериментальні дані для моно- і полікристалів свинцю і свинцю з невеликою домішкою індію між $(\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}})$, $(\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}})$ і $(\rho_{\text{над}} - \rho_{\text{н}})^{1/2}$ спостерігається лінійний зв'язок (рис.5). Це свідчить про те, що додаткове зміцнення в основному забезпечується надлишковою густиною дислокацій, що генеруються в надпровідному стані. При цьому розходження в кутах нахилу приведених залежностей (1) і (2) визначається розміром α для моно-

полікристала (α задається типом дислокацій, що вносять основний внесок у зміцнення кристала [14]). Полікристали з невеликою концентрацією атомів індію (залежності 2-4) однаковий приріст $\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}}$ забезпечується більшою густиною лінійних дефектів.

$(\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}}), (\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}}), \text{ МПа}$

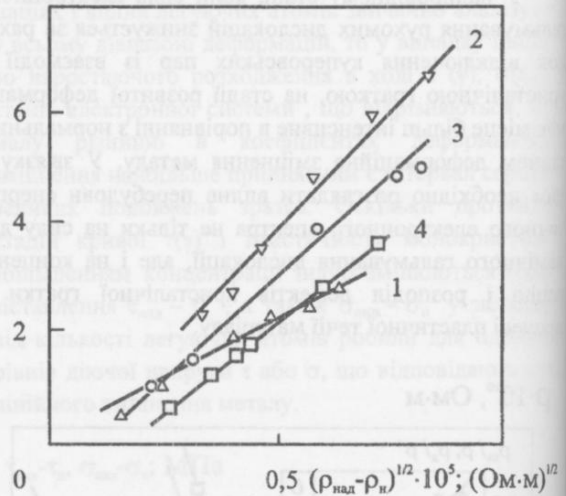


Рис. 5. Величина $(\tau_{\text{над}} - \tau_{\text{н}})$ (1 – свинець 99,9996%) і $(\sigma_{\text{над}} - \sigma_{\text{н}})$ (2 – свинець 99,9996%; 3 – Pb - $7 \cdot 10^{-4}$ ат.% In; 4 – Pb - $2 \cdot 10^{-3}$ ат.% In) як функція $(\rho_{\text{над}} - \rho_{\text{н}})^{1/2}$.

В припущенні, що лінійні дефекти вносять основний внесок у деформаційне зміцнення кристала проаналізуємо причини їх більш інтенсивної генерації в надпровідному стані.

Основними способами розмноження структурних дефектів у матеріалі, що деформується при низьких температурах, є: для дислокацій – емісія дислокаційних петель джерелом Франка - Ріда, багатократне поперечне ковзання гвинтових дислокацій; для точкових дефектів – рух дислокацій із сходянкою, анігіляція крайових дислокацій протилежного знака [13].

При зниженні концентрації нормальних електронів у металі полегшується робота джерела Франка - Ріда [14], що може сприяти збільшенню густини рухомих дислокацій $N_{\text{д}}$, їхньої загальної концентрації і, як слідство, більш інтенсивній генерації крапкових дефектів. Однак, в умовах пластичної течії матеріалу постійною швидкістю $\dot{\epsilon} = N_{\text{д}} V_{\text{д}} = \text{const}$ збільшення $V_{\text{д}}$ при переході в надпровідний стан [15] супроводжується зниженням загальної густини рухомих дислокацій.

Як уже розглядалося в [5], цілком альтернативним або одночасно діючим механізмом, що пояснює природу одиночного стрибка деформуючої напруги $\delta\tau_{\text{н,над}}, \delta\sigma_{\text{н,над}}$ при переході металу і

надпровідний стан може бути зниження висоти потенційного бар'єра (U_{nc} на шляху дислокації, що рухається).

Неможливість пояснити підвищення інтенсивності генерації структурних дефектів у стані зі зниженою густиною нормальних електронів тільки зміною в'язкості компоненти гальмування дислокації приводить до необхідності враховувати чинник зниження енергії утворення точкових і лінійних дефектів у надпровідному стані.

У порівнянні з динамічними ефектами, що реалізуються при деформації з високими швидкостями пластичної течії, внесок δU_{nc} у зниження ефективної сили електронного гальмування дислокацій може бути незначним. У той же час, при тривалій деформації невелика добавка до концентрації, що генеруються, дефектів за рахунок зниження енергії їхнього утворення може накопичуватися і не виводитися при низьких температурах із кристала.

Таким чином, тривала низькотемпературна деформація металу може зумовлювати за рахунок зміни сил зв'язки в кристалічній ґратці при зниженні концентрації нормальних електронів провідності збільшення концентрації деформаційних дефектів і, як слідство, перевищення деформуючої напруги у надпровідному стані у порівнянні з нормальним.

1. В.П. Лебедев, В.С. Крыловский, *ФТТ*, **33**, 2944 (1991).
2. И.А. Гиндин, В.П. Лебедев, Я.Д. Стародубов, *ФТТ*, **14**, 2025 (1972).
3. В.П. Лебедев, В.С. Крыловский, *ФТТ*, **18**, 3648 (1976).
4. И.А. Гиндин, Я.Д. Стародубов, В.К. Аксенов, *ФТТ*, **17**, 1012 (1975).
5. В.С. Крыловский, В.П. Лебедев, В.М. Пинто Симоес, *Вісник Харківського державного університету, сер. Фізика*, **418**, 57 (1998).

6. Р. Бернер, Г. Кронмюллер, *Пластическая деформация монокристаллов*, Мир, Москва (1975).
7. В.П. Лебедев, В.С. Крыловский, *Металлофизика*, **8**, 114 (1986).
8. В.И. Хоткевич, В.П. Лебедев, В.С. Крыловский, А.Х. Филлипс, *Металлофизика*, **3**, 87 (1981).
9. M.L. Swanson, A.F. Quenneville, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **9**, 135 (1972).
10. A.V. Granato, *Phys. Rev.*, **B 4**, 2196 (1971).
11. A.I. Landau, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **61**, 555 (1980).
12. В.Д. Нацик, *ЖЭТФ*, **61**, 2540 (1971).
13. В.Г. Барьяхтар, Е.И. Друинский, И.И. Фалько, *ФММ*, **33**, 5 (1972).
14. Ж. Фридель, *Дислокации*, Мир, Москва (1967).
15. В.С. Бобров, *ФТТ*, **16**, 3375 (1974).

Deforming stress and defect structure Pb-In alloys under loading in normal and superconducting states

V.S. Krylovskiy, V.P. Lebedev,
V.M. Pinto Simoes

The additional increase of deforming stress at loading in superconducting state in comparison with normal one has been discovered for Pb-(0-10) at.% In single and polycrystals. The effect manifestate at middle and high degrees of deformation and is 10-15 higher then the jump of dishardening $\delta\tau_{ns}$, $\delta\sigma_{ns}$ at superconducting transition. The growth of the indium impurity concentration up to 10% do not caused on value of effect. The measurement of electrical resistivity show that higher strengthening at loading in superconducting state is of structural nature and is connected with more intensive creation of point and linear defects.

Зміна модуля Юнга надпластичного сплаву Pb-62%Sn в умовах деформування

В.Ф. Коршак¹, В.М. Аржавітін², О.С. Розумний¹

²Харківський державний університет

Україна, 310077, м. Харків, майд. Свободи, 4

²Харківський фізико-технічний інститут (ННЦ)

Україна, 310108, м. Харків, вул. Академічна, 1

Вивчено особливості зміни модуля Юнга литого з наступним обтисненням сплаву Pb-62%Sn, деформованого при кімнатній температурі в умовах повзучості при напруженнях, що є оптимальними для виявлення надпластичності. Модуль Юнга визначали за допомогою методу згинних коливань. Виявлено зменшення модуля Юнга сплаву, що досліджується, в умовах деформування. Це зменшення становить близько 10% при відносному видовженні зразків ~ 60%, і близько 7,5% при відносному видовженні ~ 50%. Висловлено припущення, що однією з причин зменшення модуля Юнга може бути нерівноважність вихідного стану сплаву і зміна його фазового складу в умовах деформування.

Изучены особенности изменения модуля Юнга литого с последующим обжатием сплава Pb-62%Sn, деформированного при комнатной температуре в условиях ползучести при напряжениях, оптимальных для проявления сверхпластичности. Модуль Юнга определяли с помощью метода изгибных колебаний. Обнаружено уменьшение модуля Юнга исследуемого сплава в условиях деформирования, составляющее около 10% при относительном удлинении образцов ~60%, и около 7,5% при относительном удлинении ~ 50%. Высказано предположение, что одной из причин уменьшения модуля Юнга может быть неравновесность исходного состояния сплава и изменение его фазового состава в условиях деформирования.

PACS: 62.20.Dc: 62.20.Fe

На даний час накопичено значну кількість експериментальних даних, які свідчать про те, що модулі пружності металічних матеріалів виявляються досить чутливими до їхнього структурного стану [1-4]. Зокрема, в роботі [4] виявлено очевидну залежність модуля Юнга сплаву 45 НХТ від температури загартування – з її зростанням величина модуля знижується. При цьому авторами [4] показано, що одним із факторів, які зумовлюють таку зміну модуля Юнга, є отримання структурного нерівноважного стану (в результаті загартування на перенасичений твердий розчин) внаслідок перенасичення матричної фази розчиненими компонентами і структурними дефектами.

Важливим висновком, який витікає з проведених в [4] досліджень, є висновок про те, що модуль Юнга є характеристикою досить чутливою до рівня метастабільності структурного стану сплаву. Цей висновок має особливе значення стосовно до надпластичних

(НП) матеріалів, оскільки такому факторові, як метастабільність структурного стану, ряд дослідників надпластичності приділяє важливу роль [5].

В той же час дослідження, спрямовані на вивчення особливостей зміни пружних властивостей НП матеріалів, є практично відсутніми.

Враховуючи вищевикладене, в даній роботі виконано експерименти, що мають за мету дослідити поведінку модуля Юнга одного із НП сплавів в умовах деформування.

Об'єктом дослідження обрано типовий НП евтектичний сплав Pb-62%Sn, що виявляє НП поведінку вже при кімнатній температурі, при якій і проведено всі експерименти.

Сплав було виготовлено із чистих компонентів сплавлюванням в лабораторній печі з наступним литтям на масивну мідну підкладину. Після тривалого старіння на повітрі зливки було обтиснено на гідравлічному пресі на ~ 75%. Із отриманих заготовок

виготовляли зразки для випробувань. Зразки мали призматичну форму з розмірами поперечного перерізу, що дорівнювали $1,6 \times 1,8$ мм.

Механічні випробування проведено в умовах повзучості при сталому навантаженні, величина якого забезпечувала значення початкового прикладеного напруження $\sigma_n = 7$ МПа. Такий рівень σ_n згідно до результатів попередніх досліджень [6] є оптимальним для виявлення надпластичності у даному сплаві за обраних умов експерименту.

Модуль Юнга визначали за допомогою методу згинних коливань. Відносна деформація зразків при цьому складала $\sim 10^{-5}$. Вимірювання згинної резонансної частоти виконано за допомогою експериментальної установки, яку описано в [7]. Як еталонні матеріали використовували алюміній, мідь і олово технічної чистоти.

Мікроструктуру зразків виявляли шляхом хімічного травління [8]. Металографічні дослідження виконано з використанням оптичного мікроскопу МИМ-7. Об'ємне співвідношення фаз визначали за допомогою лінійного методу Розівалія.

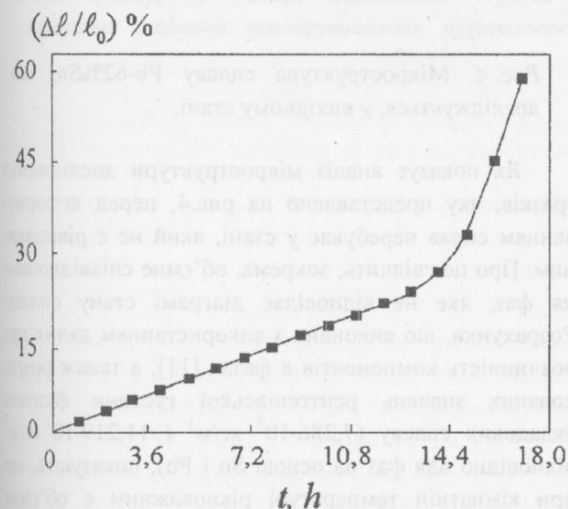


Рис. 1. Початковий участок кривої повзучості сплаву Pb-62%Sn. $T = 293$ К, $\sigma_n = 7$ МПа.

На рис. 1 показано початковий участок кривої повзучості одного із зразків. Як видно, пластичне стікання зразків за обраних умов експерименту характеризується наявністю двох чітко виражених стадій, що відрізняються за швидкістю деформації. Швидкість повзучості на другій стадії значно вища, ніж на першій. Такі особливості пластичного стікання є типовими для умов надпластичності [9]. При цьому власне НП деформація реалізується на другій стадії повзучості. У цьому зв'язку дослідження пружних властивостей сплаву було виконано на етапі, коли починає активно розвиватися надпластична, тобто,

друга стадія повзучості. Досліджували зразки, відносно видовження $\Delta l/l_0$ яких складало $\sim 50\%$ і $\sim 60\%$.

Як відомо, резонансна частота основного тону згинних коливань у випадку прямого маятника залежить від модуля Юнга E наступним чином [10]:

$$f = \frac{t}{3,076} \sqrt{\frac{E}{\rho}} \frac{1}{l^2}, \quad (1)$$

де t – товщина зразка в напрямку навантаження, ρ – густина матеріалу, l – довжина зразка.

Звідси впливає дисперсійне співвідношення, що функціонально зв'язує резонансну частоту з довжиною зразка:

$$f^2(l) = Al^{-4}, \quad (2)$$

де незалежний від довжини зразка, що здійснює коливання, коефіцієнт A дорівнює:

$$A = \frac{Et^2}{9,4642\rho}. \quad (3)$$

Наведені співвідношення дозволяють визначати модуль Юнга у випадку ідеальної ситуації, коли є відсутньою дисипація енергії коливань, що передаються зразку, зумовлена особливостями конструкції експериментальної установки. В реальній ситуації перекрити всі канали такої дисипації не завжди вдається, і дисперсійне співвідношення у цьому випадку приймає вигляд:

$$f^2(l) = A_n l^{-n}, \quad (4)$$

де n відрізняється від чотирьох, а коефіцієнт A_n задається вже не тільки фізичними властивостями та геометрією зразка (див. формулу (3)), але й конструктивним оформленням установки.

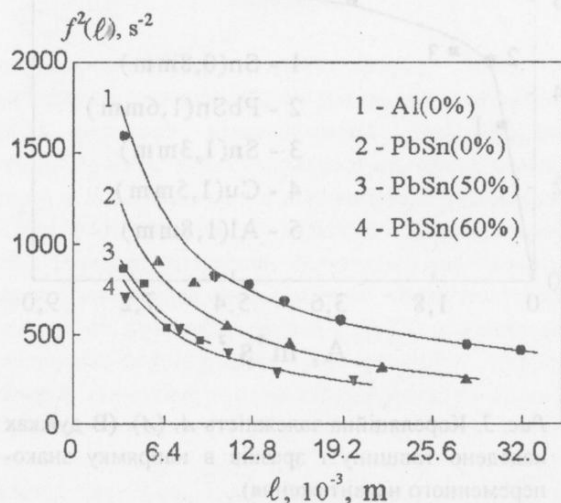


Рис. 2. Залежність квадрату резонансної частоти f^2 згинних коливань зразків сплаву Pb-62%Sn від довжини l частки зразків, що коливається, при різних значеннях відносного видовження зразків $\Delta l/l_0$. (Значення $\Delta l/l_0$ наведено в дужках)

Враховуючи вищевикладене, було проведено вимірювання частоти зразків, що досліджувалися, в залежності від їхньої довжини l . При цьому довжина зразків варіювалася від 3,5 до 32 мм. Відповідна залежність представлена на рис.2.

Як видно з рис.2, резонансна частота f здеформованих зразків є значно нижчою, ніж f вихідного (недеформованого) зразка. Цей експериментальний факт може свідчити про зміну модуля пружності сплаву, що досліджується, в процесі деформування.

Експериментальні криві, що отримано, задовільно апроксимуються наступною залежністю:

$$f^2(l) = A_r l^{-0,68}, \quad (5)$$

де $A_r = 28,6 \text{ м}^{0,68}/\text{с}^2$ для зразка з $\Delta l/l_0 = 0$; $A_r = 19,8 \text{ м}^{0,68}/\text{с}^2$ для зразка з $\Delta l/l_0 \approx 50\%$; $A_r = 18,5 \text{ м}^{0,68}/\text{с}^2$ для зразка з $\Delta l/l_0 \approx 60\%$. Для порівняння на рис.2 наведено також криву $f^2(l)$ зразка технічного алюмінію.

З метою виконати кількісну оцінку модуля Юнга на основі даних рис. 2, будували кореляційну залежність між експериментально визначеними коефіцієнтами A_r і розрахованими за формулою (3) коефіцієнтами A з використанням еталонів. Таку кореляцію $A_r(A)$ показано на рис.3. По визначеному на основі цієї залежності коефіцієнту A , що відповідає ідеальній ситуації, визначали значення модуля Юнга сплаву в станах, що досліджуються.

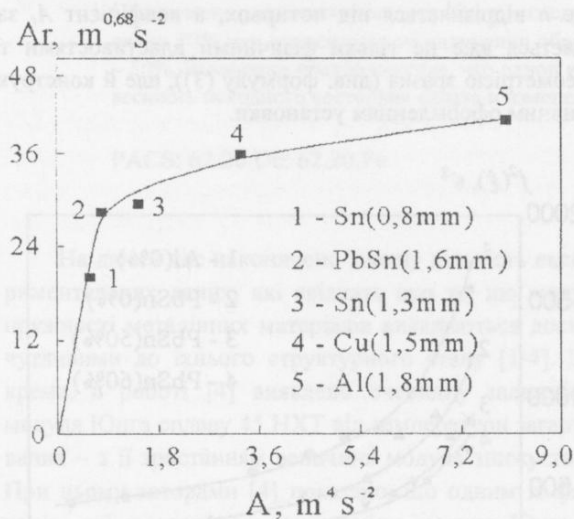


Рис. 3. Кореляційна залежність $A_r(A)$. (В дужках наведено товщину t зразків в напрямку знако-перемінного навантаження).

Модуль Юнга, розрахований таким чином для сплаву у вихідному стані, складає ≈ 25 ГПа ($A_r = 28,6 \text{ м}^{0,68}/\text{с}^2$, $A = 0,8 \text{ м}^4/\text{с}^2$, $\rho = 8,4 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$). Таке значення E задовільно узгоджується з наявними літературними даними про величину модуля Юнга сплавів

досліджуваного типу [1]. Величина модуля Юнга здеформованих зразків, розрахована вищевикладеним чином, виявилася зменшеною на $\sim 10\%$ у випадку зразка, здеформованого на $\sim 60\%$, і на $\sim 7,5\%$ при деформації $\sim 50\%$ у порівнянні з вихідним зразком.

Металографічні дослідження, що було виконано, дозволяють висловити деякі попередні міркування відносно причин, які можуть зумовлювати зниження модуля Юнга сплаву, що спостерігається в експерименті.

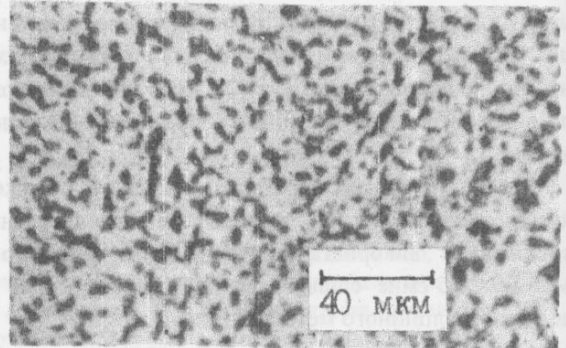


Рис. 4. Мікроструктура сплаву Pb-62%Sn, що досліджується, у вихідному стані.

Як показує аналіз мікроструктури досліджених зразків, яку представлено на рис.4, перед деформуванням сплав перебуває у стані, який не є рівноважним. Про це свідчить, зокрема, об'ємне співвідношення фаз, яке не відповідає діаграмі стану сплаву. Розрахунки, що виконано з використанням даних про розчинність компонентів в фазах [11], а також розрахованих значень рентгенівської густини фазових складових сплаву ($7,286 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ і $11,219 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ відповідно для фаз на основі Sn і Pb), показують, що при кімнатній температурі рівноважним є об'ємне співвідношення фаз, що становить приблизно 2,5:1. Об'ємне ж співвідношення фаз у сплаві, що досліджується, у вихідному стані не перевищує 1,7:1.

В здеформованих зразках виявлено зміну об'ємного співвідношення фаз у напрямку наближення до рівноважного. Спостерігаються також помітний ріст зерен та зміна характеру відносного розподілу зерен кожної з фаз на металографічному шліфі.

Таким чином, однією з причин, які зумовлюють зміну модуля Юнга сплаву, може бути нерівноважність вихідного стану сплаву і зміна його фазового складу в умовах деформування. Про таку зміну фазового складу сплаву свідчать також і результати рентгенівської дифрактометрії зразків.

Експериментальні дані, що отримано у даному дослідженні, є важливими для розуміння природи

структурного стану сплавів, який забезпечує їхню надпластичну поведінку.

1. Б.М. Драпкин, В.К. Кононенко, *Изв. АН СССР, Металлы*, **2**, 162 (1987).
2. Б.М. Драпкин, В.К. Кононенко, *ФММ*, **82**, 119 (1996).
3. Ph. Bompard, Chatenay Malabry, J.Y. Lacroix, Voreppe, and A. Varloteaux, Saint Martin d'Heres, *Aluminium*, **64**, 153 (1988).
4. В.Р. Бараз, В.А. Стримак, Д.Н. Цыкин, *ФММ*, **81**, 94 (1996).
5. А.А. Пресняков, Р.К. Аубакирова, *Сверхпластичность металлических материалов*, Наука, Алма-Ата (1982).
6. В.Ф. Коршак, Р.И. Кузнецова, И.Г. Иванов, *ФММ*, **84**, 123 (1997).
7. Б.И. Шаповал, В.М. Аржавитин, *Внутреннее трение некоторых чистых металлов и композиционных материалов (обзор)*, ЦНИИатоминформ, Москва (1984).
8. В.С. Коваленко, *Металлографические реактивы (Справочник)*, Металлургия, Москва (1981).
9. V.F. Korshak, R.I. Kuznetsova, S.V. Khristoforov, *Met. Phys. Adv. Tech.*, **17**, 189 (1998).
10. С.А. Головин, А. Пушкар, О.М. Левин, *Упругие и неупругие свойства конструкционных металлических*

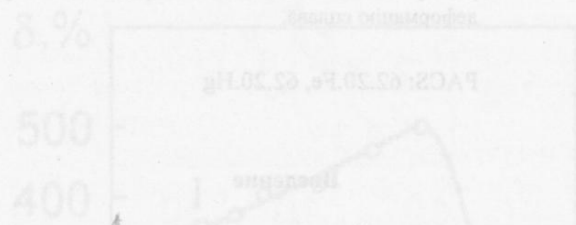
материалов, Металлургия, Москва (1987).

11. М. Хансен, К. Андерко, *Структуры двойных сплавов*, т.2, Металлургиздат, Москва (1962).

The Young modulus change of superplastic alloy Pb-62%Sn under deformation conditions

V.F. Korshak, V.M. Arzhavitin, O.S. Rozumnyi

The peculiarities of the Young Modulus cast with successive pressure of the alloy Pb-62% Sn deformed at room temperature under the creepage condition at stress optimal for superplasticity manifestation were studied. The Young Modulus was determined by means of the curvable oscillations. Decrease in the Young Modulus of the alloy under investigation in the conditions of deformation which is equal to approximately 10% when relative elongation of the samples is ~ 60% or about 7,5% when relative elongation is ~ 50% was found. It was supposed that one of the causes for the Young Modulus decrease may be nonequilibrium of the initial state of the alloy and its phase composition change under conditions of deformation.



Влияние исходной волокнистой структуры на структурную сверхпластичность сплава 1420

В.П. Пойда¹, В.В. Брюховецкий², Р.И. Кузнецова²

¹Харьковский государственный университет,

Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы, 4

²Научно-технический центр электрофизической обработки НАН Украины,

Украина, 310002, г. Харьков, ул. Чернышевского, 28, а/я 8812

Установлены температурно-скоростные условия проявления эффекта структурной сверхпластичности при деформировании в режиме ползучести образцов сплава 1420. Показано, что параметры сверхпластического течения сплава напрямую зависят от направления растяжения образцов по отношению к направлению прокатки полуфабриката сплава. Изучено влияние строчечности в распределении интерметаллидных частиц на сверхпластическую деформацию сплава.

Встановлено температурно-швидкісні умови виявлення ефекту структурної надпластичності при деформуванні у режимі повзучості зразків сплаву 1420. Показано, що параметри надпластичної течії сплава безпосередньо залежать від напрямку розтягу зразків по відношенню до напрямку прокатки напівфабрикату сплава. Вивчено вплив рядковості в розташуванні інтерметалідних часток на надпластичну деформацію сплава.

PACS: 62.20.Fe, 62.20.Hg

Введение

Новые перспективные алюминий-литиевые сплавы, которые имеют по сравнению с традиционно используемыми алюминиевыми сплавами пониженную плотность и повышенные модули упругости, уже находят применение в аэрокосмической и машиностроительных отраслях промышленности [1,2]. Установление физических процессов, развитие которых ответственно за проявление структурной сверхпластичности (ССП) у данных сплавов, а также определение оптимальных температурно-скоростных условий их деформирования и структурных характеристик, влияющих на осуществление сверхпластической деформации (СПД), позволит применять для их обработки современные безотходные технологические процессы, основанные на использовании эффекта SSP [1-3].

В данной работе приведены результаты исследований температурно-скоростных условий проявления эффекта SSP образцов промышленного алюминий-литиевого сплава 1420 и влияния имеющихся в них

волокнистой (фибровой) структуры (металлографической текстуры) и неоднородности в распределении интерметаллидных частиц на показатели СПД.

Материал и методики эксперимента

Сплав 1420 системы Al - Mg - Li разработан академиком И.Н. Фридляндером с сотрудниками. Он содержит (в массовых %) 5,0 - 6,0 % Mg; 1,9 - 2,3 % Li; 0,09 - 0,15 % Zr; 0,1 - 0,3 % Si; $\leq 0,3$ % Fe; 0,1 % Ti; 0,3 % Mn; 0,005 % Na; основа Al [1,2].

В процессе литья, гомогенизации и термомеханической обработки в слитках и полуфабрикатах сплава формируются скопления частиц S-фазы (Al_2LiMg), локализованные на границах дендритных ячеек, колоний субзерен и зерен, вытянутых в направлении преимущественной деформации при прокатке. Для промышленных полуфабрикатов характерно наличие металлографической (механической) текстуры и строчечное распределение интерметаллидных фаз [1,4,5]. Такие особенности морфологии зеренной и фазовой структуры существенно влияют на проч-

ность и пластичность сплава при холодной и горячей пластической деформации [1]. Исходная зёрнистая структура исследуемого прокатанного полуфабриката сплава 1420 также отличается значительной анизотропией (см. рис. 1, а). Зёрна вытянуты в направлении прокатки, а их средний размер в этом направлении составляет 35 - 70 мкм. Это свидетельствует о наличии в сплаве волокнистой (фибровой) структуры. На границах зёрен сосредоточены грубые частицы интерметаллидов, которые, по-видимому, являются S-фазой.

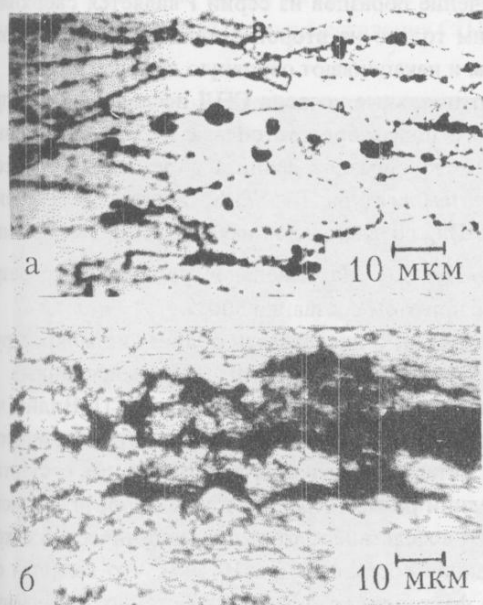


Рис. 1. Микроструктура образцов серии I сплава 1420: а – исходных, б – деформированных в оптимальных условиях ССП до разрушения.

С целью установления влияния исходной волокнистой структуры (металлографической текстуры) и строчечности на проявление эффекта ССП у сплава 1420 и на показатели его сверхпластичности в настоящем исследовании были проведены механические испытания образцов с размерами рабочей части $5,0 \times 3,0 \times 10,0 \text{ мм}^3$, вырезанные из исходного промышленного полуфабриката вдоль направления прокатки (серия I) и поперёк к направлению прокатки (серия II).

Методика проведения механических испытаний образцов на воздухе в режиме ползучести при постоянном действующем напряжении течения σ была такой же как и в [6]. Кривые ползучести записывали автоматически и перестраивали в координатах истинная деформация - время. Зёрнистую структуру, распределение интерметаллидов и морфологию зернограницной несплошности изучали металлографически,

применяя световую микроскопию и стандартные методы количественной металлографии [7].

Ранее сверхпластичность сплава 1420 в условиях активного нагружения исследовалась рядом авторов [8-11]. Однако во всех этих работах ССП сплава реализована на образцах с предварительно подготовленной исходной зёрнистой структурой, а задачи исследования влияния металлографической текстуры и строчечности на показатели ССП не ставились.

Результаты и обсуждение

В [1] указывается на то, что отжиг нерекристаллизованных полуфабрикатов сплава 1420 при температуре $T = 733 \text{ К}$ в течении 40 - 60 минут позволяет обеспечить прохождение статической рекристаллизации, которая полностью устраняет металлографическую текстуру. Отжиг образцов из исследуемого полуфабриката по указанному выше режиму, проведенный в работе, не позволил достичь ожидаемого результата – сформирования однородной ультрамелкозернистой исходной структуры, поэтому ее предполагалось формировать путём динамической рекристаллизации непосредственно в ходе деформирования образцов, как это уже было реализовано ранее и для других сложнoleгированных алюминий-литиевых сплавов [3,12,13].

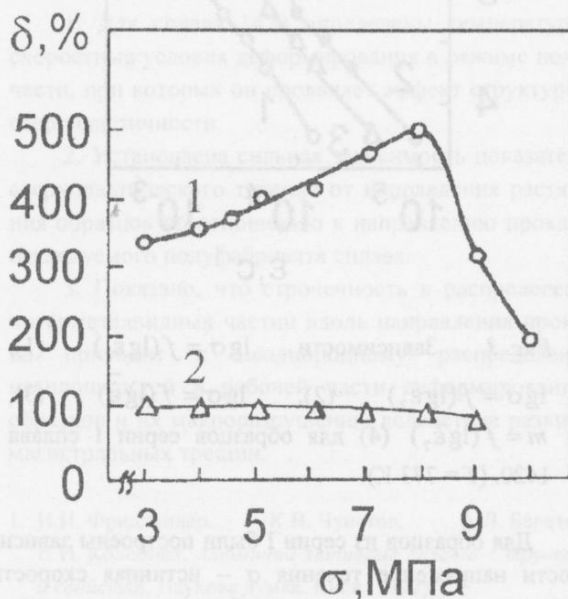


Рис. 2. Зависимость удлинения до разрушения δ от приложенного напряжения течения σ для образцов сплава 1420: 1 – образцы серии I, 2 – образцы серии II. ($T = 773 \text{ К}$)

Механические испытания образцов обеих серий проведены в интервале температур 723 - 793 К и напряжений 2,5 - 9,0 МПа, но максимальную пластич-

ность они проявили при $T = 773$ К. На рис. 2 представлены зависимости удлинения до разрушения δ от приложенного напряжения течения σ для образцов серий I и II. Видно, что образцы из серии II (рис. 2, кривая 2) удлинились до разрушения в ходе течения до степеней деформации равных 90 - 100%, причем δ мало изменяется с изменением σ . Образцы из серии I (рис. 2, кривая 1), напротив, продеформировались к моменту разрушения до более значительных степеней деформации, а зависимость δ от σ для них имеет вид кривой с максимумом, что характерно для ССП [3,8].

Для истинных кривых ползучести образцов серии I характерно наличие двух стадий течения, скорость ползучести которых отличается на порядок. Установлено, что с увеличением σ относительная протяжённость второй стадии ползучести сокращается.

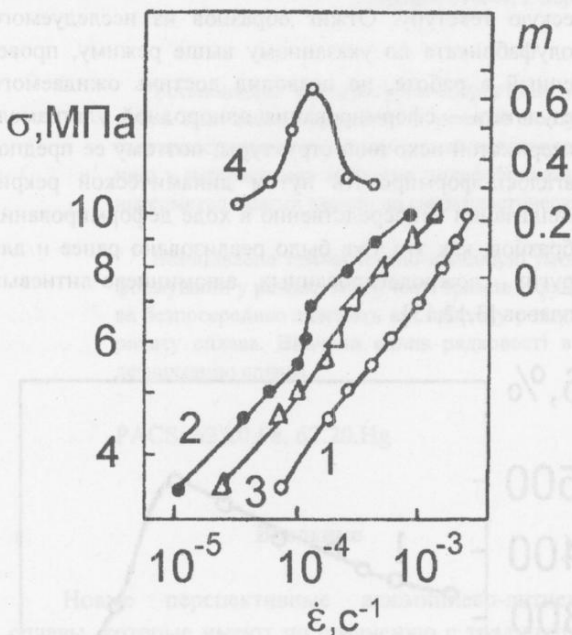


Рис. 3. Зависимости $\lg \sigma = f(\lg \dot{\epsilon}_1)$ (1), $\lg \sigma = f(\lg \dot{\epsilon}_2)$ (2), $\lg \sigma = f(\lg \bar{\epsilon})$ (3), $m = f(\lg \dot{\epsilon}_2)$ (4) для образцов серии I сплава 1420. ($T = 773$ К)

Для образцов из серии I были построены зависимости напряжение течения σ — истинная скорость деформации $\dot{\epsilon}$, которые необходимы для анализа сверхпластических свойств. Использовали среднюю истинную скорость деформации на протяжении всей ползучести образцов $\bar{\epsilon}$ и средние скорости деформации образцов, которые отвечают первой $\dot{\epsilon}_1$ и второй $\dot{\epsilon}_2$ стадиям ползучести. На рис. 3 представлены эти зависимости в логарифмическом масштабе. Видно, что зависимость $\lg \sigma = f(\lg \dot{\epsilon}_2)$ (кривая 2) имеет

наиболее ярко выраженный сигмоидальный вид характерный для ССП [3,8]. При средних скоростях деформации эта зависимость имеет наибольший наклон и точку перегиба, которая отвечает максимальному значению показателя скоростной чувствительности $m = 0,67$ на зависимости $m = f(\lg \dot{\epsilon}_2)$ (рис. 3, кривая 4). Зависимости $\lg \sigma = f(\lg \bar{\epsilon})$ и особенно $\lg \sigma = f(\lg \dot{\epsilon}_1)$ (рис. 3, кривые 3 и 1, соответственно) не имеют ярко выраженного сигмоидального вида, а показатель m для них не превышает 0,3. Таким образом, течение образцов из серии I является сверхпластическим только на второй стадии ползучести, когда образцы и накапливают основную деформацию.

Оптимальные условия СПД исследованного прокатанного полуфабриката сплава 1420 при деформировании его образцов серии I в режиме ползучести таковы: температура $T = 773$ К, напряжение течения $\sigma = 8$ МПа, средняя истинная скорость деформации $\bar{\epsilon} = 4,6 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$. Максимальное удлинение до разрушения δ при этом составило 500%.

На рис. 1, б представлен общий вид микроструктуры образцов сплава 1420, деформированных до разрушения в оптимальных условиях ССП. Видно, что их зёрнистая структура уже полностью рекристаллизована, а металлографическая текстура в них отсутствует. Средний размер зёрен, которые сформировались в образцах вследствие протекания динамической рекристаллизации составляет 6 - 10 мкм, что является одним из факторов, которые способствуют проявлению ССП [3,8].

В структуре разрушенных образцов серии I (см. рис. 1, б) присутствуют макроскопические несплошности. Их образование и развитие может быть связано со следующими обстоятельствами. Так в [14] показано, что пористость у сплавов системы Al - Mg - Li может зарождаться уже во время нагревания образцов на воздухе из-за проникновения в них водорода. Но анализ особенностей распределения макронесплошностей в образцах сплава 1420, деформированных в условиях ССП, дает основание считать, что пористость в них возникает, по-видимому, из-за декогезии между S-фазой и матрицей — твёрдым раствором на основе алюминия. Анализ морфологии пор, которые путем слияния образуют некоторые фрагменты макроскопических несплошностей (см. рис. 1, б) показывает, что они по своему виду похожи на те индивидуальные зернограницные поры, которые развивались в ходе сверхпластического течения других алюминиевых сплавов [6,12,13]. Это даёт основание предположить, что СПД образцов сплава 1420 на мезоуровне осуществляется теми же деформационными механизмами, что и СПД других алюминиевых сплавов [3,6,8,12,13]. Однако наличие строчек интерметалли-

дов в исходных образцах, то есть строчечность структуры, приводит к интенсивному зарождению зерно-границных пор в ходе СПД и их неоднородному распределению по рабочей части образцов и образованию вытянутых вдоль направления растяжения макронесплошностей. Эти макродефекты разбивают рабочую часть образца на макрообъемы, в которых ультрамелкозернистый поликристаллический агрегат, содержащий индивидуальные поры, деформируется сверхпластично, и на макрообъемы, которые из-за того, что они содержат макронесплошности, либо граничат с ними, не имеют на границах и в теле зёрен оптимальных условий для осуществления СПД.

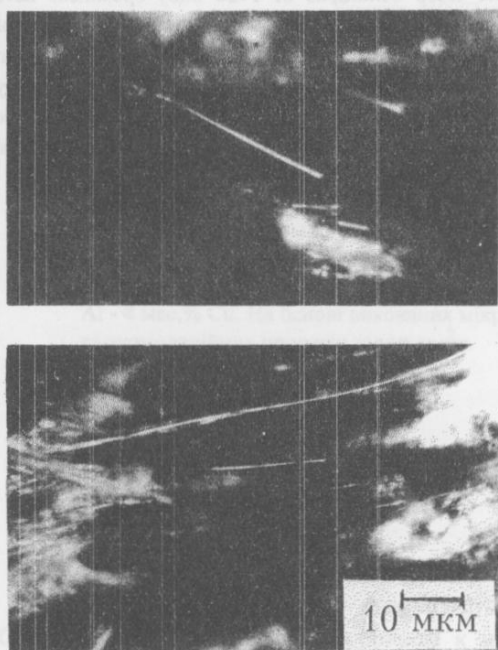


Рис. 4. Характерные формы нитевидных образований в приповерхностных несплошностях.

Для сверхпластического течения характерно интенсивное развитие деформационных и аккомодационных процессов на мезо- и микроуровнях, а образцы при этом устойчивы к образованию макрошейки [3,8,15]. Это позволяет им деформироваться на сотни процентов даже при наличии макронесплошностей в рабочей части.

Лишь только после накопления образцами серии I значительных степеней деформации и развития микротрещин на границах зёрен, перпендикулярных к направлению растяжения, а также на тех, которые составляют с ними углы, близкие к 45° , макронесплошности объединяются и развиваются магистральные трещины, что приводит к макроразрушению образцов.

Облегчённое развитие магистральных трещин по строчкам интерметаллидов на границах зёрен уже на ранних этапах течения образцов из серии II приводит к их преждевременному макроразрушению еще до того, как в них в результате динамической рекристаллизации сформируется ультрамелкое зерно.

Исследование поверхности деформированных образцов серии I на разных этапах их СПД позволило обнаружить в приповерхностных порах и трещинах наличие образований, похожих по своему виду на нитевидные кристаллы (рис. 4), как это наблюдалось авторами впервые при исследовании СПД близкого по составу алюминиево-литиевого сплава 1421 [16]. Средний диаметр этих образований составляет около 2 мкм, а их длина определяется продольным размером приповерхностных несплошностей и может достигать 50 мкм. Причины возникновения, механизмы роста и идентификация этих образований требуют проведения дальнейших исследований.

Таким образом, особенности течения и разрушения образцов обеих серий сплава 1420 в ходе деформирования напрямую связаны с наличием в структуре исследуемого полуфабриката сплава металлографической текстуры и неоднородности в распределении интерметаллидов.

Выводы

1. Для сплава 1420 определены температурно-скоростные условия деформирования в режиме ползучести, при которых он проявляет эффект структурной сверхпластичности.
2. Установлена сильная зависимость показателей сверхпластического течения от направления растяжения образцов по отношению к направлению прокатки исследуемого полуфабриката сплава.
3. Показано, что строчечность в распределении интерметаллидных частиц вдоль направления прокатки приводит к неоднородному распределению несплошностей в рабочей части деформированных образцов и их макроразрушению вследствие развития магистральных трещин.

1. И.Н. Фридляндер, К.В. Чуистов, А.Л. Березина, Н.И. Колобнев, *Алюминий-литиевые сплавы. Структура и свойства*, Наукова думка, Киев (1992).
2. И.Н. Фридляндер, *МіТОМ*, 4, 2 (1990).
3. *Superplastic Forming of Structural Alloys*, ed. by N.E. Paton and C.H. Hamilton, The Metallurgical Society of AIME, San Diego, California, (1982).
4. И.Н. Фридляндер, В.С. Сандлер, Т.И. Никольская, *МіТОМ*, 8, 7 (1982).
5. И.Н. Фридляндер, В.С. Сандлер, *МіТОМ*, 8, 28 (1988).
6. В.П. Пойда, Р.И. Кузнецова, Н.К. Ценев и др., *Металлофизика*, 12, 44 (1990).

7. С.А. Салтыков, *Стереометрическая металлография*, Металлургия, Москва (1976).
8. О.А. Кайбышев, *Сверхпластичность промышленных сплавов*, Металлургия, Москва (1984).
9. И.Н. Фридляндер, Е.В. Эхина, Т.М. Куныаская, В.Л. Ликин, *МТМ*, 2, 62 (1985).
10. И.И. Новиков, В.К. Портной, И.Л. Константинов, Н.И. Колобнев, *Металловедение алюминиевых сплавов*, Наука, Москва (1985).
11. I.N. Fridlyander, N.I. Kolobnev, L.V. Khokhlatova, E.Yu. Semyonova, *Aluminium*, 5, 21 (1990).
12. В.П. Пойда, В.В. Брюховецкий, Р.И. Кузнецова и др., *Функциональные материалы*, 2, 523 (1995).
13. В.П. Пойда, В.В. Брюховецкий, Р.И. Кузнецова и др., *МФНТ*, 18, 49 (1996).
14. И.Н. Фридляндер, В.С. Сандлер, В.И. Лукин, *МТМ*, 2, 38 (1991).
15. R.I. Kuznetsova, V.P. Pojda, T.F. Sukhova, in: *Phys. in Ukraine: Int. Conf., Proc. Contr. Papers: Solid State Physics*, Kiev (1993), p.139.

16. В.В. Брюховецкий, В.П. Пойда, Р.И. Кузнецова, в сб. Тез. докл. XXXII семинара "Актуальные проблемы прочности", С.-Петербург (1996), с.15.

The influence of initial fibred structure on the structural superplasticity of the 1420 alloy

V.P. Pojda, V.V. Bryukhovetsky,
R.I. Kuznetsova

The temperature and deformation speed conditions of structural superplasticity effect during deformation under creep conditions of 1420 alloy specimens have been determined. It has been shown that the parameters of superplastic flow are directly dependent on the direction of specimens' tensile in respect to the direction of alloy rolling. The influence of the distribution of intermetallide particles on superplastic deformation of alloy has been studied.

Высокоскоростная сверхпластичность крупнозернистого сплава Al - 4 мас.% Cu

В.В. Брюховецкий¹, В.П. Пойда², Р.И. Кузнецова¹, В.М. Андронов²

¹Научно-технический центр электрофизической обработки НАН Украины,
Украина, 310002, г. Харьков, ул. Чернышевского, 28, а/я 8812

²Харьковский государственный университет,
Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы, 4

Приводятся данные об условиях проявления высокоскоростной сверхпластичности в крупнозернистом сплаве Al - 4 мас.% Cu. На основе выполненных микроструктурных исследований изучены особенности деформационных и аккомодационных процессов в этих условиях.

Наведено дані про умови виявлення високошвидкісної надпластичності в крупнозернистому сплаві Al - 4 мас.% Cu. На основі виконаних микроструктурних досліджень вивчені особливості деформаційних та акомодационних процесів за цих умов.

PACS: 62.20.Fe, 62.20.Hg

Введение

Показатели структурной сверхпластичности (ССП) (скорость деформации, удлинение к моменту разрушения) очень чувствительны к такому структурному фактору как размер зерна, уменьшение которого приводит к существенному увеличению скорости сверхпластической деформации (СПД). Однако даже при размере зерна порядка 1 мкм эти скорости лежат в интервале 10^{-4} - 10^{-3} с⁻¹, то есть малы, что является одной из причин, сдерживающих внедрение технологий, основанных на использовании эффекта СПП. В связи с этим особый интерес представляют сообщения [1-3] о проявлении высокоскоростной сверхпластичности (ВСП), которая протекает при скоростях, больших чем 10^{-1} с⁻¹, то есть сравнимых со скоростями, характерными для обычной горячей деформации. Поиск путей повышения скорости СПД традиционно лежит в получении равноосной стабильной ультрамелкозернистой структуры. Однако в [4] указывается на то, что повышение скорости деформации при определённых условиях может достигаться и за счет увеличения размера зерна.

Результаты эксперимента и их обсуждение

В настоящем сообщении изложены результаты экспериментов, направленных на поиск условий проявления ВСП в крупнозернистом сплаве Al - 4 мас.% Cu.

Ранее [5,6] СПП этого сплава была обнаружена при температуре 803 К и напряжении течения 5,5 МПа. Литой сплав был изготовлен из алюминия чистотой 99,99% и бескислородной меди такой же чистоты со скоростью роста твёрдой фазы при кристаллизации 3 - 5 мм/с. Зёрнистая структура сплава формировалась предварительной обработкой, включающей холодную деформацию слитков со степенью обжатия 50 - 65% и двухступенчатый отжиг образцов при температурах 423 К (20 мин) и 803 К (15 мин). Совокупность описанных операций обработки позволяла создать в образцах близкую к равноосной структуру основной фазы - твёрдого раствора на основе алюминия с размером зерна 75 ± 5 мкм, которое в ходе СПД возрастало до 140 ± 5 мкм. При деформировании образцов с таким структурным состоянием оптимальная скорость СПД составила $3,5 \cdot 10^{-4}$ с⁻¹, а максимальное удлинение до разрушения 220%. Вид деформационного рельефа образцов, наблюдаемый в этом случае, приведен на рис. 1, а. Установлено [5],

что основным механизмом деформации сплава является зернограничное проскальзывание (ЗГП), вклад которого в деформацию в оптимальных условиях ССП составляет $53 \pm 4\%$.

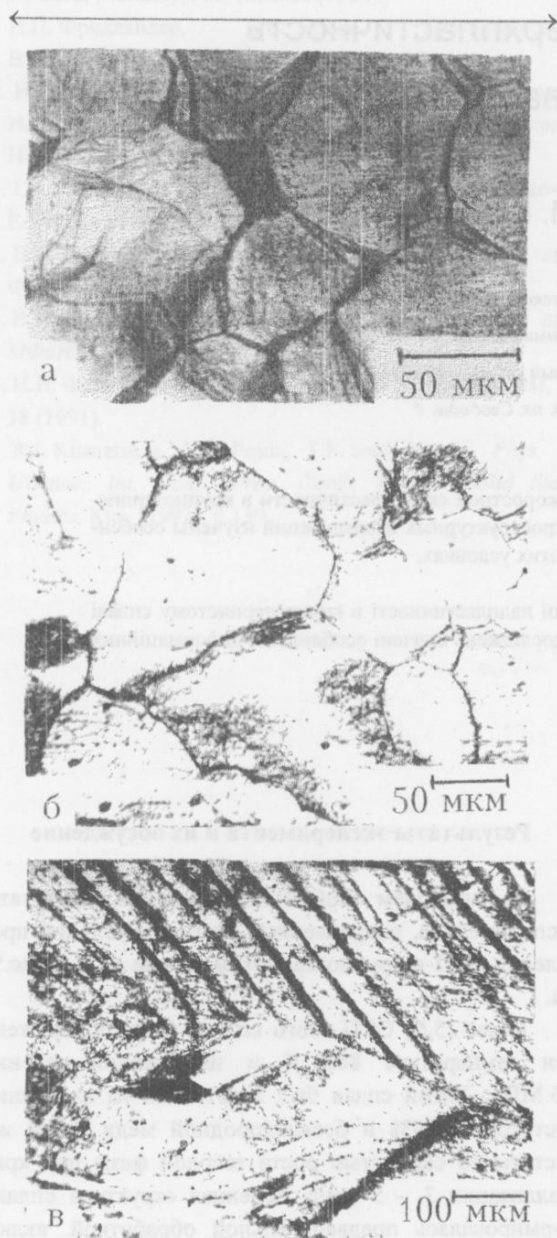


Рис. 1. Деформационный рельеф и микроструктура образцов сплава Al - 4 мас.% Cu:

а) деформационный рельеф образца сплава Al - 4 мас.% Cu, деформированного в оптимальных условиях ССП;

б) микроструктура образца сплава Al - 4 мас.% Cu, подогретого до температуры испытания;

в) деформационный рельеф локального участка образца сплава Al - 4 мас.% Cu, проявившего ВСП.

Направления растяжения указано стрелкой.

Схема получения и обработки образцов сплава Al - 4 мас.% Cu, которые исследовались на предмет проявления у них ВСП, была аналогична описанной выше, однако она исключает проведение двухступенчатого отжига. Нагрев холоднодеформированных образцов без промежуточных отжигов сразу до температуры испытания, который осуществляли за 20 минут, приводит к образованию в них неравновесной разноразмерной структуры со средним размером зерна 0,1 мм, вид которой показан на рис. 1, б.

Механические испытания в настоящем исследовании, как и в [5,6], проведены в режиме ползучести при постоянном действующем напряжении. Температура испытания образцов 803 К и напряжение течения 5,5 МПа соответствовали оптимальным условиям ССП данного сплава [5]. Образцы нагружали сразу же после их нагрева до температуры испытания. Была зафиксирована высокая скорость деформации, составившая $0,5 \text{ с}^{-1}$. Она на три порядка выше той, которая была оптимальной в случае проявления ССП этим сплавом. Удлинение образцов до разрушения достигало 200%.

Высокое значение скорости деформации указывает на то, что для исследуемого крупнозернистого сплава реализована ВСП, ранее наблюдавшаяся только для ультрамелкозернистых материалов. Учитывая, что условия испытаний в обоих случаях были одинаковыми, можно предположить, что проявление ВСП связано с особым состоянием структуры сплава к моменту начала деформирования и с особенностями действующих механизмов деформации в этих условиях.

Принимая во внимание то, что слитки исследуемого сплава, проявившего ВСП, затвердевали с высокой скоростью кристаллизации и их состав близок по концентрации к предельной растворимости меди в алюминии при эвтектической температуре, а двухступенчатый отжиг образцов не производился, можно в этом случае ожидать проявления ликвационных эффектов более ярко выраженных, чем в образцах, проявивших ССП. Структурное состояние образцов, проявивших ВСП, более неравновесно, и в них возможно наличие на границах зёрен эвтектики с температурой плавления 821 К.

На рис. 1, в приведена микрофотография деформационного рельефа поверхности образца сплава Al - 4 мас.% Cu в зоне, где локальная деформация составила 100% при общей по образцу 60%. В этой зоне зерна сильно вытянуты вдоль направления растяжения, а их средний размер достигает 1 мм. Топографические исследования особенностей деформационного рельефа показывают, что в условиях ВСП осуществляются следующие процессы: ЗГП, приводящее к выявлению межзёренных границ и раскрытию зернограничных пор; миграция границ зёрен; ак-

тивное внутризеренное дислокационное скольжение (ВДС), наиболее ярко выраженное в локальных участках рабочей части образца, содержащих огрубленные зёрна; вращение некоторых зёрен, связанное, по-видимому, с ротационными модами пластической деформации. Именно в этих локальных участках образца реализуется повышенная деформируемость агрегата. Характер микрорельефа поверхности образца свидетельствует о том, что ВДС в каждом из зёрен происходит преимущественно по одной системе скольжения, а полосы скольжения, которые распространяются от границы к границе через все зерно, не пересекая границу, равномерно распределены по поверхности зёрен независимо от того, выходят ли они на границы зёрен или на поверхность поры, открывшейся в результате ЗГП. Полосы скольжения ориентированы под углом приблизительно 45° к направлению растяжения образцов.

Известно [7], что при деформировании образцов в условиях ССП главным деформационным механизмом является ЗГП, а внутризеренная деформация, миграция границ, образование пор и локализованная деформация у стыков зёрен в виде "складок" – это основные аккомодационные процессы, способствующие интенсивному ЗГП. Вид деформационного рельефа образца, деформированного в условиях ВСП (рис. 1, в), свидетельствует о том, что ВСП, как и ССП, является сложным деформационным процессом, в котором проявляется действие совокупности нескольких механизмов пластического течения, действующих самосогласованно. Однако в отличие от ССП для ВСП важную роль в её осуществлении играют внутризеренные деформационные процессы в виде ВДС, которое, по-видимому, дает основной вклад в скорость деформации.

Наблюдаемый в сплаве Al - 4 мас.% Cu эффект ВСП может быть, таким образом, обусловлен одновременным действием ЗГП и активного дислокационного скольжения в зёрнах, направленного на развитие деформации в направлении растяжения, а не на аккомодационные процессы в зёрнах, как это наблюдается в случае ССП [7]. Особенности деформационного рельефа поверхности образца, деформированного в условиях ВСП, свидетельствуют о том, что дислокационное скольжение в зёрнах в этих условиях может проходить в соответствии с моделью нестабильного пластического течения, предложенной в [8] и действующей на основе взаимосвязанного функционирования двух механизмов: трансляционного скольжения и упругопластических поворотов кристалла, которые носят ненаправленный характер.

Обращаясь к вопросу об особом состоянии границ зёрен, в дополнение к представлениям об активизированном состоянии границ зёрен в условиях ССП [7], применительно к рассматриваемому случаю про-

явления ВСП следует отметить следующее. Температура, при которой реализована ВСП для сплава Al - 4 мас.% Cu, близка к температуре его плавления $T_{пл}$ и составляет $0,96 T_{пл}$ по отношению к равновесной температуре солидуса и $0,98 T_{пл}$ по отношению к температуре эвтектики. В этих условиях в локальных участках границ зёрен, где наиболее активно развиваются деформационные процессы и создаются большие искажения структуры, а особенно в местах, содержащих эвтектическую составляющую, по-видимому, возможны подплавы [9-11]. Такими местами могут быть и выходы на границу полос скольжения, в которых внутризеренная деформация развивается наиболее активно. Отсутствие микротрещин у выхода полос скольжения на границу и то, что последние не инициируют скольжения в соседних зёрнах, свидетельствует о том, что границы зёрен в условиях ВСП являются структурным элементом, в котором интенсивно происходят релаксационные процессы. Подплавы в локальных местах на границах могут играть эффективную роль в этих процессах, частично снимая высокие перенапряжения, возникающие при деформации. Последующая кристаллизация этих участков способствует сохранению целостности объекта. Границы зёрен в таком перманентном состоянии, характеризующемся чередованием актов подплавов и кристаллизации, по-видимому, способны к легкому проскальзыванию и не препятствуют развитию внутризеренной деформации, которая в этом случае может развиваться в зёрнах по одной наиболее благоприятной системе скольжения по типу синглетного скольжения в монокристаллах. При этом ВДС играет определяющую роль в деформационных процессах, а ЗГП, миграция границ и упругопластические повороты зёрен выполняют скорее аккомодационную роль.

Высказанные соображения, по-видимому, относятся не только к объяснению причин проявления ВСП у крупнозернистого сплава Al - 4 мас.% Cu, но и к объяснению одной из возможных причин проявления этого эффекта в мелкозернистых сплавах на основе алюминия [1-3], тем более, что процессы плавления на границах зёрен в ходе ВСП мелкозернистых сплавов уже экспериментально зафиксированы в работе [12]. По-видимому, наличие небольшой доли жидкой фазы на границах зёрен во время деформации является одним из условий, выполнение которых необходимо для проявления эффекта ВСП.

Важную роль в обеспечении особого состояния границ зёрен в условиях ВСП в сплаве Al - 4 мас.% Cu может играть и то, что в нем в ходе течения активно идут процессы фазового превращения на межфазных границах, приводящие к растворению фазы $CuAl_2$ и переходу атомов меди в твёрдый раствор на основе алюминия. Таким образом, высокоскоростной сверх-

пластичности неравновесного сплава Al - 4 мас.% Cu могут быть присущи в некоторой мере и черты СП при фазовом превращении, для которой наличие и реализация фазового превращения в ходе деформирования являются главным фактором её проявления.

1. И.И. Новиков, *Металлург*, 7, 16 (1993).
2. T.G. Nieh, P.S. Gilman, J. Wadsworth, *Scripta Met.*, 19, 1375 (1985).
3. T.R. Bieler, A.K. Mukherjee, *Mater. Sci. Eng.*, A128, 171 (1990).
4. В.М. Розенберг, *Ползучесть металлов*, Металлургия, Москва (1967).
5. Р.И. Кузнецова, В.П. Пойда, Л.М. Летяго, С.А. Бахарев, *ФММ*, 54, 1183 (1982).
6. В.П. Пойда, Р.И. Кузнецова, А.С. Шапран, *ВАНТ. Серия ФРП и РМ*, 3(36), 47 (1985).
7. О.А. Кайбышев, *Сверхпластичность промышленных сплавов*, Металлургия, Москва (1984).
8. В.М. Андронов, А.М. Гвоздилов, *Изв. АН. Сер. физ.*, 57,

120 (1993).

9. В.Н. Перевезенцев, *ФММ*, 83, 77 (1997).
10. Ю.С. Нечасев, *ФХОМ*, 5, 144 (1992).
11. А.А. Телегин, *Физика прочности и пластичности*, Самара, 148 (1995).
12. J. Koike, M. Mabuchi, K. Higashi, *Acta Met. Mater.*, 43, 195 (1995).

Superplasticity at High Strain Rates of Coarse-Grained Al - 4 wt.% Cu Alloy

V.V. Bryukhovetsky, V.P. Pojda,
R.I. Kuznetsova, V.M. Andronov

The data on the conditions of discovery of the coarse-grained Al - 4 wt.% Cu alloy superplasticity at high strain rates are presented. The features of deformation and accommodation processes in these conditions are studied on the basis of the microstructural investigation performed.