

# ВЕСТНИК ОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

## HERALD OF OMSK UNIVERSITY

Ежеквартальный  
научный журнал  
ОСНОВАН В 1996 г.

**2009. № 2**  
**(52)**

Quarterly  
academic periodical  
FOUNDED IN 1996

### *Редакционный совет* *Editorial board*

Г.Д. Адеев (G.D. Adeev), д-р физ.-мат. наук, профессор  
Г.И. Геринг (G.I. Gering, chairman), д-р физ.-мат. наук, профессор, председатель  
В.И. Вершинин (V.I. Vershinin), д-р хим. наук, профессор  
Л.А. Еловиков (L.A. Elovikov), канд. экон. наук, профессор  
А.И. Казанник (A.I. Kazannik), д-р юрид. наук, профессор  
Е.И. Лавров (E.I. Lavrov), д-р экон. наук, профессор  
Б.И. Осипов (B.I. Osipov), д-р филол. наук, профессор  
А.В. Ремнев (A.V. Remnev), д-р ист. наук, профессор  
В.И. Струнин (V.I. Strunin, vicechairman), д-р физ.-мат. наук, профессор, зам.  
председателя  
Н.А. Томилов (N.A. Tomilov), д-р ист. наук, профессор  
К.Н. Югай (K.N. Yugay), д-р физ.-мат. наук, профессор

### *Редколлегия журнала* *Editorial staff*

Ю.В. Балакин (Yu.V. Balakin), канд. ист. наук, доцент  
С.П. Бычков (S.P. Bychkov, executive editor), канд. ист. наук, доцент, отв.  
секретарь  
В.И. Вершинин (V.I. Vershinin), д-р хим. наук, профессор  
В.В. Дубицкий (V.V. Dubitsky), д-р социол. наук, профессор  
Г.А. Мухина (G.A. Mukhina), канд. ист. наук, доцент  
Е.Л. Невзгодина (E.L. Nevzgodina), канд. юрид. наук, профессор  
Н.В. Орлова (N.V. Orlova), д-р филол. наук, профессор  
В.С. Половинко (V.S. Polovinko), д-р экон. наук, профессор  
А.В. Ремнев (A.V. Remnev, editor in chief), д-р ист. наук, профессор, гл. редактор  
В.А. Романьков (V.A. Romankov), д-р физ.-мат. наук, профессор  
Н.А. Семиколенова (N.A. Semikolenova), д-р физ.-мат. наук, профессор  
В.И. Филатов (V.I. Filatov), д-р филос. наук, профессор  
В.М. Шкарупа (V.M. Shkarupa), канд. филос. наук, доцент  
К.Н. Югай (K.N. Yugay), д-р физ.-мат. наук, профессор

*Адрес редакции:* 644077,  
Омск-77, пр. Мира, 55а, ОмГУ  
тел. –(tel.) (3812) 64-88-28  
[vestnik@omsu.omskreg.ru](mailto:vestnik@omsu.omskreg.ru)

*Editorial office:* 644077,  
Omsk-77, pr. Mira, 55a, OmSU

Редактор *О.М. Азеева*  
Технический редактор  
*Н.С. Серолян*  
Дизайн обложки *З.Н. Образовой*

Свидетельство о регистрации  
ПИ № 77-13169 от 22 июля 2002 г.

Подписной каталог «Газеты.  
Журналы». Индекс 53087.

Издательство ОмГУ  
им. Ф.М. Достоевского  
644077, Омск-77, пр. Мира, 55а

Подписано в печать 29.06.2009 .  
Ризография. Формат 60x84 1/8.  
Усл. п. л. 22,3. Печ. л. 24,0.  
Уч.-изд. л. 21,6.  
Тираж 1000 (1 завод – 200 экз.).  
Заказ 299.

Отпечатано в типографии  
издательства ОмГУ  
им. Ф.М. Достоевского

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>В.М. Шкарупа.</b> Философская рубрика в журнале – статистический ретровзгляд на пятьдесят вышедших номеров.....	8
<b>ФИЛОСОФИЯ</b>	
<b>В.Н. Типухин.</b> Триадиическая формула разума.....	14
<b>Т.И. Чупахина.</b> Музыкально-философские откровения скрябинской поэмы.....	19
<b>А.Н. Ильин.</b> Мода как тенденция массовой культуры и ее влияние на человеческую субъектность.....	25
<b>МАТЕМАТИКА</b>	
<b>М.Г. Амаглобели, Т.З. Бокелавадзе.</b> Степенные группы. Группы, точные при тензорном пополнении.....	35
<b>А.Н. Кабанов.</b> О скрученной сопряженности элементов нильпотентных алгебр Ли.....	47
<b>Н.В. Перцев, Г.Е. Царегородцева, А.Н. Пичугина.</b> Анализ устойчивости положений равновесия одной модели популяционной динамики.....	50
<b>К.К. Логинов.</b> Математическая модель динамики популяции, развивающейся в нестационарной среде.....	54
<b>И.В. Чирков, М.А. Шевелин.</b> Алгебраические автоморфизмы свободных алгебр Ли.....	58
<b>ФИЗИКА</b>	
<b>В.В. Прудников, П.В. Прудников, В.Ю. Колесников.</b> Численное исследование неравновесного критического поведения сильно неупорядоченной трехмерной XY-модели с линейными дефектами.....	61
<b>В.В. Прудников, М.В. Мамонова, Н.С. Морозов.</b> Теоретическое описание адсорбции ионов переходных металлов на металлических поверхностях с образованием субмонослойных ферромагнитных пленок.....	67
<b>В.В. Прудников, П.В. Прудников, И.А. Калашиников.</b> Теоретико-полевое описание неравновесной критической динамики структурно неупорядоченных систем.....	75
<b>В.В. Прудников, М.В. Мамонова, С.П. Климов, Н.С. Морозов.</b> Исследование влияния эффектов заместительной адсорбции магнитных ионов на процесс образования субмонослойных ферромагнитных пленок на металлических поверхностях.....	81
<b>Г.Л. Бухбиндер, П.Н. Марталлер.</b> Волновой механизм массопереноса в твердых телах при высокоинтенсивных внешних воздействиях.....	88
<b>С.В. Николаев, К.Н. Югай.</b> Центры проскальзывания фазы в сверхпроводящей нанопроволоке.....	95
<b>Н.В. Тиховская, К.Н. Югай.</b> Некоторые проблемы физики наночастиц.....	100
<b>И.В. Тихомиров, К.Н. Югай.</b> Замкнутые вихри Абрикосова в сверхпроводниках второго рода.....	107
<b>К.Н. Югай.</b> Сверхпроводимость и связанные состояния.....	113
<b>К.Н. Югай.</b> Взаимодействие ультракоротких лазерных импульсов с поверхностью: генерация рентгеновского излучения.....	119
<b>МЕДИЦИНСКАЯ БИОФИЗИКА</b>	
<b>В.А. Богданова, Н.А. Давлеткельдеев, А.О. Мельшин, Е.Н. Сидоров.</b> Влияние пространственной корреляции примесных дефектов на спектральную зависимость краевой фотолуминесценции в моно-кристаллах GaAs:Te.....	122
<b>В.А. Богданова, Н.А. Давлеткельдеев, Н.А. Семиколонова, Е.Н. Сидоров.</b> Влияние корреляции в распределении примесных дефектов на параметры связанных плазмон-Lo-фононных мод в монокристаллах GaAs:Te.....	127
<b>Н.А. Давлеткельдеев, М.М. Нукенов, Н.В. Солозуб.</b> Влияние уровня легирования на состав и структурные параметры микродефектов в p+-GaAs.....	132
<b>ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ</b>	
<b>А.В. Мамонов, П.В. Прудников.</b> Модель построения корпоративной информационной системы.....	137
<b>ХИМИЯ</b>	
<b>Л.Н. Адеева, В.Ф. Борбат.</b> Зола ТЭЦ – перспективное сырье для промышленности.....	141
<b>Е.Г. Атавин, А.Я. Стасюк.</b> Геометрическая модель эллиптичности дифракционных картин.....	152
<b>Е.Г. Атавин, О.А. Калайтан, Л.В. Вилков.</b> Исследование структуры и конформационного состава молекул глицеральдегида методами газовой электронографии и квантовой химии.....	155
<b>Л.Н. Адеева, Т.А. Коваленко, В.И. Блинов, О.Н. Семенова, М.В. Тренихин.</b> Исследование состава минеральной части сапропелей.....	160
<b>А.А. Морозов, Г.П. Сагитуллина, Р.С. Сагитуллин.</b> Формальная кинетика и механизм перегруппировки четвертичных солей пиридиния в ароматические амины под действием оснований.....	164

---

<i>А.С. Шелпакова, Е.Н. Масыкова.</i> Применение метода множественной линейной регрессии в спектрофотометрическом анализе смесей витаминов.....	172
<i>А.В. Сырвева, Т.А. Калинина, В.Ф. Борбат, А.М. Сизиков.</i> Влияние состава электролита на образование пероксида водорода и выброс металла при микроразряде на алюминиевом аноде.....	177
<b>ПЕДАГОГИКА И МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ</b>	
<i>Н.А. Ждан, Н.А. Белан, В.И. Вершинин.</i> Формирование представлений о химическом анализе в школьном курсе химии.....	183
<b>НАУЧНАЯ ЖИЗНЬ</b>	
Памяти Надежды Александровны Семиколоеновой.....	188
<i>К.Н. Югай.</i> 6-й Сибирский семинар по сверхпроводимости и смежным проблемам ОКНО–2008.....	189
<b>ЛИТЕРАТУРНАЯ СТРАНИЦА</b>	
<i>Д. Соснов.</i> Стихи.....	191
<i>Сведения об авторах</i> .....	192
<i>Книжные новинки</i> .....	194

## CONTENTS

**V.M. Shkarupa.** Section “Philosophy” in the academic periodical – statistic retrospective view on fifty issues of the magazine. ....8

In this article I give the statistical report of all philosophy papers published in the Omsk university quarterly (*Herald of Omsk university, Vestnik Omskogo universiteta*) of during its twelve and half years after beginning of the publishing activity.

**Key words:** philosophy, philosophical publications, statistics of publications, Omsk philosophers.

### PHILOSOPHY

**V.N. Tipukhin.** Triadic formula of mind. ....14

The major problem of logic is the problem of existence of paradoxes and antinomies. The author suggests triadic formula of dialectic contradiction, permitting to express and investigate paradoxes and antinomies by logical means. Concrete expressions of triad are considered on materials of history of philosophy from antiquity to modernity. In the end it is said that in accordance with triadic formula truth of mind is totality, its unity is antinomic, contradictory; and such antinomies are philosophical categories of the universal, the infinite, the eternal, the absolute.

**Key words:** mind, triad, dialectic contradiction, triadic formula of dialectic contradiction, logical paradoxes, logical antinomies, logical investigation of paradoxes.

**T.I. Chyupakhina.** Musical and philosophical revelation in Scriabin’s poem. ....19

The major problem of logic is the problem of existence of paradoxes and antinomies. The author suggests triadic formula of dialectic contradiction, permitting to express and investigate paradoxes and antinomies by logical means. Concrete expressions of triad are considered on materials of history of philosophy from antiquity to modernity. In the end it is said that in accordance with triadic formula truth of mind is totality, its unity is antinomic, contradictory; and such antinomies are philosophical categories of the universal, the infinite, the eternal, the absolute.

**Key words:** musical philosophy, cosmism, eschatologism, the Silver Age, philosophical revelation, poem, crystal of consciousness, mysticism.

**A.N. Iljin.** Fashion as tendency of mass culture and its influence on human subjectness. ....25

In this article the phenomenon of fashion is analyzed as one of the trend of mass culture. The way fashion influences subjective traits of a personality (the consumer of mass culture) is examined. In conclusion it is stated that influence can be both constructive and destructive. Further more, that author lays special emphasis on the negative impact of fashion on subjectivity.

**Key words:** fashion, advertising, mass culture, subjectness, destructive influence of fashion.

### MATHEMATICS

**M.G. Amaglobeli, T.Z. Bokelavadze.** Power groups. Groups which are accurate at tensor completion .....35

The paper is dedicated to partial A-power groups which are embeddable to their A-tensor completions. The free A-groups and the free A-products are described with usual group-theoretical free constructions.

**Key words:** A-power group, free structures, tensor completion.

**A.N. Kabanov.** On twisted contingency of the elements of nilpotent Lie algebras .....47

The number of  $\mathbb{Z}$ -twisted conjugacy classes is described for every pair of endomorphisms  $\mathbb{Z}$ ; of a finitely generated nilpotent Lie algebra.

**Key words:** population dynamics, time-varying medium, mathematical model, influence of harmful substances.

**N.V. Pertsev, G.E. Tsaregorodtseva, A.N. Pichyugina.** Analysis of stability of equilibrium of one model of population dynamics .....50

The paper is concerned with a mathematical model of isolated population, which is evolving under the influence of harmful substance. Some properties of the model solutions are studied. Stability conditions of steady-states of the model equations are established. The results of computing experiments are presented.

**Key words:** population dynamics, branching process, time-varying medium, Monte Carlo method, Markov process, extinction probability.

**K.K. Loginov.** Mathematical model of population dynamics developing in time-varying medium .....54

Mathematical model of population dynamics developing in time-varying medium is considered. Model equations are described; mathematical expectation and population dispersion are investigated. Results of computing experiment are displayed.

**Key words:** population dynamics, branching process, time-varying medium, Monte Carlo method, Markov process, extinction probability.

**I.V. Chirkov, M.A. Shevelin.** Algebraic automorphism of free Lie algebras .....58

We study one automorphism of free Lie algebra over field of characteristic zero satisfying the algebraic equation of the form  $f(t) = 0$ .

**Key words:** Lie algebra, algebraic automorphism, groups of automorphism.

## PHYSICS

**V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, V.Yu. Kolesnikov.** Computational investigation of nonequilibrium critical behavior of strongly unordered three-dimensional XY- model with line defects.....61

The non-equilibrium critical behaviour of the three-dimensional XY-model with linear-correlated impurities is studied by short-time dynamic method in the range of strong influence of disorder in the samples with  $p=0.60$  spin concentration.

*Key words:* Monte Carlo method, phase transitions and critical phenomena, disordered systems, XY-model, structural extensive defects.

**V.V. Prudnikov, M.V. Mamonova, N.S. Morozov.** Theoretical description of transition metals ion adsorption on metal surfaces with formation of submonolayer ferromagnetic films.....67

At first, the description of influence of the ferromagnetic ordering on submonolayer adsorption of transition metal ions Fe, Co, Ni on cupreous paramagnetic substrate is carried out with the use of the spin-density functional method

*Key words:* surface behaviour, ferromagnetism of thin films, nonactivated adsorption.

**V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, I.A. Kalashnikov.** Field-theory description of nonequilibrium critical dynamics structurally disordered systems.....75

At first, a field-theory description of the non-equilibrium critical dynamics of systems with quenched disorder is carried out in the two-loop approximation directly for three-dimensional systems without the use of the  $\varepsilon$ -expansion

*Key words:* phase transitions and critical phenomena, short time dynamics, renormalization group, disordered systems.

**V.V. Prudnikov, M.V. Mamonova, S.P. Klimov, N.S. Morozov.** Study of influence of substitutive magnetic ion adsorption effects on process of formation of submonolayer ferromagnetic films on metal surfaces.....81

Using the spin-density functional theory the calculation of activated adsorption characteristics of magnetic ions Fe, Co, Ni on cupreous surface is carried out. The effects of reconstruction of substrate surface through mixing of adsorbate ions and ions of surface layer are investigated.

*Key words:* surface behaviour, ferromagnetism of thin films, nonactivated adsorption.

**G.L. Bukhbinder, P.N. Martaller.** Wave mechanism of mass transfer in solid bodies under high-intensity external influence.....88

The mass transfer of the impurity particles from the surface to the bulk of a metal under the influence of the high power particles beams or the laser irradiation is considered within the simple model. It is presumed that the mass transfer occurs simultaneously with the processes of the relaxation of the system to the state of the local equilibrium. It has been shown that for the time  $t \leq \tau_D$ , where  $\tau_D$  is the relaxation time of the diffusion flux to its local equilibrium value, the wave mechanism of the mass transfer dominates over diffusion one. On the base of the considered model assumptions of some experimental results are given.

*Key words:* local-nonequilibrium mass transfer, effect of long-range action, wave mechanism of mass transfer.

**S.V. Nikolaev, K.N. Yugai.** Centers of phase slip in superconducting nanowires.....95

In this article the short review of the basic results of research process phase slipping in superconducting nanowire with a current received by authors is presented. Results are received by numerical integration of the one-dimensional time-dependent Ginzburg-Landau equation. Comparison current-voltage characteristics homogeneous and non-uniform superconducting nanowire is carried out. The regular and chaotic regime in a resistive state are investigated.

*Key words:* superconductivity, Ginsburg-Landau equations, critical current, resistive state, centers of phase slip.

**N.V. Tikhovskaya, K.N. Yugai.** Some problems of nanoparticle physics.....100

In given article some problems of nanoparticle physics, and also methods of their theoretical and numerical research are short considered.

*Key words:* nanocluster, nanoparticle physics, local densities of states, methods of analysis of nanoparticle properties, problems of nanophysics.

**I.V. Tikhomirov, K.N. Yugai.** Abrikosov's closed vortex lines in hard superconductor.....107

The static and dynamical properties of closed Abrikosov vortexes and interplay between closed vortexes and linear ones are studied in this paper. Also state of a second type superconductor with closed vortexes inside near critical temperature  $T_c$  is analyzed in this article.

*Key words:* Abrikosov's line vortex, Abrikosov's closed vortex lines, superconductivity, type II superconductor, magnetic phase diagram of type II superconductors.

**K.N. Yugai.** Superconductivity and bound states.....113

Role of bound states of electrons in creation of Superconductivity is examined. A condition by which a formation of bound state in an effective potential is possible is found. The ground state of the system at the presence of bound states is analyzed.

*Key words:* superconductivity, effective potential, bound state.

**K.N. Yugai.** Interaction of ultrashort laser pulses with surface: generation of X-ray radiation.....119

Interaction mechanism of ultra shot – pico- and femto-second pulses with metal, insulator and semiconductor surfaces is considered. It is shown that the penetration length is defined with pulse duration. A material which is transparent for the long pulses is turned out to be opaque for the ultra shot ones. At that any substances are opaque for the ultra shot pulses and the wave length of radiation does not play an essential role. It is shown that the soft bremsstrahlung X-Ray radiation arises at the same time.

*Key words:* pico- and femto-second laser impulses, pulse duration, penetration depth, soft radiation.

**MEDICAL BIOPHYSICS****V.A. Bogdanova, N.A. Davletkeldeev, A.O. Melshin, E.N. Sidorov.** Influence of spatial correlation of impurity defects on marginal photoluminescence spectrum in single crystals GaAs:Te.....122

The results of investigation of edge photoluminescence spectra at 6÷300 K for series of Czochralski grown tellurium doped gallium arsenide single crystals with free carriers concentration  $n_0=9\cdot 10^{17}-4\cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  are given. The concentration dependences of band gap narrowing and band-tail parameter of the valence band are obtained. The data are interpreted from the point of view of self-organization of the impurity component.

*Key words:* gallium arsenide, heavy doping, marginal photoluminescence, electronic structure, self-organization of impurity defects.

**V.A. Bogdanova, N.A. Davletkeldeev, N.A. Semikolenova, E.N. Sidorov.** Influence of correlation in impurity defects distribution on parameters connected with plasmon-Lo-phonon modes in single crystals GaAs:Te.....127

The results of investigation of the infrared reflectivity spectra for series of Czochralski grown tellurium doped gallium arsenide single crystals with free carriers concentration  $n^0=4\cdot 10^{17}\pm 3\cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  are given. The concentration dependences of phonon and plasmon damping parameters are obtained. The data are interpreted from the point of view of self-organization of the impurity component.

*Key words:* gallium arsenide, heavy doping, spectral reflection, plasmons, phonons, damping, correlation of short-range ordering.

**N.A. Davletkildiev, M.M. Nukenov, N.V. Sologub.** Influence of doping level on microdefect composition and structure parameters in n+-GaAs.....132

Phase composition of the microdefects in GaAs:Te single crystals grown by Czochralski technique with a free carrier density  $n^0=5\cdot 10^{17}+5\cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  was investigated. On the X-ray diffractometry patterns a presence of  $\text{Ga}^2\text{Te}^3$  phase reflections was found. Nonmonotonic dependences of the relative volume fraction and the coherent scattering domain size of  $\text{Ga}^2\text{Te}^3$  on Te doping level are obtained. The possible reasons of change of structural parameters of  $\text{Ga}^2\text{Te}^3$  phase with increase of Te doping level in GaAs:Te are discussed.

*Key words:* gallium arsenide, heavy doping, microdefects, atomic force microscopy, x-ray diffraction, phase composition.

**INFORMATION TECHNOLOGIES****A.V. Mamonov, P.V. Prudnikov.** Construction model of corporate information system.....137

Development of model for corporate information system (CIS) is considered. Applying of CIS to process management at arbitrary organization is presented. An universal open-architectural method is discussed

*Key words:* corporate information system, production control system, open architecture.

**CHEMISTRY****L.N. Adeeva, V.F. Borbat.** Ashes of heating and power plant – perspective raw material for industry.....141

Possible methods of use and processing of ashes of heat power plant are considered in the review. The estimation of existing methods of processing of ashes is carried out from the point of view of depth of processing and ecology.

*Key words:* electron diffraction by gases, primary treatment, diffraction fringes, ellipticity.

**E.G. Atavin, A.I. Stasuk.** Geometrical model of ellipticity of diffraction patterns.....152

The influence of technical inaccuracy in system of “electron beam – photographic plate” over the results of gas electron diffraction experiment was considered.

*Key words:* electron diffraction by gases, primary treatment, diffraction fringes, ellipticity.

**E.G. Atavin, O.A. Kalaytan, L.V. Vilkov.** Glyceraldehyde molecular structure and conformational composition: electron diffraction by gases and quantum chemistry studies.....155

Molecular structure and conformational composition of D-Glyceraldehyde have discussed using Gas electron diffraction and Quantum chemical calculation results. There are five conformers in vapour of Glyceraldehyde quantity by weight 53.1(14)%, 24.1(14)%, 4.30%, 8.70%, 4.80%.

**Key words:** electron diffraction by gases, quantum-chemical calculations, geometrical structure, conformational composition, glyceraldehyde, hydrogen bonds.

**L.N. Adeeva, T.A. Kovalenko, V.I. Blinov, O.N. Semenova, M.V. Trenihin.** Compositional analysis of the mineral part of sapropels.....160

The mineral part of sapropel deposits of the Omsk region was studied with application of chemical and physical methods. The chemical composition of sapropel ashes, mineralogical forms of a finding of basic elements were established.

**Key words:** sapropels, mineral part, chemical and physical analysis techniques

**A.A. Morosov, G.P. Sagitullina, R.S. Sagitullin.** Formal kinetics and base rearrangement of quaternary pyridinium salts into aromatic amines.....164

The transformation of a substituted pyridine salt into an aromatic secondary amine with the sodium hydroxide participation was investigated by the formal kinetics methods. There were established: the first kinetic order of the reaction, temperature factor, activation parameters ( $\Delta H^\ddagger$  and  $\Delta S^\ddagger$ ), interdependence kobs. and NaOH concentration. A kinetic scheme of a mechanism to be included two equilibriums has been put forward and discussed.

**Key words:** kinetics, mechanism, pyridinic ring opening, order of reaction on reagent, rate-limiting step, anamorphosises of kinetic curves, pyridium perchlorate.

**A.S. Shelpakova, E.N. Masyakova.** Application of multiple linear regression technique in spectrophotometric analysis of vitamin mixture.....172

Application of multiple linear regression technique in spectrophotometric analysis of undivided vitamin mixture makes it possible to define 4-6 components with overlapped spectra at the same time. Spectral range optimization leads to lowering of errors and variation coefficients to level of 5 % relatively and less.

**Key words:** spectrophotometric analysis, multiple linear regression technique, organic substances.

**A.V. Syrieva, T.A. Kalinina, V.F. Borbat, A.M. Sizikov.** The influence of electrolyte composition on elaboration of hydrogen peroxide and slopping of metal under microdischarge on aluminic anode.....177

It were studied characteristics of anode microdischarges in tetraboric and carbonate solution. In case of aluminic anode usage is observed the spitting of metal into solution, the concentration of hydrogen peroxide is also observed. The containing of discharge secondary products depends on the electrolyte composition, particularly it depends on the concentration of  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  or  $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$  in the solution. The quantity of produced products in the tetraboric solutions is determined by energy parameter of microdischarges, which depends on the electrolyte concentration. In the carbonate solutions is produced less hydrogen peroxide, because the carbonate ion is an OH-radical scavenger. The dissolution of the porous part of oxide layer in the carbonate solutions results the bigger accumulation of aluminic ion in the solution than by the rupture.

**Key words:** anodic microdischarge, break down, gas-plasma bubble, aluminium, hydrogen peroxide.

#### PEDAGOGY AND METHODS OF TEACHING

**N.A. Zhdan, N.A. Belan, V.I. Vershinin.** Formation of idea of chemical analysis in school chemistry course.....183

New educational standards and manuals of chemistry as the high school discipline demand to form some conceptions about chemical analysis, but this problem is not considered within the limits of traditional methods of teaching chemistry. Corresponding basic notions concerned of school chemistry course are discussed in the article. Recommendations to form the system of general conceptions about analytical methods are presented too.

**Key words:** teaching methodology, school chemistry course, chemical analysis, formation of idea of smth.

#### SCIENTIFIC LIFE

In memory of Nadezhda Aleksandrovna Semikolenova.....188

**K.N. Yugai.** The 6<sup>th</sup> Siberian seminar on superconductivity and related problems OKNO–2008.....189

#### LITERARY PAGE

**D. Sosnov.** Poems.....191

**Information about authors**.....192

**Book novelties**.....194

УДК 111

**В.М. Шкарупа***Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского*

### **ФИЛОСОФСКАЯ РУБРИКА В ЖУРНАЛЕ – СТАТИСТИЧЕСКИЙ РЕТРОВЗГЛЯД НА ПЯТЬДЕСЯТ ВЫШЕДШИХ НОМЕРОВ**

В статье дается статистический обзор всех философских статей, опубликованных в журнале «Вестник Омского университета» в течение двенадцати с половиной лет с начала выхода журнала в свет.

*Ключевые слова:* философия, философские публикации, статистика публикаций, омские философы.

«Вестнику Омского университета» двенадцать с половиной лет. И столько же времени в журнале номер за номером появляется философская рубрика. За эти годы выпущено ни много ни мало – 50 номеров, и самый первый номер, вышедший теперь уже в далеком девяносто шестом, теряется в туманной дымке истории... Первым редактором философского раздела стал доктор философских наук, профессор А.П. Ветошкин, которого сменил на его посту, начиная с четвертого номера (№ 2 за 1997 г.), ваш покорный слуга, автор этих строк.

Дать сколько-нибудь обобщающий обзор всех опубликованных в журнале философских статей, а их за рассматриваемый период было напечатано более полутора сотен, – задача, пожалуй, непосильная не только в силу их огромного количества, но и разнородности как тем, так и самих авторов статей, ведь среди них и студенты, и аспиранты, и кандидаты, и доктора наук, и не только философских (уверен, что в аналогичном положении находятся и редакторы всех других разделов журнала). Поэтому наша цель будет гораздо скромнее – статистически свести воедино данные по всем философским статьям за истекший двенадцати-с-половинолетний период (1996–2008), лишь кратко остановившись на некоторых авторах и статьях.

Обратимся к одному из первых авторов рубрики – тогда кандидату, а ныне доктору философских наук Л.В. Денисовой. В 1996 г. она начала активно работать над докторской диссертацией и ей были необходимы публикации по работе. От меня она узнала, что в университете начал издаваться журнал, приехала в редакцию, сдала статью техническому редактору (уже тогда им была наша бессменная Нателла Сергеевна Серопян) – так появилась вторая по счету философская статья<sup>1</sup> в «Вестнике» [1]. Любовь Владиленовна делится своими впечатлениями о первых номерах: «Оформление, подача материала с первых же номеров вызвали уважение, особенно в сравнении с другими начавшими выходить в ту пору в Омске вузовскими журналами. И это отличие сохраняется до сих пор.



Поэтому у меня вызывает удивление тот факт, что «Вестник Омского университета» до сих пор не «ваковский» журнал, хотя другие этот статус приобрели. Впрочем, – добавила Любовь Владиленовна, – может, это и к лучшему – нет лишнего ажиотажа в публикации статей, и, благодаря этому обстоятельству, журнал может сохранять свою независимость, компетентность и объективность в подборе материала для публикаций».

Итак, что мы имеем на сегодня? Это 50 вышедших номеров «Вестника», в которых 77-ю авторами опубликовано 156 статей по философии<sup>2</sup>, занимающих 699 журнальных страниц общим объемом 70½ печ. л. Приведем теперь сводную таблицу, где представлены авторы всех статей.

Подобной табличной подаче материалов, относящихся к статистике философских публикаций в нашем журнале, необходимо предпослать примечание, касающееся способа статистического подсчета. Если статья написана двумя и более авторами, различающимися местом работы, то приоритет при подсчете количественных показателей остается за ОмГУ (или, соответственно, за Омском); таким образом, в общее количество авторов журнала не попали соавторы-нерезиденты.

Автор	Кол-во статей	Стр.	Тыс. печ. зн.
1	2	3	4
Агальцев А.М.	1	4	17
Александров П.А.	1	5	17
Багно И.Г.	1	4	17
Белоконь Т.Ю.	1	4	16
Бессонов Б.Н.	1	4	17
Большаков Н.Н.	1	4	17
Бондаренко И.А.	2	9	40
Ватолина Ю.В.	4	16	60
Ветров С.В.	2	8	34
Воробьева Е.Ю.	2	7	29
Ворожцов М.В.	1	4	17
Гидлевский А.В.	2	12	62
Грудинин С.Ю.	1	4	16
Гуц А.К.	1	4	17
Денисов С.Ф.	1	5	22
Денисова Л.В.	1	4	16
Дотоль И.В.	1	6	25
Дубина И.Н.	1	6	24
Дубицкий В.В.	1	4	21
Зайцев И.В.	1	4	16
Зенец Н.Г.	2	6	23
Каменских Н.В.	1	4	16
Карловская Н.Н.	1	5	20

Окончание табл.

1	2	3	4
Кислов В.В.	1	4	17
Ковалев С.Н.	1	3	11
Козырев И.	1	4	15
Кольчева С.В.	1	4	17
Константинов Д.В.	1	6	23
Коньшева Т.Ф.	1	4	14
Костарев С.В.	1	4	17
Кребель И.А.	5	19	77
Крикунова Л.П.	1	4	16
Купарашвили М.Д.	11	40	156
Ладынина Т.А.	1	4	17
Лазуткин В.В.	2	9	36
Лебедев А.З.	1	5	22
Максименко Л.А.	1	4	17
Мацакова О.Д.	1	3	11
Медведев С.А.	1	4	17
Мельникова И.В.	2	8	32
Мироненко В.И.	1	4	14
Мисюров Н.Н.	2	7	27
Николаенко Н.М.	2	7	27
Николин В.В.	3	16	69
Николин И.В.	1	4	17
Новгородцев А.Г.	1	3	13
Овсянникова И.А.	1	4	17
Орехов С.И.	2	8	32
Орлова Т.С.	1	4	17
Петров А.А.	5	19	77
Петрова Е.И.	1	4	16
Петросян А.Э.	3	40	166
Плакий Е.Н.	1	4	17
Поздняков Н.К.	1	4	17
Попова А.В.	1	4	13
Разумов В.И.	7	46	173
Разумов М.С.	2	9	35
Рубанцова Т.А.	3	12	49
Савостьянов А.Н.	1	4	16
Сигнаевская О.Р.	1	4	17
Синченко Г.Ч.	7	36	151
Смирнова Е.Н.	2	9	35
Сньчев А.А.	1	4	16
Старникова В.Р.	1	4	17
Типухин В.Н.	3	23	71
Тиховская Н.В.	1	4	18
Федорова Л.Ф.	3	14	56
Филатов В.И.	5	19	79
Черняк Н.А.	4	20	79
Шабатура Л.Н.	1	4	14
Шевляков А.Н.	1	4	17
Шестель В.Я.	1	4	14
Шибкова Т.В.	1	4	17
Шипицына И.В.	1	4	17
Шкарупа В.М.	17	59	244
Щетинина Е.В.	1	5	17
Югай К.Н.	2	13	58
Итого	156	699	2823

А теперь, несколько нарушая обет молчания, данный мною в начале статьи, бегло остановлюсь на трех авторах – В.Н. Типухине, Г.Ч. Синченко и А.Э. Петросяне, мимо которых пройти, как я считаю, невозможно, ибо их статьи представляют собой жемчужины философского раздела нашего журнала.

Начну с самого почтенного и уважаемого омской философской общественностью автора – **Вениамина Николаевича Типухина**, корифея омской философии (даже если смотреть формально, то и по этому критерию он является одним из самых первых авторов нашего журнала). Несмотря на свой солидный возраст – 87 лет (возраст М. Хайдеггера), он продолжает радовать нас своим научным творчеством. Недавно он передал мне свою четвертую статью (в дополнение к табличным данным), которая публикуется в этом номере, – «Триадическая формула разума». Счет опубликованных в журнале Вениамином Николаевичем статей скромнен – всего три статьи. Но зато какие это статьи! Каждая на вес золота, в них средоточие глубокого и пронизательного ума их автора, его эрудиции, умения просто и доходчиво, без излишних словес, коими так часто грешат многие авторы, писать о сложных философских проблемах.

Его первая статья [10], совсем небольшая по объему, была подготовлена на основе доклада, читанного им 31 марта 1996 г. на научно-теоретическом семинаре Омского межвузовского философского клуба, посвященного 400-летию со дня рождения Рене Декарта. Исходя из того, что «непосредственное единство мышления и бытия выражает определенность мыслящей субстанции» [10, с. 36], В.Н. Типухин подвергает логическому анализу знаменитое изречение Декарта «мысля, следовательно, существую» (которое в латинском оригинале – *cogito ergo sum* – ныне красуется на эмблеме философского факультета Московского университета), вскрывая существенные логические определенности *cogito*. Этот анализ базируется на идеях, изложенных им в фундаментальном труде «Тотальность логического» [20], написание которого ушло 20 лет его жизни: «Сущность тотальности логического состоит в том, что все определенности в ней имплицитно содержат в себе формы противоположности или отрицания и каждая

логическая определенность необходимо имеет соответствующие ей онтологические эквиваленты» [10, с. 37].

Во второй своей статье Вениамин Николаевич рассматривает проблему начала, являющуюся одной из проблем логики, – какую категорию считать исходной при построении философской категориальной системы. Отталкиваясь от философии Гегеля «то, что начинается, уже *есть*, но в такой же мере также его еще *нет*», В.Н. Типухин приходит к выводу, что исходной логической категорией не может быть ни *бытие*, ни *небытие* – она должна воплощать собой их неразличное единство, а «таким единством является одна и только одна единственная категория *ничто*» [11, с. 51]. Для проникновения в суть этого, понимания сущности становления, утверждает В.Н. Типухин, необходимо обращение к диалектической логике, ибо логики формальной недостаточно: «Становление антиномично, сущность его противоположностей возникновения и уничтожения невыразима в рассудочных определенностях, для своего понимания она требует диалектического мышления» [11, с. 53].

Третья его статья, «Субъект и субстанция» [8], является самой обширной и требует поистине титанических усилий духа для постижения тех логико-философских глубин, которые таятся буквально на каждой ее странице. Статья помещена не в философском разделе, а в начале номера в качестве обзорной. Существует выражение «настольная книга», а по прочтении этой статьи понимаешь, что должны быть и настольные статьи философа, одной из которых, несомненно, является статья В.Н. Типухина «Субъект и субстанция». В ней дается логический анализ и философски осмысливаются такие важнейшие онтологические категории, как «абсолют», «бытие» и «небытие (ничто)», «начало» и «предел» и, наконец, «субъект» и «субстанция». Стремление логически выразить отношение между субъектом и субстанцией (в предельном случае понимаемой как абсолютный всеобщий субъект) представляет немалую трудность, но «логика может оперировать лишь присутствиями ей логическими формами» [8, с. 26]. Следуя этому принципу, В.Н. Типухин рассматривает (если кратко пробежать по содержанию статьи) фор-

мальное единство субъекта и субстанции, логическую определенность субъекта, а затем и субстанции, их формальную противоположность, формальный синтез и, в заключение, логическую и онтологическую природу противоречия. Логические формы субъекта и субстанции, исследованные В.Н. Типухиным в 2004 г., подтверждают логический принцип тотальности, всесторонне продемонстрированный им в 1991 г. в монографии «Тотальность логического», согласно которому «всякая определенность содержит в себе в снятом виде свое другое и переходит в свою собственную противоположность». «Таким образом, сверхсущее ничто есть Абсолютный субъект возникновения, изменения и уничтожения сущего и тождественный субстанции логический субъект всех категориальных различий и предикатов сущего» [8, с. 36].

Второй автор, на статьях которого хотелось бы остановиться, – **Г.Ч. Синченко**. Он заслуживает не менее пристального внимания и напряженной умственной работы. Как и В.Н. Типухина, Георгия Чонгаровича отличает глубокая любовь (может, лучше сказать, всепоглощающая страсть) к логике, логическому выстраиванию и последовательной терминологической проработке и углублению исследуемой им темы. Все опубликованные работы Г.Ч. Синченко (и не только в нашем журнале) написаны в строгом, логически и стилистически выверенном ключе<sup>3</sup>.

Если в своей первой статье он еще обращается к рассмотрению особенностей стилистики раннего советского философско-правового мышления, то вторая статья посвящена проблеме логической «инкультурации» студента в учебном процессе<sup>4</sup>. Через приобщение к логике человек приобщается к разуму, фундаментальными принципами которого в первом приближении являются объективность и рефлексия. Эта небольшая по объему статья оказалась необычайно емкой в концептуальном и идейном отношении, апофеозом логики и разума. Чтобы читатель мог почувствовать экспрессию и филигранность мысли Г.Ч. Синченко, приведу, может быть, несколько больший, чем полагалось бы, отрывок – вывод, к которому приходит автор в конце статьи: «Разум как высшее внутреннее единство гносиса и этоса может выступать эффективной ме-

тастратегией миропознания и мироотношения лишь по мере его парадоксальной архетипизации в культуре. Воплощением этого парадокса является интеллигент, но не в социологическом смысле слова, а как человек, ни при каких условиях не могущий отказаться от разума (по В.С. Библеру). Личность, для которой разумность стала бы фундаментальным жизненным настроением – сверхзадача школы, однако является азбучной истиной, что такая личность не может быть сфабрикована. Поэтому само образование есть регулярно воспроизводимый, «серийный» парадокс, методическая составляющая которого не имеет смысла, если она не поддерживается решающим «скрытым дополнением» – личностью педагога, выполняющего акты разума в том или ином методически препарированном материале. Такова максимальная, зависящая от педагога предпосылка разумной инкультурации студента, и именно она не может быть прямо «вправлена» в субъективность последнего» [12, с. 50–51].

Таким же образом можно охарактеризовать и первую статью – экспрессивно-терминологической образностью, яркой стилистичностью в подаче материала, неожиданностью и оригинальностью выводов. Так, интересен его подход к характеристике такой в наше время неоднозначной политической фигуры XX в., как В.И. Ленин. Рассматривая интеллектуальный феномен последнего, он приходит к неожиданному выводу, что «мышление Ленина радикально неклассично»: «закрепившееся почти в идиому изречение о политике как искусстве возможного – не только кредо Ленина-политика, но и типологическая характеристика Ленина-мыслителя в том особом смысле, в котором искусство возможного может пониматься как искусство *перевоплощения* невозможного в возможное. За ленинскими теоретическими схемами угадываются контуры новой, лишь сейчас окончательно складывающейся картины мира, в композиционный центр которой наука XX в. помещает неравновесность, нелинейность, случайность, переплетение процессов упорядочивания и разупорядочивания. Только ум с совершенно специфическим ритмическим рисунком мог поставить формационное преобразование «недокапиталистической» России в зави-

симось от редчайшего, случайного стечения обстоятельств; только отлившаяся в *схизматические* стилевые формы философско-политическая мысль могла предвосхитить неклассический туннельный эффект физики микромира, ибо только такая мысль могла допустить, что крестьянство способно ворваться в *слишком* прогрессивную для него пролетарскую революцию, подобно частице, преодолевающей энергетический барьер *вопреки* недостатку кинетической энергии» [13, с. 52].

Следующие три статьи этого автора были посвящены логике написания и правильного оформления диссертации – эта тема необыкновенно актуальна и сейчас<sup>5</sup>.

Своеобразной заменой (если вообще такое сравнение можно считать корректным) Г.Ч. Синченко явилось сотрудничество с третьим рассматриваемым нами автором – **А.Э. Петросяном**. С конца 2006 г. в «Вестнике» регулярно появляются его весомые как по объему, так и по концептуальной значимости статьи, разнотематические по тематике и глубокие по содержанию. На широту интересов и неохватную эрудицию автора указывает то обстоятельство, что его статьи размещались не только в философском разделе, но также в разделах психологии и социологии. Эрудированность и разносторонность А.Э. Петросяна проявляется в его работах, как правило, находящихся на стыке нескольких научных дисциплин (но прежде всего философии). Возможно, этим, а, возможно, также основательностью автора объясняется его детальная проработка всех идей, выдвигаемых и обосновываемых в каждой работе. Поэтому его статьи выглядят так основательно и объемно; они написаны простым, доходчивым языком, логически выверены, в них напрочь отсутствует словесный мусор.

Обращу внимание пытливого читателя на превосходный дуплет его статей, касающихся логического прояснения сути *понятия* [14; 15]. Безусловный интерес также вызовут его работы, посвященные тоталитаризму [16]<sup>6</sup>, конфликтам и путям их разрешения [17], психологии восприятия [18] и слухов [19]<sup>7</sup>.

Я остановился лишь на трех авторах, но именно на тех, с которых, хотелось бы, что-

бы наши начинающие авторы брали пример, а читатели, благодаря им, могли познакомиться с добротным изложением свежих и оригинальных идей в философии и не только в ней.

В заключение приведу интервью с заведующим кафедрой философии, доктором философских наук, профессором В.И. Разумовым<sup>8</sup>: «Я считаю, что философия в лице «Вестника Омского университета» имеет очень серьезный ресурс. Причем отличительной чертой рубрики «Философия», которую много лет возглавляет В.М. Шкарупа, является то, что она стала площадкой для публикаций философов университета, но сюда привлекаются также и философы из других вузов и городов. Сейчас возможности рубрики можно существенно усилить, публикуя обзорные материалы и оригинальные статьи известных философов России, зарубежных философов, с которыми нами установлены прочные творческие контакты. Другим ресурсом является публикация материалов по интеллектуальным событиям, организуемым в университете по направлению философии. Это проведенная в мае этого года Всероссийская научная конференция «Философия и социальная динамика XXI века: проблемы и перспективы» (сообщение о ней и обзор выступлений смотрите в разделе «Научная жизнь». – *V.III*), на 2006/07 гг. запланированы еще две конференции, а также чтения, посвященные 85-летию профессора В.Н. Типухина. Еще одна точка роста – выпуск тематических номеров рубрики с привлечением ведущих специалистов. Кафедра участвует в общеуниверситетских и региональных проектах и начинает брать на себя в университете, в городском интеллектуальном пространстве функцию межпредметной интеграции. Как пример можно привести методологический семинар для докторантов, аспирантов и соискателей, начавший недавно функционировать в ОмГУ. Состоялись два заседания, в которых приняли участие такие ведущие ученые России, как профессора Н.С. Розов из Новосибирска, Ю.М. Резник из Москвы, а также ректор ОмГУ Г.И. Геринг и проректор по научной работе В.И. Струнин».

От себя же добавлю, что активным участником и организатором этого семинара является профессор В.И. Разумов, а также то, что по странному стечению

обстоятельств философская рубрика этого номера (2006. № 3), открывающего собой второе десятилетие существования журнала, оказалась тематической – она посвящена природе времени.

#### ПРИМЕЧАНИЯ

- <sup>1</sup> Первой была статья М.Д. Купарашвили [2].
- <sup>2</sup> В это число не входят материалы, опубликованные в общежурнальной рубрике «Научная жизнь» (в первых номерах – «Хроника»), но, с другой стороны, учтены философские статьи, опубликованные в качестве обзорных [3–8] и отредактированные мною как редактором философского раздела, чем и объясняется численное расхождение с [9], где подсчитаны лишь статьи, опубликованные в философском разделе. Впрочем, замечу, название данной статьи позволяет без больших натяжек учитывать и эти статьи, так как понятие «философская рубрика» нужно трактовать шире, чем понятие «философский раздел».
- <sup>3</sup> Добавлю, что это один из немногих, если не сказать из двух (как, например, А.Э. Петросян) авторов, которых мне как редактору совершенно не приходится править – ни специально-научно, ни орфографически, ни стилистически.
- <sup>4</sup> И не только студента, но также и аспиранта или соискателя в научно-исследовательском процессе.
- <sup>5</sup> На основе цикла этих и других статей (см., напр.: [21]) автором была издана книга по проблемам написания диссертации [22]. К большому сожалению, Г.Ч. Синченко перестал в последнее время сотрудничать с нашим журналом ввиду того, что теперь он сам является главным редактором научного вузовского журнала – «Научного вестника Омской академии МВД России» и на его плечах отныне висит груз проблем и забот, связанных со спецификой издания журнала и хорошо знакомых любому редактору.
- <sup>6</sup> См. также его статью, дополняющую эту работу [23].
- <sup>7</sup> Заинтересовавшись творчеством этого неординарного мыслителя я бы порекомендовал также познакомиться с его трудами, посвященными философии и социологии науки [24–26].
- <sup>8</sup> Интервью было взято в 2006 г., когда первоначально задумывался цикл обзорных статей в связи с десятилетием журнала.

#### ЛИТЕРАТУРА

- Статьи в «Вестнике Омского университета»
- [1] Денисова Л.В. Условия истинности знаний // 1997. Вып. 1. С. 47–50.
  - [2] Купарашвили М.Д. Трансценденталии бессознательного и современный дискурс // 1996. Вып. 2. С. 53–56.

- [3] Синченко Г.Ч. Русское столетие философии права // 1998. Вып. 1. С. 5–13.
  - [4] Николин В.В. Два прошлых России XX века // 1999. Вып. 4. С. 6–12.
  - [5] Югай К.Н. Физика и философия Дзен // 1999. Вып. 4. С. 13–18.
  - [6] Федорова Л.Ф. Процесс становления человека как проблема философской антропологии // 2001. Вып. 2. С. 5–10.
  - [7] Югай К.Н. В поисках идеального человека // 2001. Вып. 3. С. 5–11.
  - [8] Тилухин В.Н. Субъект и субстанция // 2004. Вып. 3. С. 25–37.
  - [9] Ремнев А.В. Пятьдесят номеров «Вестника Омского университета»: опыт ретроспективного анализа // 2008. № 4. С. 4–8.
  - [10] Тилухин В.Н. Логические определенности cogito // 1997. Вып. 2. С. 36–38.
  - [11] Его же. Становление и антистановление // 1999. Вып. 4. С. 51–57.
  - [12] Синченко Г.Ч. Встреча с логикой как встреча с культурой // 1999. Вып. 2. С. 47–51.
  - [13] Его же. Стилистика раннего советского философско-правового мышления. Ленин и Льюис Кэрролл // 1997. Вып. 3. С. 50–54.
  - [14] Петросян А.Э. Архитектоника понятия: существенное или необходимое // 2006. № 4. С. 43–56.
  - [15] Его же. Архитектоника понятия (признаки, связи, валентности) // 2007. № 1. С. 36–51.
  - [16] Его же. Предыстория тоталитаризма // 2007. № 3. С. 50–59.
  - [17] Его же. Гордиевы узлы (конфликты и их разрешение) // 2008. № 3. С. 147–162.
  - [18] Его же. Восприятие как творчество // 2007. № 3. С. 150–167.
  - [19] Его же. В паутине Фамы (Природа слухов, их распространение и социальный резонанс) // 2008. № 3. С. 114–126.
- Другие издания
- [20] Тилухин В.Н. Тотальность логического. Омск, 1991.
  - [21] Синченко Г.Ч. Безличные, неопределенно-личные и личные синтаксические конструкции в речевом поведении диссертанта // Науч. вестн. Ом. Академии МВД России. 2008. № 4. С. 30–34.
  - [22] Его же. Логика диссертации. Омск, 2006, 2008.
  - [23] Петросян А.Э. Предвестие тоталитаризма // Науч. вестн. Ом. Академии МВД России. 2007. № 3.
  - [24] Его же. Управление знаниями // Там же. 2008. № 2. С. 52–62.
  - [25] Его же. В саду расходящихся тропок (Ценностные основания научного творчества). Тверь, 1994.
  - [26] Его же. Ключ к XXI веку (Наука как основа грядущего жизнеустройства). Тверь, 1995.

### ТРИАДИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА РАЗУМА

Важной проблемой логики является проблема существования парадоксов и антиномий. Автором статьи предлагается триадическая формула диалектического противоречия, позволяющая выражать и исследовать парадоксы и антиномии логическими средствами. Рассмотрены конкретные выражения триады на материале истории философии от древности и до современности. В качестве итога утверждается, что в соответствии с триадической формулой истина разума есть тотальность, ее единство антиномично, противоречиво и такими антиномиями являются философские категории сферы всеобщего, бесконечного, вечного и абсолютного.

*Ключевые слова:* разум, триада, диалектическое противоречие, триадическая формула диалектического противоречия, логические парадоксы, логические антиномии, логические исследования парадоксов.

Одной из проблем логики являются парадоксы и антиномии. Они неустранимы, подобно софизмам, которые являются логически ошибочными умозаключениями. Парадоксы и антиномии не являются ошибками, они противоречат основным законам логики и кажутся невыразимыми в логически корректной форме символизмами математической логики.

Триадическая формула диалектического противоречия позволяет выражать и исследовать парадоксы и антиномии логическими средствами. Это следующая формула:

$$(x \wedge \bar{x}) \leftrightarrow (x \rightarrow \bar{x}) \wedge (\bar{x} \rightarrow x) \leftrightarrow (x \leftrightarrow \bar{x}). \quad (1)$$

Сущность триадической формулы диалектического противоречия, которую мы здесь привели, опустив ее вывод, состоит в том, что в первой ее части  $(x \wedge \bar{x})$  выражается единство исключаящих противоположностей, вторая часть – конъюнкция конверсных импликаций  $(x \rightarrow \bar{x}) \wedge (\bar{x} \rightarrow x)$  – содержит единство переходов или превращений каждой противоположности в свое другое, или в свою собственную противоположность, и третья, завершающая часть формулы – эквивалентность противоположностей – выражает взаимообусловленность взаимоисключающих и взаимопологающих противоположностей.

Возьмем один из древнейших, восходящий к Эпимениду (VI в. до н. э.) и Эвбулиду (IV в. до н. э.), парадокс «Лжеца». Современная форма парадокса: «Я лгу». Если мы обозначим он лжет ( $x$ ) и он не лжет ( $\bar{x}$ ), то формула (1) будет выражать сущность парадокса: он лжет и не лжет одновременно, это равносильно тому, что если он лжет, то он не лжет, и если он не лжет, то он лжет, это равносильно тому, что он лжет тогда и только тогда, когда он не лжет. Известная антиномия Б. Рассела о множестве  $M$  всех несамосодержащих множеств также выражается че-

рез указанную формулу. Несамосодержащие множества называются нормальными. Так, множество бегемотов не есть бегемот, а множество абстрактных понятий есть абстрактное понятие. Введем обозначения: обозначим символом  $x$  множество  $M$ , являющееся самосодержащим ( $M \in M$ ), и символом  $\bar{x}$ , являющееся несамосодержащим ( $M \notin M$ ). Сущность антиномии выразится в следующей форме: множество  $M$  является самосодержащим и несамосодержащим, это равносильно тому, что если оно самосодержащее, то оно несамосодержащее, и если оно несамосодержащее, то оно самосодержащее, это равносильно тому, что множество  $M$  самосодержащее, если и только если оно несамосодержащее.

Логика не относит парадоксы и антиномии ни к числу истинных, ни к числу ложных. Кажется, что им нет места в логике. Между тем истинность триадической формулы диалектического противоречия дает основание утверждать, что парадоксы и антиномии являются выра-

жением истины более глубокой, более высокого порядка, а именно истины разума.

Приведем в этой связи еще одно свидетельство. Диалектические противоречия, антиномии и парадоксы представляют собой не только трудности для логики рассудка, они являются выражением мудрости. Как известно, Пифия, жрица храма бога Аполлона в Дельфах, назвала Сократа мудрейшим из людей. Сам Сократ говорил о себе, что он знает, что ничего не знает, и с присущей ему скромностью выражал свое отличие от других людей в том, что они тоже ничего не знают, но воображают, что знают, он же, если не знает, то и не воображает. Таким образом, сущность мудрости Сократа оказывается антиномичной, парадоксальной, диалектически противоречивой.

Диалектическое противоречие принимает форму триады. Основная, более развитая и конкретная триадическая формула диалектического противоречия, или формула триады, в логике высказываний будет следующей:

$$(x \vee \bar{x}) \wedge (x \wedge \bar{x}) \leftrightarrow (x \vee \bar{x} \rightarrow x \wedge \bar{x}) \wedge (x \wedge \bar{x} \rightarrow x \vee \bar{x}) \leftrightarrow (x \vee \bar{x} \leftrightarrow x \wedge \bar{x}), \quad (2)$$

$$\begin{aligned} & \forall x(P(x) \vee \bar{P}(x)) \wedge \exists x(P(x) \wedge \bar{P}(x)) \leftrightarrow \\ & \leftrightarrow [\forall x(P(x) \vee \bar{P}(x)) \rightarrow \exists x(P(x) \wedge \bar{P}(x))] \wedge [\exists x(P(x) \wedge \bar{P}(x)) \rightarrow \forall x(P(x) \vee \bar{P}(x))] \leftrightarrow \\ & \leftrightarrow [\forall x(P(x) \vee \bar{P}(x)) \leftrightarrow (\exists x(P(x) \wedge \bar{P}(x)))] \end{aligned} \quad (3)$$

В ней в первой части выражены основные положения триады, взаимоисключения ( $x \vee \bar{x}$ ), тезиса ( $x$ ) и антитезиса ( $\bar{x}$ ). Это известный логический принцип *tertium non datur* (третьего не дано), и отрицающее этот принцип единство, конъюнкция ( $x \wedge \bar{x}$ ), именно третье, или сама триада, равносильная этому вторая часть, конъюнкция конверсных импликаций, содержит важнейшие определенности диалектического противоречия, взаимоисключение противоположностей влечет или переходит в единство исключаящих противоположностей ( $x \vee \bar{x} \rightarrow x \wedge \bar{x}$ ), и обратная импликация – единство взаимоисключаящих противоположностей – превращается в свою собственную противоположность, взаимоисключение противоположностей ( $x \wedge \bar{x} \rightarrow x \vee \bar{x}$ ); равносильная этому третья завершающая – часть эквивалентность ( $x \vee \bar{x} \leftrightarrow x \wedge \bar{x}$ ) –

выражает взаимообусловленность взаимоисключения и единства противоположностей.

Триадическая формула (2) свидетельствует о том, что традиционная логика, признающая закон исключенного третьего, и логика диалектическая, признающая единство исключаящих противоположностей, находятся в отношении дополнения друг к другу.

Известно, что в логике классов и теории множеств аналогом единства исключаящих противоположностей является произведение класса и его дополнения, нулевой или пустой класс  $A \cap \bar{A}$ , который философски представляет собой определенность ничто, а взаимоисключение противоположностей является аналогом суммы класса и его дополнения  $A \cup \bar{A}$ , представляющей собой определенность универсального класса. Таким образом, первая импликация ( $x \wedge \bar{x} \rightarrow (x \vee \bar{x})$ ) онтологи-

чески выражает превращение ничто в универсум, или возникновение универсума, обратная импликация  $(x \vee \bar{x}) \rightarrow (x \wedge \bar{x})$  выражает превращение универсального класса  $A \cup \bar{A}$  в нулевой класс  $A \cap \bar{A}$ , или противоположный полюс в становлении, превращение универсума в ничто, уничтожение универсума. Следовательно, противоположные импликации выражают возникновение и уничтожение всего конечного.

Аналогом формул (1) и (2) в логике предикатов будет, соответственно, следующая формула:

$$\forall xP(x) \wedge \exists x\bar{P}(x) \leftrightarrow (\forall xP(x) \rightarrow \exists x\bar{P}(x)) \wedge (\exists x\bar{P}(x) \rightarrow \forall xP(x)) \leftrightarrow (\forall xP(x) \leftrightarrow \exists x\bar{P}(x)). \quad (4)$$

В формуле (3) соотносятся лишь контрадикторные противоположности, в формуле (4) представлен диалектический синтез контрадикторных, контрарных и субконтрарных противоположностей. Контрадикторные противоположности являются самыми глубокими противоречиями. Они охватывают качество (положительное и отрицательное), выражаемое предикатами, и количество, представленное кванторами (все)общности и существования. Категория количества, появляющаяся в форме всеобщности, представляет собой синтез единства и множества, а также в форме особенного единства существования и несуществования. Всеобщность есть, в сущности, количественно бесконечное, особенность или то, что может существовать или не существовать, представляет собой конечное. Таким образом, противоречивость содержит в себе отношение противоположностей конечно и бесконечно.

В истории философии триада выражается в общей форме как принцип троичности, лежащий в основе построения философской системы, и в более строгой форме как диалектический синтез тезиса и антитезиса, или взаимоисключающих и взаимополагающих противоположностей. В философии Древней Индии триада появляется в системе веданта, в сущности религии, ставшей философией. Это Брахман, мировой дух, атман, мировая душа, и Пуруша, первочеловек. В Древнем Китае в даосизме триадой является единство трех ипостасей – Дао, дэ и первочеловек Паньгу. Здесь указывается и сам принцип троичности. Единица (Дао) соз-

дала двойку (небо и землю), двойка создала тройку (небо, землю и человека), тройка создала мир [1].

В философии Древней Греции исходной является пифагорейская триада: 1) Бог, монада; 2) Логос, числа; 3) Порожденный космос.

Платоновская триада: 1) Благо; 2) Логос, числа; 3) Мировая душа. С позиций триады Платон рассматривает диалектическое отношение противоположностей единого и многого и выражает их противоречивое единство. «Следовательно, не только существующее единое есть многое, но и единое само по себе, разделенное бытием, представляет собой огромное и беспредельное множество... существующее единое есть, надо полагать, одновременно и единое и многое, и целое и часть, и ограниченное и количественно бесконечное» [2].

В неоплатонизме (Плотин, Прокл) триада включает: 1) Единое, первосущее, сверхсущее, абсолютное, божество; 2) Мировой дух; 3) Мировая душа [3]. В работе Николая Кузанского «Приложение математики к богословию», написанной в 1453 г. и почти неизвестной среди историков мысли, излагается учение о coincidentia oppositorum, т. е. о совпадении в Боге противоположных определений. Совпадение противоположностей – это предвосхищение антиномичности мира, покоящегося, имеющего свое основание в Боге.

В Новое время учение об антиномичности и триаде получило развитие в немецкой классической философии. И. Кант вводит принцип триадичности в изложение категорий. Двенадцать категорий составляют четыре триады, третья категория в каждой из них является синтезом первых двух. Первая триада содержит категории количества: единство, множество, всеобщность. Вторая триада включает категории качества: реальность, отрицание, ограничение. В третьей триаде содержатся категории отношения: субстанция и акциденция, причина и действие, взаимодействие. Категории модальности в четвертой триаде завершают изложение: возможность – невозможность, существование – несуществование, необходимость – случайность. И. Кант обосновал различие между рассудком и разумом. В понятиях и суждениях рассудка выражается конечное и обусловленное.



Идеи разума выражают бесконечное и безусловное. Важнейшим содержанием трансцендентальной диалектики Канта являются антиномии чистого разума. Первые две Кант называет математическими. *Первая антиномия*: конечен мир (тезис) или бесконечен в пространстве и во времени (антитезис). *Вторая антиномия*: сводятся ли сложные субстанции к элементарным, простым (тезис) или не сводятся (антитезис). В этих антиномиях тезис и антитезис ложны, ибо можно доказать как тезис, так и антитезис.

Остальные две антиномии Кант называет динамическими. *Третья антиномия*: царит ли в мире безусловная необходимость (тезис) или возможна и свобода (антитезис). *Четвертая антиномия*: есть ли абсолютно необходимое существо как часть или причина мира (тезис) или нет его (антитезис). В третьей и четвертой антиномиях тезис и антитезис истинны, ибо их нельзя доказать и нельзя опровергнуть [4].

Триада является методологической основой философии И.Г. Фихте. Метод своего наукоучения он называет антитестическим, т. е. содержащим в себе тезис, антитезис и синтез. Синтез рассматривается как объединение взаимоопределяющих противоположностей, содержащихся в тезисе и антитезисе [5].

В философии Ф.В.И. Шеллинга три части ее образуют триаду. 1) Тезис: натурфилософия, выведение духа из природы. 2) Антитезис: система трансцендентального идеализма, выведение природы из духа или из субъективности объективности. 3) Синтез: учение об абсолюте, тождество субъекта и объекта, реального и идеального, конечного и бесконечного.

Наиболее полное и глубокое выражение триада находит в абсолютном идеализме и панлогизме Г.В.Ф. Гегеля. Б. Рассел называет важнейшей чертой системы Гегеля «триадическое движение», называемое «диалектикой». Он пишет: «Философия Гегеля очень трудна. Он, я должен сказать, наиболее труден для понимания из всех великих философов». Рассел признает, что Маркс «был в молодости учеником Гегеля и сохранил в своей системе, в ее окончательном виде некоторые существенные гегелевские черты». Обобщая, Рассел утверждает: «Даже если (как я сам

полагаю) почти все учение Гегеля ложно, оно еще сохраняет значение» [6].

Оставим это негативное высказывание на совести автора. Философия Гегеля не нуждается в защите. Невозможно назвать мыслителя, логика *par excellence*, обладающего глубиной и мощью духа, равносильного Гегелю. Гегель признает наличие трех сторон или ступеней логического. Первой он считает абстрактную или рассудочную. Это традиционная логика. Вторую ступень он называет диалектической или отрицательно разумной, она выражает взаимоисключение противоположностей. Третьей, завершающей ступенью, самой трудной, является единство взаимоисключающих и взаимоположающих противоположностей, раскрывающее сущность триады. Эту сторону и ступень логического Гегель называет положительно разумной, спекулятивной, мистической.

В мистической философии России в этой связи следует привести исследования отца Павла Флоренского. Он делит философские системы на два типа. Одни, рассудочные, не признают триадичности, он называет такую философию рациональной, философией вещи и безжизненной неподвижности. Другие системы являются философией идеи разума. Они признают взаимоисключающее единство противоположностей.

Особую ценность представляют анализируемые П.А. Флоренским теологические антиномии. Антиномия догмата о любви Божией. В ней в сущности догмат о провидении единого Бога и догмат о творении мира Благим Богом, т. е. о даровании человеку собственного и самостоятельного бытия, а следовательно, свободы. Эта антиномия (свободы и необходимости), согласно Ветхому Завету, утверждает П.А. Флоренский, является основой современной науки, вне ее нет науки.

Из других антиномий приведем антиномию «Геенны». Если ты спросишь меня, что же, будут ли вечные муки, то я скажу: «Да», но если ты спросишь меня, будет ли всеобщее восстановление в блаженстве, то опять-таки скажу: «Да». То и другое изложенное здесь удовлетворяет духу и букве Св. Писания, но, будучи внутренне антиномичным, оно требует веры и, безусловно, не укладывается в плоскость рас-

судка. Это ни простое «да», ни простое «нет», это есть и «да», и «нет». Таким образом, это антиномия. Анализ антиномий П.А. Флоренский завершает указанием на «Послание к Римлянам», отмечая, что это самое диалектическое и самое пламенное послание, это разрывная бомба против рассудка, заряженная антиномиями.

П.А. Флоренский приходит к выводу, что Священное Писание и догматы выше плоской рассудочности и, значит, не могли быть придуманы человеком, т. е. они божественны [7].

Таким образом, триадическая формула утверждает, что истина разума есть тотальность. Ее единство антиномично, противоречиво. Такими антиномиями являются философские категории сферы всеобщего, бесконечного, вечного и абсолютного. Так, всеобщий абсолютный

субъект в философии Спинозы и в теологии – Бог – существует свободно, по необходимости его природы, но это уже предмет особого исследования.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Лао Цзы*. Дао дэ цзин. Джан 42.
- [2] *Платон*. Парменид // Соч.: в 3 т. М.: Мысль, 1970. Т. 2. С. 434.
- [3] *Плотин*. О бессмертии души (Энн. IV. 7).
- [4] *Кант И.* Критика чистого разума. СПб., 1907. С. 75.
- [5] *Фихте И.Г.* О понятии наукоучения или так называемой философии // Избр. соч. М.: Путь, 1916. Т. 1. С. 66–203.
- [6] *Рассел Б.* История западной философии. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1999. С. 671.
- [7] *Флоренский П.А.* Столп и утверждение истины. М., 1990–1991. Т. 1–2. С. 157, 255 (2), 278, 475, 505.

### **МУЗЫКАЛЬНО-ФИЛОСОФСКИЕ ОТКРОВЕНИЯ СКРЯБИНСКОЙ ПОЭМЫ**

В статье рассматриваются музыкально-философские воззрения русского композитора А.Н. Скрябина как ярчайшего представителя «серебряного века». В ней раскрывается сложность творческого облика, неординарность мировоззренческих идеалов, обусловленных особенностями общественно-исторической обстановки времени, в которой жил и творил композитор. Дается общая характеристика значительных по масштабу произведений русского гения, из которой следует, что Скрябин как музыкант-философ, поэт-мистик в начале XX в. создал новый тип симфонизма, где идея Софии проявилась в трех основных аспектах: онтолого-космологическом, этико-эстетическом, антропологическом.

*Ключевые слова:* музыкальная философия, космизм, эсхатологизм, серебряный век, философские откровения, поэма, кристалл сознания, мистицизм.

*Музыка жива мыслью.  
А.Н. Скрябин*

Конец XIX – начало XX в. были для русской музыки временем небывалого роста и фантастического, стремительного развития новых направлений, течений, что связано с переоценкой ценностей, переосмотром представлений, утвердившихся в предыдущую эпоху. Созревали иные тенденции, иные эстетические воззрения на искусство, его цели и задачи. Но именно это многообразие и дерзновенный поиск определили особое богатство данного исторического периода. Феномен музыкальной культуры серебряного века интригует многоликостью и взаимосвязанностью всех слагаемых и, соответственно, призывает к конкретному анализу явлений русской музыки. «Мы – дети того и другого века; мы – поколение рубежа», – писал в своих мемуарах Андрей Белый [1, с. 35]. Рубежный характер символистской культуры, дух новизны, накаленность общественной атмосферы периода подъема революционного движения хорошо осознавались представителями русской интеллигенции.

При сравнительно непродолжительном времени эпохи (25 лет), она была на редкость динамичной, заряжена высоким энергетическим потенциалом и оставила нам в наследство во всех областях искусства великолепные образцы. Ощущение времени казалось сжатым и ускоренным, новое врвалось стремительным ураганом и безжалостно сметало старое, отжившее. А.А. Блок, вспоминая своего духовного учителя В.С. Соловьева, спустя десять лет со дня его смерти писал: «Все изменяется; мы стоим перед лицом нового и всемирного. Недаром в промежутке от смерти В.С. Соловьева до сегодняшнего дня

мы пережили то, что другим удается пережить в сто лет; недаром мы видели, как в громах и молниях стихий земных и подземных новый век бросал в землю свои семена; в этом грозном свете нам промечтались и умудрили нас поздней мудростью все века» [2, с. 453].

Немалое воздействие на умы творческой интеллигенции серебряного века оказала идеалистическая философия и эстетика. Большое распространение в России конца XIX столетия получила философия Ф. Ницше, восприятие которой во многом было подготовлено русской философией, в частности идеалистом и богословом В.С. Соловьевым, «конкретным» идеалистом С.Н. Трубецким, представителем русского космизма Н.Ф. Федоровым, мистиком Д.С. Мережковским. Философ и поэт Соловьев утверждал, что истина не может быть познана ни рационально, ни эмпирически, а лишь «мистически», как «цельное» знание. Наряду с философией Ницше философские взгляды Соловьева были одним из истоков эстетики символистов.

Если говорить о русском музыкальном искусстве того периода, то понятие символизма не приобрело широких прав существования, причиной тому явились разные обстоятельства. Символизм в музыкальной эстетике начала XX в. не вылился во всеобщее движение, каким был в литературе, хореографии, театре, живописи. Но русские музыканты находились под очарованием символизма, не манифестируя его, они принимали его, используя и приближаясь к нему через программные названия, программные комментарии, литературные сюжеты, поэтические тексты. Известно, что вокальная лирика и инструментальная музыка в конце 1900 – начале 1910-х гг. вдохновлялась идеями и текстами поэтов-символистов. И все же русская школа композиторов соприкоснулась с символизмом, за исключением Александра Николаевича Скрябина, мимоходом, не приближаясь к нему вплотную.

Итак, самым ярким представителем музыкального выражения времени рубежа веков была фигура крупнейшего русского композитора, талантливого пианиста, мыслителя, поэта-мистика А.Н. Скрябина (1872–1915). Среди своих современников Скрябин выделялся сложностью творческого облика, неординарностью

мировоззренческих идеалов, обусловленных особенностями общественно-исторической обстановки времени, в котором он жил и творил.

Творческий путь композитора-мистика был образцом дерзновенности, служения высоким гуманистическим идеалам, восходящим к пушкинским заветам, несокрушимой веры в силы искусства преобразовать жизнь людей. В.В. Софроницкий так отзывался о творческом наследии композитора: «Жизнь, свет, борьба, воля – вот в чем истинное величие Скрябина» (цит. по: [3, с. 3]). В музыкальной философии Скрябина, в произведениях 90-х гг. XIX в. с большой силой проявляется протест против косности, духовного застоя, порабощения человеческой личности. Скрябина всегда влекло к широким по масштабу замыслам, он мечтал об искусстве, обращенном ко всему человечеству, ко всей Вселенной. Скрябин планомерно исследовал «скрытые пространства» духовной и физической реальности. Создатель «Поэмы огня», «Поэмы экстаза» часто повторял: «Вы не можете себе представить, до какой степени творчество в искусстве есть путь откровения. Это такой же настоящий путь, как всякий «раджа-йога» и другие йоги – только он еще прямее к посвящению... Я почти всему научился у своего творчества. Это – мое откровение и я знаю, что оно столь божественное, как и иное» (цит. по: [4, с. 85]).

Одним из таких «откровений» композитора-мистика было то, что Вселенная ему представлялась как совокупность зеркал – экранов (горизонтов сознания), которые можно было классифицировать по частоте вибрационного фона. «Самосознание человека, – говорил композитор, – не только не идентично телу и личности, но и является главным условием «проявления» мира из тьмы небытия. Оно представляет собой некий нематериальный кристалл, помещенный в центре многомерной сферы мира и отражающий божественный Луч Творения. Иллюзия течения времени вызвана постоянным вращением кристалла. Мир кажется прочным и неизменным, потому что все грани кристалла абсолютно одинаковы» [4, с. 113].

Другим «откровением» Скрябина было постижение структуры тонких миров, находящихся в пространстве и времени. Здесь уместно было бы подчеркнуть, что

композитор имел в виду не физические, а созерцательные путешествия. Созерцание иных миров, по Скрябину, связано с «кристаллом сознания». В своих произведениях он как будто заколдовывает время, пытаясь его ускорить, посредством изменения агогики (темповых сдвигов), ритма и ритмоформул. Конечно, целью скрябинских «путешествий сознания» в другие реальности (миры) было конструирование универсального «кристалла гармонии», способного преобразовать мир. Глубокими и спасительными кажутся в контексте нашей эпохи жизнеустроительные истины самого Скрябина, которые сложны для практического исполнения: живи открыто и нравственно; побеждай «мир в себе»; побеждай низменное в себе; будь хозяином своей судьбы; работай и твори на благо человечества; оставь свой след, имя в человеческой истории; в твоём микрокосмосе отражается вся Вселенная; ключ в беспредельное, вечное в твоём сердце.

Вдохновенный, тонкий поэт звуков, влюбленный горячо в то, что он делал и создавал, Скрябин оставил нам – потомкам – много прекрасных страниц глубоко человеческой, проникновенной лирики, наряду с этим утверждением в его музыке также много героически-волевого начала. Конечно, восприятие Скрябиным реального мира и его творческие воплощения носили в большей мере субъективно-идеалистический характер. Г.В. Плеханов, глубоко уважающий его творчество, так однажды заметил: «Эта музыка представляет собой отражение нашей революционной эпохи в темпераменте и мирозерцании идеалиста-мистика» [5, с. 494–495]. Отсюда то беспокойство духа, острота и напряженность психологического тонуса, которым проникнута музыкальная ткань произведений Скрябина. Недаром его современники – М.А. Врубель, А.А. Блок, Н.К. Рерих, А. Белый – говорили, что его музыка «насыщена электричеством». Голос Скрябина в музыкальном океане страстей был подобен бунтарскому кличу горьковского «Буревестника», как неоднократно отмечал в своих статьях и выступлениях А.В. Луначарский [4, с. 177]. Другой критик Б.В. Асафьев писал о композиторе: «Скрябин нес на себе печать не только предчувствия великих очистительных гроз, но и радостные прозрения

«новой эры» [6, с. 180]. Скрябин в своем творчестве олицетворял богатейшую революционную символику, страстный прометеевский пафос борьбы за светлое будущее. Известный биограф В.Ю. Дельсон утверждал, что он стремился насытить свое творчество идеями, понятиями и ассоциациями философско-психологического, а порой абстрактно-логического порядка: понятиями пространства, времени, энергии, бесконечности, хаоса, борьбы, воли, жизни, смерти [3, с. 19].

Плеханов, вспоминая встречи с композитором, писал, что Скрябин хотел выразить в своей музыке не те или другие настроения, а целое мирозерцание, которое старался разработать со всех сторон. Композитор ставил перед искусством невыполнимую для него задачу. Оказалось, что эта ошибка принесла ему большую пользу: расширяя круг его духовных интересов, она тем самым значительно увеличивала и без того огромный удельный вес его художественного дарования [7, с. 77]. Известно, что философские идеалистические взгляды Скрябина в 90-е гг. XIX вв. сформировались под влиянием С.Н. Трубецкого. Высокообразованный человек князь Трубецкой был автором серьезных философских трудов, знатоком истории развития человеческой мысли. Не без его участия Скрябин систематизировал свои познания в области античной философии. К концу XIX – началу XX в. в России возростал интерес к творчеству «центрального человека мира», так называли величайшего мыслителя и поэта, создателя «Божественной комедии» Данте Алигьери. Музыкальная философия Скрябина и его мироощущение во многом совпадало с философской триадой С.Н. Трубецкого: опыт, разум, вера. Вершиной философской мысли С.Н. Трубецкого была всеобъемлющая формула: «Бог есть Любовь». Это определение восходит к Данте, что очень роднит двух великих художников и мыслителей. Если два первых понятия в «Триаде» для Трубецкого и Скрябина связывались с познанием объективной действительности (опыт), отношение к которой определяется человеческим разумом, то вера расшифровывалась так: «Бог есть Любовь» [8, с. 358]. Любви Скрябин придавал всемогущее начало. Надеясь музыку чертами всемогущества, он полагал, что

истинное искусство рождается только при условии любви к людям, к миру.

Музыкальный гений Скрябина, его благородные стремления очень привлекали Трубецкого. Только вера и безграничная любовь к людям позволили произнести Скрябину такие слова: «Иду сказать людям, что они сильны и могучи».

Философ, музыкант, поэт, он создал в начале XX в. новый тип симфонизма. В 1901 г. Скрябин написал Первую симфонию, которую назвал «Новой библией». Пламенные эстетические порывы к невыразимо красивым звездным далям, картины борьбы добра со злом, призывные возгласы придавали невыразимое своеобразие музыке Скрябина. Его музыка для слуха современников казалась чуждой и непонятной, но она была совершенно свободна от боли, смелой, мощной, возвышенной, эхом из того Небесного царства, о существовании которого человек мог только предполагать. Думается, что Скрябин как человек с тонкой нервной системой слышал Вселенную и осознавал свое предназначение. Не случайно за несколько лет до «Новой библии» он написал Третью сонату и назвал ее «Состояние души». В то время как Четвертой сонате Скрябина великий русский пианист Г.Г. Нейгауз дал романτισко-космическое название «Полет к синей звезде». А.Н. Скрябин, как и русский философ Н.Ф. Федоров, верил, что «человечество не может удовлетвориться тесными пределами земли, только земным» [9, с. 362]. Оба мыслителя, не будучи знакомыми, думали, что люди всегда стремились в мистических экстазах к небесам.

«Человечество гибнет, – рассуждал Н.Ф. Федоров, – от того, что отрезано громадными пространствами от других миров и полностью подчинено слепому, фатальному движению Земли». Федоров в своей утопической философии мечтал о воскрешении и покорении космоса, он считал, что именно Земля является «единственной носительницей спасения мира» [9, с. 301].

Космизм Федорова и Скрябина позволяет нам характеризовать их как типичных представителей русской культуры, в которой человек воспринимал мир в качестве живого мироздания. «Именно данные обстоятельства, – пишет Н.П. Моница, – позволили Федорову говорить о том,

что ширь русской земли порождает ширь русской души, а российский простор служит переходом к простору космического пространства, этого нового поприща для великого подвига русского народа» [10, с. 123].

Русские с молоком матери испокон веков впитывали идеи космических взглядов на мир, идеи соборности, софийности. Их всегда волновали Вселенское мироощущение, соизмеримость макрокосмоса и микрокосмоса. И Скрябин как яркий представитель уникальной русской культуры подтвердил это своим музыкальным творчеством. Разве идея соборности не определила стремление русского гения к индивидуальному нравственному совершенствованию, к построению отношений с окружающим миром на основе любви, вечных, абсолютных ценностей? Сама драматургия космической музыки «Божественной поэмы» – 3-й симфонии для громадного оркестра – отвечает на этот вопрос. Программное название данного произведения порождено философско-эстетическим образным строем, который представляет созидающий Разум. Образ любви как всемогущей, всеобъемлющей силы, управляющей всем миром, навеян Скрябину от «Божественной комедии» Данте и философских трактатов В.С. Соловьева. В этой симфонии Скрябин утверждает тему «Борения» человека за светлое будущее.

В 1908 г. появляется новое сочинение Скрябина «Поэма экстаза». Это произведение по праву ставит Скрябина в ряд величайших симфонистов в истории мировой музыкальной культуры. В нём прослеживаются идеи всеединства человека, человечества и Вселенной. Особенностью скрябинской музыкальной философии космизма выступает концепция Софийного Космоса, как раз опирающаяся на идеи русской религиозно-философской мысли, сочетающей в себе единство, свободу, взаимную любовь к тем, кто любит Бога.

Генрих Нейгауз, бесконечно любивший скрябинскую музыку, очень лаконично охарактеризовал его художественное творчество: «Поэмы экстаза – так я назвал бы весь творческий и жизненный путь Скрябина. Он горел и сгорал – вот почему его музыка, как звезда, как солнце, излучает свет» [11, с. 180].

На протяжении нескольких лет жизни Скрябина волновал греческий миф, дошедший до нас из глубины веков, о Прометее, которого по справедливости можно назвать самым благородным образом титана-огненосца. Партитуре новой симфонической поэмы композитор дал два рабочих названия: «Прометей» и «Поэма огня». Это произведение явилось вершиной творчества великого мистика. Оно было задумано для огромного состава оркестра, фортепиано, смешанного хора, солиста, поющего без слов, а также для световой клавиатуры, при помощи которой зал мог бы погружаться в сияние того или иного цвета, причем конструкция нового инструмента предполагала смешение цветов. В этот период творчества музыкальное сознание Скрябина меняет свой вектор, благодаря серьезному увлечению философскими трудами Ф. Ницше и Е. Блаватской, оперирующими понятиями «звучание» и «экстаз». Скрябин порождает смелый и гармонический язык. Все чаще он говорит своим близким: «Мне уже тесно становится в темперированном строе... Как мне хочется тут что-то проломить, какую-то границу между звуками. Ведь все они не те, какие мне нужны, они все слишком материальны, слишком просты... Если бы можно было построить такой инструмент...» (цит. по: [4, с. 180]).

В последний период жизни он находит новый композиторский способ воплощения своих ультрахроматических гармоний в обычной темперации. Скрябин начинает эксперименты с аккордами. Поэтому музыка «Прометей» излучает, благодаря гениальным композиторским находкам, неземную очаровательность и в своей кульминации обладает невыразимым божественным величием. Можно сказать, что Скрябину удалось в конце творческого пути создать «звучащую живопись». Ведь и цвет, и свет являются вибрациями, как и акустический звук. Скрябин ясно себе представлял, рассуждая о «путешествиях сознания», что существуют только вибрации и сознание, которые возникли из света. В действительности любой звук имеет свой цвет, а каждый цвет – свой звук. Большое значение композитор, как уже говорилось, придавал ритму, поскольку понимал, что во всем есть ритм и ритм важен не только в музыке. Он проявляется во всей жизни.

Достаточно вспомнить ритмичный пульс сердца, циркуляцию крови, вдох и выдох, приливы и отливы. Даже планеты во Вселенной кружат вокруг своих пульсирующих солнц в индивидуально заложенном ритме. «Музыкальные соотношения звуков – это фактически основные соотношения в микрокосмосе и макрокосмосе», – утверждал Скрябин (цит. по: [4, с. 155]). В «Прометее» композитору удалось передать характер космического, вселенского общения. Следовательно, для Скрябина София представлена как основа единства и развития не только Космоса, но и рода человеческого. Для него София есть истинная причина творения, его цель и начало, в котором Бог создает небо и землю. Именно в таком онтолого-космологическом аспекте Софии можно рассматривать творческие изыскания композитора. Тех же философских взглядов придерживался и В.С. Соловьев.

После «Прометей» Скрябин написал еще ряд фортепианных пьес и вплотную приступил к своему последнему грандиозному сочинению – «Мистерии», которое мыслилось им как некое масштабное произведение. В нем должны были соединиться в одно целое различные виды искусства. Утопическим надеждам Скрябина не дано было осуществиться (помешала смерть). Композитор мечтал, что в «Мистерии» примет участие все человечество, а это повлечет за собой «гибель мира» как материального начала и победу, «освобождение» начала духовного. Произведение было задумано как ораториально-танцевальное представление. Не без влияния эсхатологических концепций русской философской мысли и мистико-орфических настроений родилась идея скрябинской музыкальной мистерии. Стремление преобразования мира через фатальную гибель, через ожидаемую «катастрофу» – эти художественные идеи и образы воплощались в музыке и поэзии символистов (А. Белый, В.Я. Брюсов, М.-К. Чюрленис, Н.К. Рерих, Д.С. Мережковский).

Эсхатологическая тематика всегда возникала в переломные исторические эпохи, эпохальные кризисы. Русское искусство было неразрывно связано с эсхатологическими идеями. Для Скрябина было характерно, что погружению в эсхатологизм сопутствовало радостное восприятие известий о грандиозных революци-

онных преобразованиях, о грядущих глобальных переменах в жизни общества.

В работе «Мир сознания» А.В. Иванов справедливо трактует Софию сквозь призму нескольких философских аспектов. И в данном случае применительно к Скрябину «эсхатологический аспект Софии необходимо понимать не только как говорящую субстанцию космоса, но и как ключевой пункт его обратного возвращения в смысловую стихию Божественного Ума» [12, с. 33]. Иными словами, главной темой «Мистерии» был конец мира и создание нового человека. Центральной символической мечтой последней феерии Скрябина была фантастическая идея взаимоединства человеческой души с мировой Душой. В последний год он пишет: «Впервые я нашел свет в музыке, впервые я испытал упоение, полет, радость, счастье» (цит. по: [4, с. 195]).

Итак, на рубеже XIX–XX вв. идея Софии была одной из центральных для русской философской мысли. Бесспорно, она оказала влияние на формирование представителей серебряного века, одним из которых является великий русский композитор А.Н. Скрябин. Идея Софии оказалась для Скрябина частью внутреннего поэтического мира художника и осмысливалась, выражалась им в сугубо личной форме, имея свои специфические нюансы и особенности. Идея Софийности проявилась в музыкально-поэтическом творчестве Скрябина в трех основных аспектах: онтолого-космологическом, этико-эстетическом и антропологическом. Как подданный Софии на протяжении всей своей жизни Скрябин верой и правдой служил русскому народу, России, всему человечеству. Вот почему особое значение для будущих поколений имеют скрябинские поэтические строки из литературной программы к «Поэме экстаза»:

Я к жизни призываю вас,  
Скрытые стремленья!  
Вы, утонувшие  
В темных глубинах

Духа творящего,  
Вы, боязливые,  
Жизни зародыши,  
Вам дерзновенье  
Я приношу!

Его музыка золотыми страницами вписалась в систему национального русского искусства, имеющего свой путь развития в человеческой истории, свои задачи, цели, и, наконец, свое прошлое, настоящее, будущее. Его творчество оказало колоссальное влияние на мастеров музыкальной культуры России и зарубежья. Он завершил классический период развития русской музыкальной культуры. Залогом победы в борьбе за высокие эстетические идеалы композитор считал неукротимую волю человека. И первая победа, которую должен одержать сам человек, – это победа над своими страхами и сомнениями, победа над собой, требующая от человека всех духовных и жизненных сил.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Белый А.* На рубеже двух столетий. М., 1989.
- [2] *Блок А.А.* Вопросы, вопросы и вопросы // Полн. собр. соч.: в 8 т. М., 1982. Т. 5.
- [3] *Дельсон В.Ю.* Скрябин. М., 1971.
- [4] *Сабанев Л.Л.* Воспоминания о Скрябине. М., 1995.
- [5] *Плеханов А.Г.* Письмо к доктору В.В. Белгородскому // Литература и эстетика. М., 1922. Т. 2.
- [6] *Асафьев Б.В.* Русская музыка XIX и XX в. Л., 1962.
- [7] *Плеханов Р.Г.* Воспоминания // А.Н. Скрябин. Сборник к 25-летию со дня смерти. М.; Л., 1940.
- [8] *История русской философии / сост. П.П. Апышко.* М., 2001.
- [9] *Федоров Н.Ф.* Соч. М., 1982.
- [10] *Монина Н.П.* Философские идеи русской культуры // Формирование единого образовательного пространства в регионе большого Алтая: проблемы и перспективы: мат-лы Междунар. науч. конф. Рубцовск, 2005.
- [11] *Нейгауз Г.Г.* Современник Скрябина и Рахманинова // Нейгауз Г.Г. Размышления. Воспоминания. Дневники. М., 1983.
- [12] *Иванов А.В.* Мир сознания. Барнаул, 2000.



## **МОДА КАК ТЕНДЕНЦИЯ МАССОВОЙ КУЛЬТУРЫ И ЕЕ ВЛИЯНИЕ НА ЧЕЛОВЕЧЕСКУЮ СУБЪЕКТНОСТЬ**

В статье анализируется феномен моды как одна из тенденций массовой культуры. Рассматривается характер влияния моды на субъектные качества личности (потребителя масскульты). Делается вывод о том, что это влияние может быть как конструктивным, так и деструктивным. Но вместе с тем автор доказывает большую выраженность именно отрицательного воздействия моды на субъектность.

*Ключевые слова:* мода, реклама, массовая культура, субъектность, деструктивное влияние моды.

Мода и реклама – явления, давно известные человечеству. Они существовали всегда, на разных этапах развития общества, просто раньше, несмотря на их существование внутри культурных традиций, им практически не уделяли никакого внимания. Однако само отсутствие понятий «мода» и «реклама» в научном языке совсем не указывало на отсутствие таковых явлений внутри человеческой культуры.

Справедливо может возникнуть вопрос: а как вообще связаны между собой эти понятия и массовая культура? Например, Н.В. Филичева, повествуя о художественном стиле Арт Деко, говорит о его влиянии на массовую культуру, а именно на дизайн, рекламу, моду и архитектуру [1], т. е. включает моду и рекламу внутрь массовой культуры как ее компоненты. Г. Лебон напрямую связывал моду с поведением толпы, которое отличается бессознательностью и заразительностью; мода скорее руководствуется не логическими аргументами, а образцами [2]. А.В. Аврамов вообще называет рекламу институтом массовой культуры [3], хотя более целесообразно таковыми было бы назвать средства массовой коммуникации (далее – СМК), а рекламу – его отдельным элементом. В общем, мы видим, что мода и реклама правомерно помещены в контекст массы и массовой культуры и правомерно их изучение внутри данных явлений.

Человек всегда ищет свою принадлежность, пытается идентифицировать себя с социальной группой, референтной для него. Привычка, следование образцу и подражание – это основа самоопределения, которая обеспечивает ритуальность культуры и механизмы ее развития и воспроизводства [4]. Мода способствует сохранению культурной традиции, является символом социального статуса, направляет поведение и устанавливает границы дозволенного и желаемого, выступает средством достижения общественного признания. А.В. Конева отмечает сверхиндивидуальную сущность моды: по нашему мнению, эту сверхиндивидуальность можно поставить в один ряд с политикой (особенно авторитар-

ной), рекламой и так далее – со всем, что благодаря своей возвышенности над индивидуальностью человека лишает последнего свободы выбора, волепроявления и других субъектных качеств.

Посредством моды и рекламы индивид идентифицируется с референтной группой и обществом в целом. По мнению Г. Маркузе, эта идентификация свойственна как примитивным формам ассоциирования, так и более современному индустриальному обществу, а ее отсутствие, отказ следовать за всеми оценивается как невроз [5]. Так что же невротично – конформизм или нонконформизм? Здесь уместна так называемая игра полюсами.

Китч-культура – это воплощение сознания не народа, а индустрии, коммерции. Это контркультура, это антикультура, которую можно смело противопоставлять собственно Культуре с большой буквы, поскольку она враждебна по отношению к последней. Ее продукты меняются с очень высокой скоростью, но в этих изменениях нет качественных различий. Этот постоянный, замкнутый на себя процесс нельзя назвать развитием, так как бесконечные перемены не несут в себе ничего нового; это просто мода. У нее нет истории, поскольку она не способна быть непрерывной, развивающейся, движущейся вперед (здесь мы используем фразу М. Фуко, нацеленную на развитие природы: «Природа имеет историю лишь в той мере, в какой она способна быть непрерывной» [6, с. 184]), у того, что всегда стоит на месте, не может быть истории. Это утверждение имеет прямое отношение к моде как к одной из тенденций преимущественно низших уровней массовой культуры.

Мода – это «обычно непродолжительное господство определенного типа стандартизированного массового поведения, в основе которого лежит относительно быстрое и масштабное изменение внешнего (прежде всего предметного) окружения людей», «внешнее оформление внутреннего содержания общественной жизни, выражающее уровень и особенности массового вкуса данного общества в данное время» [7, с. 474]. Ей свойственны релятивизм (быстрая смена форм), цикличность (периодическая обращенность к традициям прошлого), иррациональность

(ее «эмоциональная» обращенность не всегда соотнобразуется с логикой или здравым смыслом), универсальность (мода обращена ко всем сразу и к каждому отдельно). Мода формирует вкусы, внедряет определенные ценности и образцы поведения и управляет ими. Мода – одно из средств социализации.

Мода обращается к широкому кругу, она апеллирует к низменным и примитивным вкусам, удовлетворяет низшие потребности. Мода – это некая стандартизация духовности, а духовность не может быть стандартизированной, ибо в таком случае она просто перестает быть собой. Мода уничтожает человеческую уникальность, индивидуальность вкуса, она говорит: «Посмотри на меня и на всех нас и уважай и люби то, что мы все любим». Это апелляция к большинству, к массе, не отличающаяся интеллектуализмом, культурным развитием и широтой вкусов. Сама стандартизация стала модной. Мода – это антоним индивидуального стиля, это навязываемое формирование образа жизни «быть как все». А стиль, в свою очередь, подчеркивает человеческую уникальность, уникальность его вкусов и оттошений, его субъектную позицию. В психологии есть понятие индивидуального стиля деятельности, который рассматривается как целостное образование, характеризующееся индивидуальными особенностями. Внутренние условия выступают определяющей стороной стиля, обеспечивают индивидуальное своеобразие [8]. Когда человек творчески проявляет свою индивидуальность, креативные потенции своего индивидуального стиля, он, выходя за границы дозволенного, занимает место над культурой и перестает быть ее пассивным потребителем; перерастая культуру, он сам начинает ее развивать.

Китч, дешевая масс-медийность, попса находятся вне стиля. Они просто с ним несовместимы и взаимоисключаемы. Мода требует конформности, а не индивидуальности, она стремится к массовости, а не уникальности. «Если сегодня все слушают “Руки вверх”, то и я буду это слушать, и неважно, нравится мне или нет». А если завтра все забудут эту бездарную группу и станут превозносить новых (только что появившихся) деятелей, то первые потеряют свою ценность в гла-

зах «модной» толпы. Несмотря на такую абсурдность, это действительно так. Получается, у человека нет четкой и устойчивой системы отношений к тому, что потреблять. С.В. Борзых называет моду свойством консюмеризма (фанатичного потребления вещественного, а не духовного), «которая быстро сменяется, заставляя человека постоянно быть в курсе событий в мире моды и обостряя его желание соответствовать ей» [9, с. 15]. Единственная четкость и устойчивость, которую он проявляет, – это конформное следование за толпой. А где же индивидуальность, где субъектность? Их нет. А если нет этих необходимых для зрелой личности образований, то и здоровой личности тоже нет. М. Фуко так говорил о человеке классической эпохи: «Впадая в безумие, человек отделяется от собственной истины, изгоняется в окружающий его, непосредственно присутствующий рядом мир – и растворяется в нем» [10, с. 377]. В этом утверждении лишение собственной истины равнозначно лишению своей позиции, своего мировоззрения. Согласно Фуко, безумец – это утративший твердую почву своей истины и утративший самого себя. По нашему мнению, безумие заключено в тотальной конформизации, в растворении себя, своей позиции, своей сущности в мнении масс.

Э. Фромм разделяет присущую каждому человеку потребность в идентичности на два полюса: индивидуальность и стадный конформизм. По его убеждению, первое – это нормальное развитие человеческой идентичности, а второе – иллюзорное [11]. Однако существует мнение, согласно которому конформность – нормальное для человеческой психики явление, а конформное поведение – здоровое и естественное, в отличие от неконформизма [12]. Конечно, любой человек проявляет конформность к какому-то элементу окружения: к друзьям, к трудовому коллективу, к семье, к государственной политике, и это нормально. Абсолютный неконформизм присущ только психически нездоровым и асоциальным индивидам (равно как и абсолютный конформизм). Но мы в настоящей статье критикуем не этот нормальный вариант поведения, а его гипертрофированную форму, и под термином «конформизм» подразумеваем абсолютно неосознанное следова-

ние за толпой, за массой, за многообразием сообщений и призывов СМК, за харизматическими лидерами и т. д.

Казалось бы, посредством приобщения к массовой культуре человек адаптируется к большинству, что в какой-то степени можно назвать социализацией. Здесь уместно вспомнить фразу З. Фрейда, которая на первый взгляд может показаться парадоксальной: «Чем больше человек адаптирован, тем менее зрелым он является, он закрыт для саморазвития» (цит. по: [13, с. 93]). Адаптация в данном случае (к массе) ведет только к растворению индивидуальности внутри того объекта, к которому человек адаптируется. Этот процесс в некотором роде можно назвать деиндивидуализацией. Чем больше индивид адаптирован к некоей культуре, тем менее свободно он может проявлять свои субъектные интенции, и по мере все большего погружения в культуру эти интенции начинают атрофироваться и, наконец, умирают. Именно с этого момента человек принимает за свое априори все то, что ему было навязано извне, не понимая механизма данной интериоризации.

Часто мы бессознательно боимся быть отличными от массы. Когда человек чем-то отличается от большинства, последнее начинает смотреть на него как на чужеродный элемент. Общественное мнение – это, пожалуй, самый сильный фактор воздействия на психику отдельного человека. В современном обществе потребления «манипулирование товарами как культурными знаками подразумевает не столько способность товара удовлетворять человеческую потребность, сколько социальное значение, придаваемое обладателю товара в данной культуре» [14, с. 54]. То есть показатель статусности и ценности в глазах других людей – это то, что человек потребляет. И, естественно, чтобы заслужить уважение со стороны массы, нужно потреблять те же товары, что и она: смотреть такие же фильмы, читать такую же литературу, слушать такую же музыку. И как раз мода и реклама указывают на те предметы, которые стоит потреблять.

Если человек стремится получить признание и уважение, ему представляется неважным культурный и интеллектуальный уровень массы, он становится готовым занять этот же уровень, уподо-

биться ей. С таким же успехом он перестает обращать внимание на то, что массовый вкус может ему не нравиться, не удовлетворять эстетическую потребность, но удовлетворять потребности другого уровня. Ему могут претить массовые предпочтения – фильмы, музыка, образ жизни, но ради получения массового признания он будет все это слушать и смотреть, насильно приобщать себя к данной культуре. И разве это не модная тенденция – идти за массовыми вкусами? Как говорил А. Швейцер, «когда общество воздействует на индивида сильнее, чем индивид на общество, начинается дегградация культуры, ибо в этом случае с необходимостью уменьшается решающая величина – духовные и нравственные задатки человека» (цит. по: [15, с. 71]). Может быть, если соглашаться с этим высказыванием, на упадок культуры в наибольшей степени повлияло общественное мнение, выступающее с позиции сверху, говоря языком трансактного анализа, с позиции доминирующего и грозного родителя по отношению к отдельному человеку, «ребенку»; в таком случае авторитарный характер воздействия социальных норм и предпочтений ведет к смерти духовности у реципиента, а вместе с ней и творческих интенций, превращая его в безвольного конформиста. В. Франкл определяет конформизм одним из следствий экзистенциального вакуума; для того чтобы не утонуть в потоке средств массовой стимуляции, необходимо отделять существенное от несущественного, смысла от бессмыслицы. Само же современное общество Франкл называет обществом изобилия, порождающим избыток свободного времени, которое формирует экзистенциальный вакуум вместо предоставления возможности для осмысления организации жизни [16].

Конформизм – путь следования за модой. Д.А. Леонтьев называет конформизм противоположностью свободы [17]. Мы добавим к этому противопоставлению еще одно: конформизм – это антоним не только свободы и стиля, но и вкуса. Человек, следующий за веяниями моды, показывает в первую очередь свое безвкусие и отсутствие свободы. Он не имеет свободы выбора: выбирает не он, а время, для которого характерна определенная «модная» тенденция. Массовый потребитель – это

пассивный материал, «который подвергается обработке и не озадачивается ее последствиями, хотя ему настойчиво внушается, что он свободен и волен совершать тот или иной выбор» [18, с. 101]. «Выбор без выбора» – термин нейролингвистического программирования, означающий всего лишь видимость возможности выбирать. Человек выбирает между большим количеством продуктов, что создает иллюзию выбора, однако все эти продукты имеют свое происхождение в китч-культуре и по своим качественным характеристикам не выходят за ее рамки, т. е. практически все они одинаковы.

Такого явления, как мода, не может существовать без другого явления – безликой массы. Именно масса создает моду, а мода – массу, и это взаимообратный процесс, замкнутый круг. К.С. Шаров считает, что мода скорее порождает культурное и психологическое состояние общества, чем отражает [19]. По нашему мнению, она одновременно как это состояние конституирует, так и отражает его. По крайней мере, наблюдая за тенденциями моды, мы можем сделать заключение о мере культурного развития общества. Эти два явления – мода и масса – образуют неразрывную связку, и они не могут рассматриваться и, тем более, существовать в отрыве друг от друга. А значит, «модный» человек полностью подвластен массам с их изменчивыми потребностями и отсутствием вкуса, которые выбирают за него, но вряд ли этот выбор можно назвать действительным выбором; это его симулякр, иллюзия, равно как китч – симулякр искусства, симулякр культуры. Но мода выступает еще и синонимом безответственности; человек не берет ответственности за свой вкус и действует по принципу «все так думают, и я тоже». Как писал Карл Поппер, размышляя о моде и ответственности, «теперь... в моду вошло такое понимание свободы, которое позволяет делать все, что угодно, даже вещи... отвратительные... Посмей презирать моду и каждый день будь немного ответственнее» (цит. по: [20, с. 123]). Б.А. Вяткин связывает возникновение моды, массового вкуса, подражания и контагиозности (заразительности) с процессом отождествления себя с другими представителями своей этнической общности – самоидентифика-

ции по принципу «Я такой же, как все» [8]. Конечно, феномен моды может проявляться не только в контексте этнической самоидентификации, другими словами, растворении в генерализованном представлении о вкусе своей общности, но и в контексте просто значимой для человека группы. Но, тем не менее, стоит согласиться с Вяткиным в том, что этот феномен выступает результатом мышления по конформному принципу «быть как все», который не оставляет никакого места для индивидуальности субъекта. «Теряя свою персональность, человек отдает себя социальному «мы» и превращается в пассивную личность» [21, с. 30]. В сущности, следуя за тенденциями моды, он надевает на себя маску, позволяя себе вовлечься в массовый маскарад.

Некоторые исследователи проявляют положительное отношение к моде. Так, мода именуется «одним из механизмов перехода внешнего во внутреннее, что является, по С.А. Выготскому, основой формирования психических функций», «тиражом», связанным с желанием «быть, как все» [22]. Возможно, к этому явлению имеет смысл относиться положительно, но в первую очередь в условиях детского развития, поскольку ребенку необходимо подобным способом интериоризировать паттерны поведения сверстников для адаптации в коллективе и для дальнейшего личностного становления. Но такое отношение имеет место в основном при рассмотрении развития ребенка, у которого еще нет достаточно сформированной собственной субъектности. На более поздних возрастных этапах стремление к подражанию «всем» становится камнем, лежащим на пути дальнейшего личностного становления, тем самым из средства развития превращаясь в барьер.

Также имеет значение вопрос – кому подражать, поскольку «слепое следование моде может привести в мир мнимых, фальшивых ценностей, способствовать возникновению негативных явлений» [22, с. 100]. Ученые говорят о том, что стремление к подражанию является более низким этапом, чем индивидуализация, и уж тем более, чем интеграция, и с этим трудно не согласиться. Если при первой стадии (адаптация) ребенок следует принципу «быть, как все» и стандартизируется, при второй (индивидуализация) он дейст-

вует по принципу отличия, причем иногда жертвуя своими настоящими желаниями и потребностями, т. е. на второй стадии есть только мнимая личностная позиция – позиция «отличаться от всех», которая также зависит от мнения большинства (если все носят джинсы, я буду носить обычные брюки, несмотря на то, что джинсы мне нравятся больше). Синонимом адаптации в данном контексте выступает конформность, а синонимом индивидуализации – негативизм. Конформность – это специфический способ «разрешения конфликта между личным и доминирующим в группе мнением в пользу последнего: зависимость человека от группы вынуждает искать подлинного или мнимого согласия с ней, подстраивать поведение под кажущиеся непривычными или ложными эталоны». «Негативизм – стремление во что бы то ни стало поступать вопреки господствующему большинству, любой ценой утверждая противоположную точку зрения» [23, с. 50]. А вот третья стадия (интеграция) характеризует сложившуюся личность, обладающую твердой субъектной позицией, не зависящей ни от кого (не важно, что делают все, я буду делать то, что нравится мне). Но снова обращая свой взор на современную массу, замечаем, что она независимо от возраста входящих в нее людей остается на низком (доиндивидуализированном) этапе личностного развития. «В пространстве общественных связей человек может утратить свое подлинное лицо, полностью заменить его социальной маской, которая и будет восприниматься им как истинное существование» [24, с. 13].

В научной литературе также имеет место понятие «высокая мода», которую можно свободно отнести к высокому уровню массовой культуры. К высокой моде в основном относят классические литературные, музыкальные произведения и тому подобное. Но мы в нашем исследовании практически не уделяем ей особого внимания, так как в современном мире явления арт-потока массовой культуры получили недостаточное развитие, и высокая мода существует лишь в довольно узких интеллектуальных кругах, не оказывая широкого влияния на массы. Следовательно, высокую моду нельзя на-

звать модой в подлинном смысле этого слова.

Несмотря на распространенное утверждение о субъективном характере вкусов и ценностей, мы все-таки можем давать объективную оценку этим вкусам. Так, Н.М. Борытко и О.А. Мацкайлова выделяют ценности культуры (внешние по отношению к человеку) и личностные смыслы (внутренние) [25]. Однако в современном мире китч-культуры фальшивые внешние ценностные значения в основном приобретают характер псевдоценностей, а когда они переходят во внутренние, вообще не стоит говорить о развитии личности, их присваивающей. Но существуют еще ценности настоящей культуры, присвоение которых делает личность более «возвышенной». Если мы гонимся за модой, за слепым большинством, то присваиваем преимущественно фальшь. Но если мы предпочитаем вместо китчевого ширпотреба наслаждаться по-настоящему качественными произведениями искусства, наша система ценностей здорова и сохранна (к тому же она именно наша, а не навязанная извне).

Феномен моды, пожалуй, может иметь распространение только в обществе потребления, которое, по словам Е.И. Сапожникова, не ориентировано на человеческое саморазвитие и совершенствование его творческих и познавательных качеств, потребительский образ жизни бездуховен [26]. Модная потребительская культура – это бесконечная цепь товаров и услуг, постоянно предлагаемых массе. А масса, преимущественно молодежная, – порабощенный потребитель этих псевдоценностей [27; 28]. В этом и заключается изменчивость моды: чтобы обеспечить ее постоянный коммерческий успех, требуется периодически (с каждым годом, например) изменять характер «наиболее продаваемых» вещей. Но эти изменения не должны быть кардинальными, чтобы не выходить за рамки «вкусов» большинства. Так, если раньше было принято слушать группу «На-На», то потом вершину покорили «Иванушки-International», ну а после них на Эверест взберется кто-то другой, и эта цепь уходит в бесконечность, являя собой феномен вечного возвращения (не в ницшеанском смысле слова, а в более прямом – как бесконечное возвращение того же самого). Все более

частую смену кумиров И.М. Мартынов называет признаком традиций музыкальной попсы [29], и мы полностью с ним согласны. Как бы не менялись «модные» вкусы толпы, какой быстрой не была бы динамика их предпочтений к новым кумирам, от этого данные вкусы не развиваются, не прогрессируют. Они по-прежнему остаются безвкусицей, а все многообразие кумиров – единообразием в своей серости, тривиальности и бездарности.

Мода – это индустрия производства образов, навязываемых человеку в пространстве массовой культуры в виде некоей референтности, за которой человек должен идти. Однако человек с четкой внутренней позицией, со сформированной системой ценностей и вкусов не пойдет за модой; он находится над ней, по ту сторону добра и зла. Однако «характерная для современного человека «плавающая» идентичность приводит к рождению в разных сферах социальной реальности – в политике, искусстве, бизнесе – индустрии производства образов, имиджей, призванных оперативно откликаться на непрестанно меняющиеся запросы общества» [24]. Да, запросы общества меняются постоянно, но это не ведет к повышению культурного уровня социума, что дает нам право назвать эти изменения псевдоизменениями и придать моде качество псевдоизменяемости.

Мода изменчива, но настоящие произведения искусства остаются вечными в своей ценности и значимости. «Каждая эпоха в искусстве создает свои ценности, которые существуют объективно и независимо от быстротечной моды», – пишет Н.В. Филичева [1]. Стиль же неизменен, он остается, но может усовершенствоваться, как и само искусство способно развиваться и следовать по пути все большего самосовершенствования. А вот мода, несмотря на свою постоянную изменчивость, ни к какому совершенству не стремится, а в сущности, если использовать здесь термин развития, она стоит на месте, топчется, создавая видимость движения, но не более того. Мода изменчива в своей неизменности. Выражаясь словами К.С. Шарова, «мода и стара, и нова» [19]. В такой же мере она и рациональна, и абсурдна: рациональна для тех, кому приносит доход, абсурдна для тех,

кто потребляет ее продукты. А.М. Желнова, вслед за Ж. Бодрийяром, замечает, что мода подменяет собой время и ведет к отсрочке старения, к зависанию между жизнью и смертью [30]. По нашему мнению, такое стремление к бессмертию – не более чем симулякр, уловка, так как ввиду деиндивидуализированности потребителя моды и умирать-то становится некому.

Кроме того, так как китч-культуру, благодаря ее низменности, нельзя поставить рядом с духовностью, мы склонны связывать продукты китча с вещественностью и телесностью как антонимом духовности. А значит, ее потребители – консьюмеры, люди, чья главная особенность – преобладание вещественного потребления. Одномерность и ограниченность их потребностей ведет к разрыву между потребительской и другими культурными ориентациями человека, который, в свою очередь, приводит к деградации самого человека и социальной среды, внутри которой человек живет [9].

Ролан Барт говорит о том, что мода как гомеостатическая система не передает какое-то объективное означаемое. Она вырабатывает значение, но это значение «никакое», симулякризованное; здесь главное – наличие процесса значения, а не конкретного означаемого. «В моде нет ничего кроме того, что о ней говорится» [31, с. 234]. По Барту, мода не приемлет содержания, но приемлет формы; собственно, это круговорот форм (годовой, вековой и т. д.). А круговорот, замкнутость, как известно, не ведет ни к чему, кроме замыкания на самом себе. Что же касается форм и содержания, то бартовский формализм моды более чем оправдан: зачем «модному» человеку, т. е. самостоятельно немыслящему, нужно содержание, если есть форма? Если есть красивая обложка, манящая своей красочностью, внутри которой нет содержания. А оно и не нужно человеку моды – ну и пусть бессодержательно, зато красиво. По существу, бессодержательность моды не несет в себе никакой информации, никакого сообщения. Единственное, что она может означать – это безвкусие, и мы снова убеждаемся в том, что сама по себе мода означает отсутствие вкуса, отсутствие субъектности. «Модная» масса не видит означаемого у того вихревого круговорота, которому она сама отдалась. Но этого

следовало ожидать: как можно заметить означаемое, если не питать никакого интереса к содержанию? Как можно копнуть к чуть более глубокому уровню осмысленности и понимания, если познавательность не является ценностью? Мода, можно сказать, – это также проявление антикогниции.

Мода несет в себе некую конвенциональность, предписанность. Говоря о самоактуализированной личности, А. Маслоу наделяет ее внутренними нормами и убеждениями, не обязательно тождественными общепринятым, независимостью в суждениях, самодетерминацией и ответственностью. Кроме того, для нее не имеет значения то, как она выглядит в глазах других людей, она автономна. Также стоит подчеркнуть, что такая личность независима от всего внешнего и от культуры в том числе: для нее главное – мотив роста и развития, устойчивость от воздействий [32]. В сущности, автор подразумевает именно субъектную позицию. Он также упоминает людей, формирующих свои суждения на основе газет, рекламы, телевидения, пропаганды, которым отказывает в самоактуализированности. В общем, Маслоу противопоставляет самоактуализированного человека и человека моды (масс-медиа). Внимание, уделенное нами этому автору, объясняется тем, что самоактуализация как таковая представляется нам очень близкой к субъектности смысловой структуры; скорее даже, самоактуализация – это высшая стадия развития субъектных качеств. В общем, СМК в своем большинстве рождает «одномерного» человека, культивируют лояльные взгляды и подавляют оппозиционные помыслы, препятствуют развитию критического мировоззрения.

Стоит также отметить причинно-следственную двойственность, проявляющуюся в общении между реципиентом и отправителем в контексте массмедийности. С одной стороны, содержание СМК зависит от вкусов, предпочтений и вообще культурного уровня реципиентов (отправитель сообщений должен подстраиваться к получателю, чтобы последнему данные сообщения были доступны). С другой стороны, СМК задают культурный уровень реципиентов, постоянно «бомбардируя» их примитивными в содержательном смысле сообщениями.

Но как бы критически мы ни относились к таким тенденциям культуры, как мода и реклама, мы не способны полностью дистанцироваться от них. Их воздействие – хотим мы того или нет – в любом случае «давит» на нас. Оно распространяется по каналам СМИ, оставляет свой след в психике каждого члена общества и интегрирует его в социум, в чем прослеживается адаптирующая функция этих тенденций. Человек, находящийся вне массы, демонстрирующий свою инаковость, массой отвергается и обрекается на одиночество. Собственно, по Ницше, масса, стадо боится именно одиночества [33]. А мода и реклама открывают ему путь в пространство массовой культуры и оберегают его от многих экзистенциальных проблем, с одной стороны, но и препятствуют проявлению подлинной субъектности – с другой. Другое дело – насколько современный человек способен не избегать этих тенденций, не проявлять эскапизм, а противостоять им, сортировать воздействия, исходящие из недр массовой культуры, как полезные и бесполезные для саморазвития и развития своих субъектных качеств. Считается, что информация, предлагаемая коммуникатором реципиенту, может глубоко проникнуть в сознание последнего только в том случае, если она соответствует его целостному представлению о реальности [34]. Многие представители школы современного гипноза, будучи согласными с данным мнением, утверждают невозможность манипуляций над сознанием, которое не пропускает ничего, что противоречит ценностным ориентациям и мировоззрению субъекта. Но правомерно будет поставить вопрос: а если субъект не обладает мировоззренческой целостностью? В таком случае нечем фильтровать поступающую извне информацию. В общем, эффективность воздействия манипуляций обратно пропорциональна устойчивости взглядов реципиента.

Но, тем не менее, далеко не все поле тенденций моды мы имеем право обвинять в деструктивном воздействии на субъекта. К примеру, мода на здоровый образ жизни, постоянно подкрепляемая рекламными образами внешне привлекательных и сильных молодых людей, способна оказывать положительное влияние на субъектную активность. У реципиента

после просмотра может возникнуть желание стать таким же обладателем накаченных мускулов, и это желание реализуется в активной деятельности. В данном случае моду можно отнести не только к уровню китча, но и «поднять» выше. Таким же образом «работают» некоторые телевизионные и радиопередачи, в которых культивируются такие ценности, как здоровый образ жизни, уважение к близким, любовь и т. д. Только, к сожалению, духовные ценности пока не в состоянии в достаточной мере заменять бессубъектность и бездуховность современной моды, рекламы и многого содержания сообщений СМИ.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Филичева Н.В.* Арт Деко – стиль времени // Российская массовая культура конца XX века: материалы круглого стола. 4 декабря 2001 г. СПб.: Санкт-Петербургское философское общество, 2001. С. 177–186.
- [2] *Лебон Г.* Психология народов и масс. СПб.: Макет, 1995.
- [3] *Аврамов А.В.* Смена научных парадигм в концептуализации феномена «массовая культура»: автореф. дис. ... канд. филос. наук. Великий Новгород, 2007. 21 с.
- [4] *Конева А.В.* Мода как иное // Российская массовая культура конца XX века... С. 82–87.
- [5] *Маркузе Г.* Одномерный человек. М.: Ермак, 2003. 342 с.
- [6] *Фуко М.* Слова и вещи: археология гуманитарных наук. СПб.: А-сэд, 1994. 408 с.
- [7] *Безнюк Д.К.* Мода // Постмодернизм: энциклопедия. Мн.: Интерпрессервис: Книжный Дом, 2001. С. 474–475.
- [8] *Вяткин Б.А.* Лекции по психологии интегральной индивидуальности человека. Пермь, 2000. 179 с.
- [9] *Борзых С.В.* Человек-потребитель в условиях глобализации: автореф. дис. ... канд. филос. наук. Томск, 2005. 22 с.
- [10] *Фуко М.* История безумия в классическую эпоху. СПб., 1997. 576 с.
- [11] *Фромм Э.* Человеческая ситуация – ключ к гуманистическому психоанализу // Фромм Э. Искусство любить. СПб.: Азбука, 2002. С. 11–66.
- [12] *Гуревич П.* Массовая буржуазная пропаганда и зловключения американской социологической теории // «Массовая культура» – иллюзии и действительность: сб. ст. М.: Искусство, 1975. С. 233–254.
- [13] *Фонарев А.Р.* Формы становления личности в процессе ее профессионализации // Вопросы психологии. 1997. № 2. С. 88–93.



- [14] Сапожников Е.И. Общество потребления в странах Запада // Вопросы философии. 2007. № 10. С. 53–63.
- [15] Пряжников Н.С. Профессиональное самоопределение в культурно-исторической перспективе // Вопросы психологии. 1996. № 1. С. 62–72.
- [16] Франкл В. Человек в поисках смысла. М.: Прогресс, 1990. 368 с.
- [17] Леонтьев Д.А. Психология свободы: к постановке проблемы самодетерминации личности // Психологический журнал. 2000. Т. 21. № 1. С. 15–25.
- [18] Голко В.В. Воля в массовой культуре: дис. ... канд. филос. наук. Омск, 2006. 148 с.
- [19] Шаров К.С. Гендерные аспекты семиотики моды // Вопросы философии. 2007. № 12. С. 50–64.
- [20] Тихомиров О.К. К. Поппер и психология // Вопросы психологии. 1995. № 4. С. 116–129.
- [21] Довгань О.В., Трофимов М.Ю. «Казаться» или «быть»: проблема социализации личности в современном обществе // Гуманитарные исследования: ежегодник. Вып. 12. Омск: Изд-во ОмГПУ, 2007. С. 28–32.
- [22] Новикова Е.Ю., Петровский В.А. Использование механизмов моды в педагогической практике // Вопросы психологии. 1990. № 3. С. 100–106.
- [23] Токарева М.Ю., Донцов А.И. Меньшинство как источник социального влияния // Вопросы психологии. 1996. № 1. С. 50–62.
- [24] Гребенникова О.М. Маска в социокультурном пространстве: генезис, функции, сущность: автореф. дис. ... канд. филос. наук. Омск, 2006. 18 с.
- [25] Борытко Н.М., Мацкайлова О.А. Становление субъектной позиции учащегося в гуманитарном пространстве урока. Волгоград, 2002. 132 с.
- [26] Сапожников Е.И. Общество потребления в странах Запада // Вопросы философии. 2007. № 10. С. 53–63.
- [27] Филатова А.Ф. Этический взгляд психолога на проблемы воспитания и образования в современном российском обществе // Гуманитарные исследования: ежегодник. Вып. 12. С. 107–112.
- [28] Голко В.В. Негативная элитная селекция и качества личности // Гуманитарные исследования: ежегодник. Вып. 12. С. 16–20.
- [29] Мартынов И.М. Музыкальная попса: из эпохи возрождения в будущее с промежуточной станцией «XX век» // Российская массовая культура конца XX века... С. 115–118.
- [30] Желнова А.М. Философский путь Жана Бодрийера: между эстетическим и эпистемическим // Вопросы философии. 2007. № 10. С. 151–158.
- [31] Барт Р. Литература сегодня // Избр. работы: Семиотика. Поэтика. М.: Издательская группа «Прогресс»: Универс, 1994. С. 234.
- [32] Маслоу А. Мотивация и личность. СПб.: Питер, 2007. 351 с.
- [33] Ницше Ф. Танец Заратустры: философские произведения. Избранное. М.: ЗАО «ОЛМА Медиа Групп», 2007. 224 с.
- [34] Терин В., Шихирев П. Массовая коммуникация как объект социологического анализа // Российская массовая культура конца XX века... С. 208–232.

**МАТЕМАТИКА**



**ФИЗИКА**



**МЕДИЦИНСКАЯ БИОФИЗИКА**



**ХИМИЯ**



**ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ**



**ПЕДАГОГИКА И МЕТОДИКА  
ПРЕПОДАВАНИЯ**

УДК 519

**М.Г. Амаглобели***Тбилисский государственный университет им. Ивана Джавахишвили***Т.З. Бокелавадзе***Кутаисский государственный университет им. А. Цертели*

## СТЕПЕННЫЕ ГРУППЫ. ГРУППЫ, ТОЧНЫЕ ПРИ ТЕНЗОРНОМ ПОПОЛНЕНИИ

Статья посвящена изучению частичных  $A$ -степенных групп, которые изоморфно вкладываются в свое тензорное пополнение над кольцом  $A$ .

*Ключевые слова:*  $A$ -степенная группа, свободные конструкции, тензорные пополнения.

Понятие степенной группы над производным ассоциативным кольцом  $A$  с единицей введено Р. Линдоном в [1]. В [2] А.Г. Мясников уточнил понятие степенной группы, введя дополнительную аксиому. В частности, новое понятие степенной группы является непосредственным обобщением понятия модуля на случай некоммутативных групп. Систематическое изучение категории степенных групп в смысле А.Г. Мясникова начато в [2; 3; 4]. Настоящая статья является продолжением серии статей по степенным группам и посвящена изучению частичных  $A$ -степенных групп, которые изоморфно вкладываются в свое тензорное пополнение над кольцом  $A$ . Ключом к ее пониманию служит понятие тензорного пополнения, введенное в [2]. Как следствие, получено описание свободных  $A$ -групп и свободных  $A$ -произведений на языке групповых конструкций.

### § 1. Группы, точные при тензорном пополнении

Приведем некоторые определения из [2]. Зафиксируем произвольное ассоциативное кольцо  $A$  с единицей, а также группу  $G$ . Пусть задано действие  $A$  на  $G$ , т. е. отображение  $G \times A \rightarrow G$ . Результат действия  $\alpha \in A$  на  $g \in G$  будем записывать в виде  $g^\alpha$ . Рассмотрим аксиомы:

$$g^1 = g, g^0 = 1, 1^\alpha = 1; \quad (1)$$

$$g^{\alpha+\beta} = g^\alpha \cdot g^\beta, g^{\alpha\beta} = (g^\alpha)^\beta; \quad (2)$$

$$(h^{-1}gh)^\alpha = h^{-1}g^\alpha h; \quad (3)$$

$$[g, h] = 1 \Rightarrow (gh)^\alpha = g^\alpha h^\alpha. \quad (4)$$

Совокупность всех  $A$ -степенных групп, так же как и в [2], будем обозначать через  $m^A$ .

Построение тензорного пополнения данной группы удобно вести по шагам, постепенно «доопределяя степени». Это приводим к понятию частичной  $A$ -группы. Также к частичным  $A$ -группам приводят и некоторые групповые операции над  $A$ -группами. Пусть  $A$  – кольцо,  $G$  – группа.

**Определение.** Группу  $G$  назовем частичной  $A$ -группой, если возведение в степень определено для некоторых пар  $(g, \alpha)$ , но не обязательно для всех пар; причем если определена одна часть равенства в аксиомах (1)–(4), то определена и другая часть, и для них выполняются аксиомы (1)–(4) в определении степенной группы.

Класс частичных  $A$ -степенных групп будем обозначать через  $\mathcal{P}_A$ . Например, если  $A$  – подкольцо кольца  $B$ , тогда любая  $A$ -группа является частичной  $B$ -группой.

На протяжении всей статьи будем предполагать, что кольцо  $A$  в качестве подкольца содержит кольцо целых чисел  $Z$ .

Пусть  $G$  – частичная  $A$ -группа, т. е.  $G \in \mathcal{P}_A$ .

**Определение.** Будем говорить, что группа  $G$  является точной относительно кольца  $A$ , если каноническое отображение  $\lambda : G \rightarrow G^A$  является вложением.

**Определение.** Будем говорить, что группа  $G$  является точной, если она является точной относительно любого кольца, содержащего  $Z$ .

Докажем некоторые полезные факты о точных группах.

**Предложение 1.1.** Пусть  $G = \prod_{i \in I} G_i$  – прямое произведение групп  $G_i$ . Тогда группа  $G$  точна относительно кольца  $A$  тогда и только тогда, когда все  $G_i$  являются точными группами относительно кольца  $A$ .

*Доказательство.* Пусть все группы  $G_i, i \in I$  являются точными относительно кольца  $A$ , т. е. канонические отображения  $\lambda_i : G_i \rightarrow G_i^A$  являются вложениями. Так как функтор тензорного пополнения перестановочен с операцией прямого произведения [5], то  $G^A = \prod_{i \in I} G_i^A$  и канониче-

ское отображение  $\lambda : G \rightarrow G^A$  есть прямое произведение  $\lambda_i (\lambda = \prod \lambda_i)$ . Отсюда следует, что  $\lambda$  – вложение. Верно и обратное: если  $\lambda$  – вложение, то все  $\lambda_i$  тоже вложения, и, следовательно, группы  $G_i$  – точные относительно кольца  $A$ .

**Предложение 1.2.** Пусть  $G$  – частичная  $A$ -группа. Тогда  $G$  является точной относительно кольца  $A$  тогда и только тогда, когда все ее конечно порожденные в категории частичных  $A$ -групп подгруппы являются точными относительно кольца  $A$ .

*Доказательство.* Пусть  $G_i, i \in I$  – множество всех конечно порожденных подгрупп группы  $G$  и  $\lambda_i : G_i \rightarrow G_i^A$  – канонические отображения. Тогда группа  $G = \varinjlim_{i \in I} G_i$  и по теореме 2 из [5]  $G^A = \varinjlim_{i \in I} G_i^A$ . Каноническое отображение  $\lambda : G \rightarrow G^A$  будет  $\lambda = \varinjlim_{i \in I} \lambda_i$ . Ясно, что  $\lambda$  будет вложением тогда и только тогда, когда каждое  $\lambda_i$  является вложением. Отсюда следует доказательство предложения.

**Предложение 1.3.** Пусть  $1 \rightarrow N \xrightarrow{\varphi} G \xrightarrow{\psi} G/N \rightarrow 1$  – короткая точная последовательность частичных  $A$ -групп. Тогда группа является точной тогда и только тогда, когда каноническое отображение  $\lambda_{N,G} : N \rightarrow G^A$  является вложением и  $G/N$  является точной группой.

*Доказательство.* Диаграмма

$$\begin{array}{ccccccc} 1 & \rightarrow & N & \xrightarrow{\varphi} & G & \xrightarrow{\psi} & G/N \rightarrow 1 \\ & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ 1 & \rightarrow & N^A & \xrightarrow{\varphi^A} & G & \xrightarrow{\psi^A} & (G/N)^A \rightarrow 1 \end{array}$$

является коммутативной, что следует из определений  $\varphi^A$  и  $\psi^A$  свойств тензорного пополнения. Пусть  $g \in G$ , и предположим, что  $\lambda_G(g) = 1$ . Так как диаграмма коммутативна и  $\lambda_{G/N}$  – вложение, то

$\psi(g)=1$ , т. е.  $g \in N$ . Так как  $\lambda_{N,G}$  является вложением по условию, то  $g = 1$  и, следовательно,  $\lambda_G$  – вложение.

**Примеры.** В последующих параграфах мы докажем теоремы о точности достаточно широких классов групп. Здесь же приведем примеры неточных групп.

1) Пусть  $G$  – простая группа, содержащая неединичный элемент второго порядка. Так как любая группа является подгруппой некоторой простой группы (см. [6], теорема (3.4)), то запас таких групп достаточно велик. Пусть кольцо  $A$  есть поле рациональных чисел  $Q$ . Тогда тензорное пополнение  $G^A$  равно единичной группе. Это следует из конструкции тензорного пополнения, изложенной в [2]. В самом деле, тензорное умножение на  $Q$  «убивает» элементы конечного порядка и потому, в силу простоты, группу  $G$ .

2)  $G$  – группа без кручения с неоднозначным извлечением корней. Кольцо  $A$  – снова поле  $Q$ . В этом случае группа  $G^A$  есть группа с однозначным извлечением корней. Доказательство этого предложения легко следует из предложения 3 из [2]. Ясно, что такая группа  $G$  не может изоморфно вкладываться в  $G^A$  и, следовательно, она не точная.

**§ 2. Определение и свойства групп класса  $\mathfrak{P}_A^0$**

Пусть  $A$  – кольцо, содержащее кольцо  $Z$  в качестве подкольца.

Пусть  $A$  – кольцо,  $\mathfrak{P}_A^0$  – категория частичных  $A$ -групп (определения в [2]). По определению группа  $G$  из  $\mathfrak{P}_A^0$  принадлежит  $\mathfrak{P}_A^0$ , если выполнены следующие условия:

(1) для любой максимальной абелевой подгруппы  $M$  из  $G$  и любого  $x \notin M$  пересечение  $M \cap M^x = 1$ ;

(2) канонический гомоморфизм  $j : M \rightarrow M \otimes_A A$  является вложением.

Определение тензорного произведения частичных  $A$ -модулей будет приведено в конце этого параграфа.

Докажем некоторые свойства групп из класса  $\mathfrak{P}_A^0$  и приведем примеры.

**Предложение 2.1.** Пусть  $G \in \mathfrak{P}_A^0$ . Тогда

(а) если  $M_1$  и  $M_2$  различные максимальные абелевы подгруппы из  $G$ , то  $M_1 \cap M_2 = 1$ ;

(б) если  $G$  без кручения, то в  $G$  однозначна операция извлечения корня;

(с) отношение коммутирования на неединичных элементах является отношением эквивалентности;

(d) централизатор любого неединичного элемента является максимальной абелевой нормальной подгруппой;

(е) пусть  $G$  без кручения и  $x^r = y^s$ . Отсюда следует, что  $[x, y] = 1$ ;

(f) если  $x$  и  $y$  – элементы из максимальной абелевой подгруппы  $M$  и  $x$  и  $y$  сопряжены в  $G$ , то  $x = y$ .

*Доказательство.* (а) В самом деле, пусть  $x \in M_1 \cap M_2$ . Допустим, что  $x \neq 1$  и выберем элемент  $y \in M_2 \setminus M_1$ . Так как  $x, y \in M_2$  и  $M_2$  – абелева группа, то  $x \in M_1 \cap M_1^y$ , что противоречит определению класса  $\mathfrak{P}_A^0$ .

(б) Пусть  $x^m = y^m$ . Если элемент  $x$  коммутирует с элементом  $y$ , тогда  $(xy^{-1})^m = x^m y^{-m} = 1$ . Так как в  $G$  нет кручения, то отсюда следует, что  $x = y$ . Если  $x$  не коммутирует с  $y$ , то обозначим через  $M$  какую-нибудь максимальную абелеву подгруппу, содержащую элемент  $y$ . Тогда  $x \in M$ . Но  $M \cap M^x \ni y^m \neq 1$ . Противоречие.

(с) Допустим, что даны три неединичных элемента  $x, y, z$ , и пусть коммутатор  $[x, y] = [x, z] = 1$ . Докажем, что отсюда  $[y, z] = 1$ . Если это не так, то рассмотрим максимальные абелевы подгруппы  $M_1 \ni x, y$  и  $M_2 \ni x, z$ . Тогда  $M_1 \cap M_2 \ni x$ , что противоречит пункту (а).

Доказательство (d) непосредственно следует из (с).

(е) Пусть  $x^r = y^s$ ,  $x \neq 1, y \neq 1$ , и предположим, что коммутатор  $[x, y] \neq 1$ . Пусть  $M$  – максимальная абелева подгруппа,

содержащая элемент  $x$ ; тогда  $y \notin M$ . По определению группы из класса  $\mathcal{P}_A^0$   $M \cap M^y = 1$ . С другой стороны,  $y^{-1}x^r y = y^{-1}y^s y = y^s = x^r$ , поэтому  $1 \neq x^r \in M \cap M^y$ .

(f) Пусть  $x = y^f$ . Тогда  $M \cap M^f \neq 1$ . Отсюда следует, что  $f \in M$ , а поэтому  $x = y$ .

Укажем примеры групп из класса  $\mathcal{P}_A^0$ .

(I) Для любого кольца  $A \supseteq Z$  свободные группы являются частичными  $A$ -группами.

Ясно, что эти группы принадлежат классу  $\mathcal{P}_A^0$ .

(II) Обобщим предыдущий пример и рассмотрим класс групп со следующими свойствами:

- (1) группа  $G$  без кручения;
- (2) централизатор любого неединичного элемента является бесконечной циклической подгруппой.

Тогда  $G$  принадлежит классу  $\mathcal{P}_A^0$ . В самом деле, максимальная абелева подгруппа  $M$  в такой группе является бесконечной циклической. Пусть элемент  $x \notin M$ . Тогда, если  $M \cap M^x \neq 1$  и  $M = \langle y \rangle$ , для подходящих целых  $r$  и  $s$   $x^{-1}y^s x = y^r$ . Доказательство такое же, как и во второй части пункта (b). Обозначим  $x^{-1}yx = z$ , тогда  $z^s = y^r$ , отсюда по пункту (e) предложения 2.1 следует, что  $z$  коммутирует с  $y$  и, следовательно,  $x^{-1}yx = y^p$ . Если  $|p| > 1$ , то подгруппа  $\langle x, y \rangle$  содержит подгруппу  $p$ -ичных рациональных чисел. Последняя группа не является циклической подгруппой, что противоречит условию (2). Если  $p = 1$ , то  $x$  коммутирует с  $y$  – противоречие. И, наконец, если  $x^{-1}yx = y^{-1}$ , то  $x^{-2}yx^2 = y$  – снова противоречие с пунктом (e) из предложения 2.1.

**Предложение 2.2.** Свободное произведение групп из класса  $\mathcal{P}_A^0$  также принадлежит классу  $\mathcal{P}_A^0$ .

*Доказательство.* Свободные произведения  $G = *_{i \in I} G_i$  групп  $G_i$ ,  $i \in I$  из класса

$\mathcal{P}_A^0$  сами являются группами из этого класса. По теореме Куроша о подгруппах свободного произведения групп (см. 4.9.1 [7]) существуют две возможности:

(1) максимальная абелева подгруппа  $M$  содержится в подгруппе, сопряженной с одним из множителей, т.е. в подгруппе вида  $G_i^y$ ,  $y \in G$ ;

(2)  $M$  – максимальная циклическая подгруппа, порожденная элементом, редуцированная длина которого  $\geq 2$ .

В первом случае если  $x \notin M$ , но  $x \in G_i^y$ , то  $M \cap M^x = 1$  следует из того, что группа  $G_i \in \mathcal{P}_A^0$ . Если  $x \notin G_i^y$ , то  $M^x \cap G_i^y = 1$ , а потому  $M \cap M^x = 1$ .

Во втором случае если  $x \notin M$ , то  $M \cap M^x = 1$ , так как разные степени одного и того же элемента, редуцированная длина которого  $\geq 2$ , не сопряжены между собой (см. [7], теорема 4.6).

Абелевы частичные  $A$ -группы из категории  $\mathcal{P}_A$  являются частичными  $A$ -модулями.

Многие понятия общего характера для  $A$ -модулей переносятся и на категорию частичных  $A$ -модулей. Например, понятие частичного  $A$ -подмодуля, частичного  $A$ -гомоморфизма и т. д.

Для наших целей важно, что понятие тензорного произведения  $A$ -модулей обобщается до понятия тензорного произведения частичных  $A$ -модулей. В определении этого понятия мы будем следовать работе [8].

**Предложение 2.3.** Пусть  $M, N$  – некоторые частные  $A$ -модули. Тогда существует пара  $(T, g)$ , состоящая из частичного  $A$ -модуля  $T$  и частичного  $A$ -билинейного отображения  $g: M \times N \rightarrow T$ , со следующим свойством: для любого частичного  $A$ -модуля  $P$  и частичного  $A$ -билинейного отображения  $f: M \times N \rightarrow P$  существует единственное частичное  $A$ -линейное отображение  $f': T \rightarrow P$  такое, что  $f = f' \circ g$  (иными словами, любое частичное билинейное отображение  $M \times N$  можно пропустить через  $T$ ).

Если  $(T, g), (T', g')$  – две пары с таким свойством, то существует  $A$ -изоморфизм  $j: T \rightarrow T'$ , для которого  $j \circ g = g'$ .

*Доказательство.* Единственность доказывается стандартным образом.

*Существование.* Для доказательства предложения введем свободный  $A$ -модуль  $C$ . Элементы  $C$  – это формальные линейные комбинации элементов  $M \times N$  с коэффициентами из  $A$ , т. е. выражения вида

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i(x_i, y_i) \quad (\alpha_i \in A, x_i \in M, y_i \in N).$$

Пусть  $D$  – подмодуль  $C$ , порожденный всеми элементами вида

$$\begin{aligned} (x+x', y) - (x, y) - (x', y), \\ (x, y+y') - (x, y) - (x, y'), \\ (\alpha x, y) - \alpha(x, y), \\ (x, \alpha y) - \alpha(x, y) \end{aligned}$$

при условии, что  $\alpha x$  определено в  $M$ , а  $\alpha y$  – в  $N$ .

Положим  $T = C/D$ . Для каждого базисного элемента  $(x, y)$  из  $C$  обозначим через  $x \otimes y$  его образ в  $T$ . Модуль  $T$  порожден элементами вида  $x \otimes y$ , и из определения ясно, что они удовлетворяют соотношениям

$$\begin{aligned} (x+x') \otimes y = x \otimes y + x' \otimes y, x \otimes (y+y') = x \otimes y + x \otimes y', \\ (\alpha x) \otimes y = x(\alpha y) = \alpha(x \otimes y). \end{aligned}$$

Иными словами, отображение  $g: M \times N \rightarrow T$ , определенное формулой  $g(x, y) = x \otimes y$ ,  $A$ -билинейно. Любое отображение  $f$  произведения  $M \times N$  в частичный  $A$ -модуль  $P$  продолжается по линейности до гомоморфизма  $A$ -модулей  $\bar{f}: C \rightarrow P$ . Если  $f$ , сверх того, частично  $A$ -билинейно, то  $\bar{f}$  обращается в нуль на образующих  $D$  и, значит, на всем  $D$ . Поэтому  $\bar{f}$  индуцирует однозначно определенный частичный  $A$ -гомоморфизм  $f'$  модуля  $T = C/D$  в  $P$ , для которого  $f'(x \otimes y) = f(x, y)$ . Поэтому пара  $(T, g)$  обладает сформулированным свойством.

**Замечание.** Построенный выше модуль  $T$  называется тензорным произведением модулей  $M, N$  и обозначается

$M \otimes_A N$  или просто  $M \otimes N$ , если ясно, какое кольцо  $A$  имеется в виду. Отметим, что тензорное произведение  $M \otimes_A N$  частичных  $A$ -модулей является полным  $A$ -модулем.

### § 3. Точность групп из класса $\mathfrak{P}_A^0$

В этом параграфе будет доказан основной результат статьи.

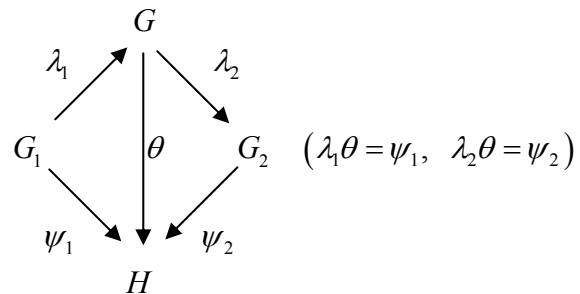
**Теорема 3.1.** Пусть  $Z$  – подкольцо кольца  $A$  и группа  $G \in \mathfrak{P}_A^0$ , причем в  $G$  и  $A^+$  нет элементов порядка 2. Тогда группа  $G$  точна, т. е. каноническое отображение  $\lambda: G \rightarrow G^A$  является вложением.

Прежде чем приступить к доказательству, изложим некоторые известные факты о свободных произведениях с объединенной подгруппой.

Пусть  $H_i \leq G_i$  – группы,  $i = 1, 2$ . Пусть, кроме того, зафиксирован эпиморфизм  $\varphi: H_1 \rightarrow H_2$ . Назовем  $G$  свободным произведением групп  $G_1$  и  $G_2$  с подгруппами  $H_1$  и  $H_2$ , объединенными относительно  $\varphi$ , и обозначим  $G$  через  $*(G_1, G_2, H_1, H_2, \varphi)$ , если для  $G$  выполнено следующее универсальное свойство:

(1) существуют гомоморфизмы  $\lambda_1: G_1 \rightarrow G, \lambda_2: G_2 \rightarrow G$  такие, что  $G$  порождается  $\lambda_1(G_1)$  и  $\lambda_2(G_2)$ ;

(2) для любой группы  $H$  и гомоморфизмов  $\psi_1: G_1 \rightarrow H, \psi_2: G_2 \rightarrow H$ , согласованных с  $\varphi$ , существует гомоморфизм  $\theta: G \rightarrow H$ , что диаграмма



коммутативна.

Если  $G_1 = \langle X_1 | R_1 \rangle, G_2 = \langle X_2 | R_2 \rangle$  – задание  $G_1$  и  $G_2$  через порождающие элементы и определяющие соотношения, то не трудно доказать, что

$$G = \langle X_1 \cup X_2 | R_1 \cup R_2 \cup S \rangle,$$

где  $S = \{h_1^\varphi = h_2 \text{ для всех } h_1 \in H^1\}$  – за-

дание  $G$  с помощью порождающих элементов и определяющих соотношений. Рассмотрим частную форму этой конструкции, когда  $\varphi$  является изоморфизмом между  $H_1$  и  $H_2$ .

**Теорема 3.2** ([7]). Пусть  $G = *(G_1, G_2, H_1, H_2, \varphi)$  и  $\varphi$  – изоморфизм. Тогда

(1) отображения  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  являются вложениями, что позволяет отождествить  $\lambda_1(G_1)$  с  $G_1$ ,  $\lambda_2(G_2)$  с  $G_2$  и  $H_1$  с  $H_2$ ;

(2) выберем систему представителей правых смежных классов группы  $G_1$  по подгруппе  $H_1$  и аналогично  $G_2$  по подгруппе  $H_2$ . Тогда каждый элемент  $g$  из  $G$  имеет единственную нормальную форму записи в виде  $g = hc_1c_2 \cdots c_r$ , где  $h \in H_1 = H_2$ ,  $c_t$  – представитель смежного класса,  $t = 1, \dots, r$ ,  $c_t$  и  $c_{t+1}$  не лежат одновременно в  $G_1$  и  $G_2$ .

Параметр  $r$  в нормальной записи элемента  $g$  будем называть длиной элемента  $g$ . Свободное произведение с объединением является обобщением свободного произведения. Многие утверждения, справедливые для свободных произведений, имеют аналоги и для свободных произведений с объединенной подгруппой, хотя картина в последнем случае является более сложной. Приведем необходимые нам примеры таких утверждений.

**Теорема 3.3** ([7]). Пусть  $G = *(G_1, G_2, H_1, H_2, \varphi)$  и  $\varphi$  – изоморфизм,  $x, y \in G$  и  $xu = ux$ . Тогда

(i)  $x$  или  $y$  лежит в подгруппе, сопряженной с  $H = H_1 = H_2$ ;

(ii) если ни  $x$ , ни  $y$  не лежат в подгруппе, сопряженной с  $H$ , но  $x$  принадлежит некоторой подгруппе, сопряженной с  $G_1$  или  $G_2$ , то  $y$  принадлежит той же подгруппе;

(iii) если ни  $x$ , ни  $y$  не лежат в подгруппе, сопряженной с  $G_1$  или  $G_2$ , то  $x = ghg^{-1}z^j$ ,  $y = gh'g^{-1}z^k$ , где  $g, z \in G$ ,  $h, h' \in H$  и элементы  $ghg^{-1}$ ,  $gh'g^{-1}$  и  $z$  попарно перестановочны.

Приведем еще один пример, связанный с проблемой сопряженности. Элемент  $g$  группы  $G = *(G_1, G_2, H_1, H_2, \varphi)$ ,  $\varphi$  – изоморфизм, называется циклически несократимым, если в нормальной форме  $g = hc_1c_2 \cdots c_r$  при  $r > 1$  представители  $c_1$  и  $c_r$  не лежат одновременно в  $G_1$  или в  $G_2$ .

**Теорема 3.4** ([7]). Пусть  $G = *(G_1, G_2, H_1, H_2, \varphi)$ ,  $\varphi$  – изоморфизм. Тогда каждый элемент группы  $G$  сопряжен с некоторым циклически несократимым элементом. Далее, пусть  $g$  – циклически несократимый элемент  $G$ . Тогда

(i) если  $g$  сопряжен с элементом  $h \in H$ , то  $g$  лежит в  $G_1$  или в  $G_2$  и существует последовательность элементов  $h, h_1, h_2, \dots, h_r, g$ , где  $h_i \in H$ , соседние члены которой сопряжены в  $G_1$  или в  $G_2$ ;

(ii) если  $g$  сопряжен с элементом  $g'$ , причем  $g' \in G_1$  или  $g' \in G_2$ , но  $g$  не лежит в подгруппе, сопряженной с  $H$ , то  $g$  и  $g'$  лежат в одном и том же сомножителе (в  $G_1$  или  $G_2$ ) и сопряжены в нем;

(iii) если  $g$  сопряжен с элементом  $p_1, \dots, p_r$ , где  $r \geq 2$  и  $p_i, p_{i+1}$  так же, как и  $p_1, p_r$  не лежат в одном сомножителе, то  $g$  можно получить, циклически переставляя  $p_1, \dots, p_r$ , а затем сопрягая полученный элемент подходящим элементом из  $H$ .

**Следствие 3.1** ([7]). Произвольный элемент конечного порядка группы  $G = *(G_1, G_2, H_1, H_2, \varphi)$  лежит в подгруппе, сопряженной с  $G_1$  или с  $G_2$ .

**Следствие 3.2** ([7]). Пусть  $G$  является свободным произведением групп  $A, B$  и  $C$  с объединениями из множителя  $A$ , т. е. каждое определяющее соотношение либо состоит из однотипных образующих, либо имеет вид  $U(a_\nu) = V(b_\mu)$  или  $U(a_\nu) = W(c_\zeta)$ . Тогда произвольная подгруппа  $H$  группы  $G$ , тривиально пересекающаяся с каждой подгруппой, сопряженной с  $A, B$  или  $C$ , является свободной группой.



Мы воспользуемся этим следствием в том случае, когда группа  $C = 1$ .

Теперь дадим информацию о группе  $G_1$ , которая получается из  $G$  с помощью первого элементарного шага конструкции тензорного пополнения. Группа  $G_1$  строится следующим образом: в  $G$  выбираем максимальную абелеву подгруппу  $M, M^A = M \otimes_A A, j: M \rightarrow M \otimes_A A$  – каноническое отображение. Затем строим группу

$$G_0^1 = *(G, M^A, M, j(M), j),$$

т. е.  $G_0^1$  есть свободное произведение групп  $G$  и  $M^A$  с объединением  $M$  и  $j(M)$  относительно гомоморфизма  $j$ . И, наконец,  $G^1 = G_0^1 / H$ , где  $H = id(1)$  – наименьший  $\mathfrak{m}$ -идеал, содержащий 1 (более подробно об этой конструкции см. § 4 в [2]). Базовыми для доказательства теоремы являются две леммы 3.1 и 3.2.

**Лемма 3.1.** Канонический гомоморфизм  $i^1: G \rightarrow G^1$  является вложением.

**Лемма 3.2.** Группа  $G^1$  принадлежит классу  $\mathfrak{p}_A^0$ .

Приступим к доказательству леммы 3.1. Так как по определению класса  $\mathfrak{p}_A^0$  гомоморфизм  $j: M \rightarrow M \otimes_A A$  является вложением, то группа  $G$  является подгруппой  $G_0^1$  по теореме 3.2 [7]. Для завершения доказательства леммы 3.1 достаточно проверить, что  $\mathfrak{m}$ -идеал  $N$  равен 1. С этой целью детально исследуем вопрос о том, когда элементы  $x, y$  коммутируют в  $G^1$ .

**Лемма 3.3.** Пусть  $x$  и  $y$  – элементы из группы  $G^1$  и  $xy = yx$ . Тогда

(1)  $x$  и  $y$  лежат в подгруппе, сопряженной либо с  $G$ , либо с  $M^A$ ;

(2)  $x$  и  $y$  являются степенями некоторого элемента  $z$ .

*Доказательство.* Пусть пара элементов  $x, y$  удовлетворяет пункту (i) в заключении теоремы 3.3 ([7]) и пусть, для определенности,  $x \in M^z$ . Сопрягая, если нужно,  $x$  и  $y$  элементом  $z^{-1}$ , не ограничивая общности рассуждений, можем считать, что  $1 \neq x = t \in M$ . Пусть  $y = c_1 d_1 \cdots c_k d_k m_1$  – каноническая запись элемента  $y$ , где  $c_i$  –

представители классов смежности группы  $G$  по  $M$ , а  $d_i$  – представители классов смежности. Тогда  $y = c_1 d_1 \cdots c_k d_k m_1 m$  – каноническая запись элемента  $yx$ . В обратном порядке произведение  $x$  и  $y$  имеет вид

$$xy = m c_1 d_1 \cdots c_k d_k m_1. \quad (3.1)$$

Предположим, что  $c_1 \neq 1$ . Для нахождения записи элемента  $xy$  начнем перетаскивать  $m$  в конец записи (3.1). Так как  $M \cap M^0 = 1$  по определению класса  $\mathfrak{p}_A^0$ , то  $m c_1 \neq c_1 m_2$ . Отсюда следует, что  $m c_1 = c_1' m_2$  и  $c_1' \neq c_1$ . Поэтому  $xy \neq yx$ . Это же рассуждение годится и в случае, когда один из  $c_i \neq 1 (i = 1, \dots, k)$ . Следовательно, если  $xy = yx$ , то  $y = dm$ , а потому  $y \in M^A$ .

Если пара  $x, y$  удовлетворяет условию (ii) теоремы 3.3 ([7]), то они принадлежат подгруппе, сопряженной либо с  $G$ , либо с  $M^A$ , что согласуется с формулировкой леммы.

Наконец, пусть пара  $x, y$  удовлетворяет условию (iii) теоремы 3.3 ([7]). Тогда ни  $x$ , ни  $y$  не лежат в подгруппе, сопряженной с  $G$ , либо  $M^A$  и  $x = gm g^{-1} z^l, y = g m' g^{-1} z^k$ , где  $g, z \in G_0^1$ , и элементы  $gm g^{-1}, g m' g^{-1}$  и  $z$  попарно перестановочны.

Переходя к паре  $x' = g^{-1} x g, y' = g^{-1} y g$ , мы можем считать, что  $x = m z^l, y = m' z^k$ , причем элементы  $m, m'$  и  $z$  попарно перестановочны. Если хотя бы один из элементов  $m$  или  $m'$  не равен 1, то по первой части доказательства леммы  $z \in M^A$ . Но тогда  $x = m z^l \in M^A$  и  $y = m' z^k \in M^A$ , что противоречит выбору  $x$  и  $y$ . Следовательно,  $m = m' = 1$ , а потому  $x = z^l$  и  $y = z^k$ .

**Лемма 3.4.** Максимальная абелева подгруппа в группе  $G_0^1$  может быть только одной из следующих трех типов:

(1)  $N^g$ , где  $N$  – максимальная абелева подгруппа в  $G, g \in G_0^1$ ;

(2)  $(M^A)^g$ , где  $g \in G_0^1$ ;

(3) бесконечная циклическая.

*Доказательство.* Пусть  $M'$  – максимальная абелева подгруппа  $G_0^1$ , не являющаяся бесконечной циклической. Если  $M'$  – локально циклическая группа, то она типа (1) или (2), так как если  $xu = ux$  и пара  $x, y$  удовлетворяет условию (iii) теоремы 3.3 ([7]), то по доказательству леммы 3.3  $x = z^l, y = z^k$  и  $|x| \geq l|z|, |y| \geq k|z|$  и  $|z| \geq 2$ , где  $|x|$  – длина элемента  $x$ . Поэтому в случае (iii) теоремы 3.3 ([7])  $M'$  не может быть локально циклической, но не циклической группой.

Пусть теперь  $x, y$  – любая пара элементов из  $M'$ , не принадлежащая одной циклической группе. Тогда по лемме 3.3 следует, что  $M'$  принадлежит либо  $G^f$ , либо  $(M^A)^f$ . Если выполняется условие  $M' \subset G^f$ , то группа  $M'$  первого типа. Если же  $M' = (M^A)^f$ , то она является группой второго типа.

Вернемся теперь к доказательству леммы 3.1. По определению структуры  $A$ -частичной группы  $G_0^1$  и по лемме 3.4 все  $m$ -коммутаторы в  $G_0^1$  равны 1, а потому  $H = id(1)$  равен 1, т. е.  $G^1 = G_0^1$ . Так как  $G$  изоморфно вкладывается в  $G_0^1$ , то это верно и для группы  $G^1$ .

Лемма доказана.

Приступим к доказательству леммы 3.2. Докажем, что группа  $G^1 \in \mathcal{P}_A^0$ . Доказательство будем вести с помощью теоремы 3.4 ([7]). Пусть  $N$  – максимальная абелева подгруппа в  $G^1$  первого типа (см. лемму 3.4 с учетом того, что доказано  $G^1 = G_0^1$ ). Не ограничивая общности рассуждений, можно считать, что  $N \subset G$ . Предположим, что для  $N$  не выполняется условие (1) из определения класса  $\mathcal{P}_A^0$ . Тогда существует элемент  $f \in G^1, f \notin N, N \cap N^f \neq 1$ . В этом случае существует пара неединичных элементов  $x, y$  из  $N$  таких, что  $x = y^f$ . Так как  $N \cap M = 1$  по предложению 2.1 (а), то па-

ра  $x, y$  удовлетворяет свойству (ii) теоремы 3.4 ([7]). По этому свойству элементы  $x$  и  $y$  сопряжены в  $G$  с помощью элемента  $f_1$ . Тогда  $N \cap N^{f_1} \neq 1$  в  $G$ . Так как  $G \in \mathcal{P}_A^0$ , то отсюда следует, что  $f_1 \in N$ , а потому  $x = y$ . Следовательно, исходный элемент  $f$  перестановочен с  $x$ . По теореме 3.3 ([7])  $f \in G$  и по предложению 2.1 (с)  $f \in N$ . Это доказывает, что свойство (1) в определении класса  $\mathcal{P}_A^0$  выполнено для  $N$ . Ясно также, что второе свойство определения класса  $\mathcal{P}_A^0$  также выполнено для  $N$ .

Далее, пусть  $N$  – максимальная абелева подгруппа второго типа, т. е.  $N = (M^A)^g, g \in G^1$ .

Проверим выполнение первого свойства в определении  $\mathcal{P}_A^0$  для  $N$  в этом случае. Не ограничивая общности рассуждений, можно считать, что  $N = M^A$ . Пусть  $f \notin M^A, f \in G^1$ , и предположим, что  $M^A \cap (M^A)^f \neq 1$ . Тогда существует пара элементов  $x, y$  из  $M^A$  таких, что  $x = y^f$ . Если, по крайней мере, один из элементов  $x$  или  $y$  не принадлежит исходной подгруппе  $M$ , то выполнено условие (ii) теоремы 3.4 ([7]) и дальнейшее доказательство в этом случае такое же, как и для подгруппы первого типа. Если  $x, y \in M$ , то по пункту (i) теоремы 3.4 ([7])  $x$  сопряжен с  $y$  в  $G$ , а тогда по предложению 2.1  $fx = y$ . Дальнейшее доказательство такое же, как и для групп первого типа.

Наконец, пусть  $N$  – бесконечная циклическая группа и  $N$  не содержится ни в какой подгруппе, сопряженной с  $G$  либо с  $M^A$ . Пусть  $N$  порождается элементом  $z$ . Тогда, в силу наших предположений, редуцированная длина  $\|z\| \geq 2$ . Далее предположим, что для  $N$  не выполнено условие (1) в определении класса  $\mathcal{P}_A^0$ , т. е. существует  $f \in G^1$  такой, что  $N \cap N^f \neq 1$ . Пусть  $x, y$  – пара элементов из  $N$  такая, что  $x^f = y$  и пусть  $x = z^i, y = z^j$ . Так как редуцированная длина  $\|x\| = |i|\|z\| \geq 2$ , то выполнены условия (iii) теоремы 3.4 ([7]). По

теореме 4.6 ([9])  $\|x\| = \|y\|$ , а потому  $i = \mp j$ . Если  $i = j$ , то  $x = y$  и элемент  $f$  перестановочен с  $x$ .

Для продолжения доказательства леммы 3.2 сформулируем и докажем леммы 3.5 и 3.6.

**Лемма 3.5.** Отношение коммутирования на неединичных элементах группы  $G^1$  является отношением эквивалентности.

*Доказательство.* Пусть задана тройка неединичных элементов  $x, y, z \in G^1$  таких, что  $[x, y] = [x, z] = 1$ . Докажем, что  $[y, z] = 1$ . По лемме 3.2 для пары коммутирующих элементов существуют две возможности: (1) и (2). Из леммы 3.3 также следует, что для двух пар  $x, y$  и  $x, z$  одновременно выполняется либо возможность (1), либо возможность (2). В первом случае все три элемента лежат либо в  $G$ , либо в  $M^A$ . Так как группа  $G \in \mathfrak{p}_A^0$ , а группа  $M^A$  абелева, то  $[y, z] = 1$ . Во втором случае пара  $x, y$  лежит в бесконечной циклической, порожденной элементом  $u, \|u\| \geq 2$ . Аналогично элементы  $x, z$  содержатся в бесконечной циклической, порожденной элементом  $v, \|v\| \geq 2$ . Отсюда следует, что существуют целые числа  $r$  и  $s$  такие, что  $u^r = v^s$ . Если  $[u, v] = 1$ , то  $[y, z] = 1$ ; если же  $[u, v] \neq 1$ , то рассмотрим подгруппу  $H = \langle u, v \rangle$ . Элемент  $t = u^r = v^s$  централен в группе  $H$ . Предположим  $H$  пересекается с подгруппой, сопряженной с  $G$  или с  $M^A$ , не по единице. Это противоречит лемме 3.3, ибо  $\|t\| \geq \|r\| \|u\| \geq 2$  и элемент  $t$  коммутирует с элементом, циклически редуцированная длина которого равна единице. Следовательно, для подгруппы  $H$  выполнены условия следствия 3.2 ([7]), а потому  $H$  свободная группа ранга 2. Полученное противоречие доказывает лемму.

**Лемма 3.6.** Если  $x^f = x^{-1}$  в  $G^1$ , то  $x = 1$ .

*Доказательство.* Так как  $x^{f^2} = x$  и по следствию 3.1 ([7]) элементы конечного порядка лежат в подгруппах, сопряженных с множителями, то в группе  $G^1$  нет инволюций. Следовательно,  $f^2 \neq 1$ . Тогда  $[x, f^2] = 1, [f, f^2] = 1$ . Отсюда по лемме 3.5  $[x, f] = 1$ , а потому  $x^f = x = x^{-1}$ . Следовательно,  $x = 1$ .

Продолжим доказательство леммы 3.2. По лемме 3.5 подгруппа, порожденная элементами  $f$  и  $z$ , является абелевой, что противоречит тому, что  $N$  – максимальная абелева подгруппа.

По лемме 3.6 случай  $i = -j$  невозможен. Лемма 3.2 доказана.

Приступим к доказательству основной теоремы 3.1. Доказательство проведем транс-финитной индукцией по числу элементарных шагов, необходимых для построения группы  $G^A$ .

Если  $\alpha$  не предельный ординал, то каноническое отображение из  $G^{\alpha-1}$  в  $G^\alpha$  является вложением по лемме 3.1, а группа  $G^\alpha \in \mathfrak{p}_A^0$ . Осталось разобрать случай, когда  $\alpha$  – предельный ординал. В силу леммы 3.1  $G^\alpha = \bigcup_{\beta < \alpha} G^\beta$  и подгруппа с меньшим ординалом изоморфно вкладывается в группу с большим ординалом и, по предположению индукции, все группы  $G^\beta \in \mathfrak{p}_A^0$ . Ясно, что каноническое отображение  $G \rightarrow G^\alpha$  является вложением, так как  $G$  изоморфно вкладывается в  $G^\beta$  для всех  $\beta < \alpha$  по индукционному предположению. Осталось для завершения доказательства теоремы доказать, что  $G^\alpha \in \mathfrak{p}_A^0$ .

**Лемма 3.7.** Пусть  $M$  – максимальная абелева подгруппа группы  $G^\alpha$  и  $M^\beta = M \cap G^\beta$ . Тогда  $M^\beta$  либо равно 1, либо  $M^\beta$  – максимальная абелева подгруппа в  $G^\beta$ .

*Доказательство.* Предположим, что  $M^\beta \neq 1, z \in M^\beta, z \neq 1$ ; предположим еще, что  $M^\beta$  не максимальная абелева подгруппа. Тогда существует элемент  $x$ ,

который коммутирует со всеми элементами из  $M^\beta$ , но не принадлежит  $M^\beta$ . Пусть  $y$  – произвольный неединичный элемент из подгруппы  $M$ . Тогда существует такой ординал  $\beta \leq \gamma < \alpha$ , что  $y \in G^\gamma$ . Так как  $x$  коммутирует с  $z$  и  $y$  коммутирует с  $z$ , а группа  $G^\beta \in \mathfrak{P}_A^0$ , то  $x$  коммутирует с произвольным элементом  $y \in M$ . Следовательно,  $x \in M$ , а потому  $x \in M^\beta = M \cap G^\beta$ . Полученное противоречие доказывает лемму.

Докажем, что  $G^\alpha \in \mathfrak{P}_A^0$ . Пусть  $M$  – максимальная абелева подгруппа  $G^\alpha$  и  $f \notin M$ . Если  $M \cap M^f \neq 1$ , то существует пара неединичных элементов  $x$  и  $y$  таких, что  $x = y^f$ . Рассмотрим такой ординал  $\gamma < \alpha$ , что все три элемента принадлежат  $G^\gamma$  и пусть  $M^\gamma = M \cap G^\gamma$ ,  $M^\gamma \neq 1$  и по лемме 3.7  $M^\gamma$  – максимальная абелева подгруппа в  $G^\gamma$  и  $f \notin M^\gamma$ . По построению  $M^\gamma \cap (M^\gamma)^f \neq 1$ , что противоречит тому, что  $G^\gamma \in \mathfrak{P}_A^0$ .

Проверим, наконец, что каноническое отображение  $j_M : M \rightarrow M \otimes_A A$  является вложением. В силу предложения 1.2 достаточно проверить это только для конечно порожденных подгрупп группы  $M$ . Любая конечно порожденная подгруппа  $M$  содержится в некотором  $G^\gamma$ , где  $\gamma < \alpha$ . Так как по лемме 3.7  $M \cap G^\gamma = M^\gamma$  есть максимальная абелева подгруппа в  $G^\gamma$  и  $G^\gamma \in \mathfrak{P}_A^0$ , то каноническое отображение

$$j_{M^\gamma} : M^\gamma \rightarrow M^\gamma \otimes_A A$$

является вложением. Отсюда следует, что каноническое отображение  $j_M$  является вложением. Теорема доказана.

Сделаем два замечания.

*Замечание 1.* Лемма 3.2 и лемма 3.6 не верны для групп с инволюциями.

В самом деле, пусть  $z$  – элемент второго порядка,  $y \in M^A \setminus M$  и  $x = y^{-1}zyz$ ,  $f = y^{-1}zy$ , тогда  $\|x\| = 4$  и

$$fxfx = y^{-1}zyy^{-1}zyzy^{-1}zyy^{-1}zyz = 1$$

Следовательно,  $x^f = x^{-1}$  и  $G^{-1} \notin \mathfrak{P}_A^0$ .

*Замечание 2.* Определим класс групп  $\mathfrak{P}_A^*$ , более широкий, чем класс  $\mathfrak{P}_A^0$ . Будем говорить, что группа  $G \in \mathfrak{P}_A^*$ , если для любой ее максимальной подгруппы  $M$  выполнено условие:  $M$  либо  $A$ -модуль, либо  $M$  удовлетворяет условиям (1) и (2) в определении класса  $\mathfrak{P}_A^0$ .

Тогда основная теорема справедлива и для групп класса  $\mathfrak{P}_A^*$ .

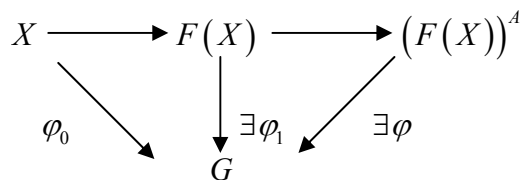
#### § 4. Приложения к свободным конструкциям

Сформулируем понятие свободной  $A$ -группы. Пусть  $A$  – ассоциативное кольцо с единицей 1.  $X$  – произвольное множество.

**Определение.**  $A$ -группа  $FA(X)$  с множеством  $A$ -порождающих  $X$  называется свободной  $A$ -группой с базой  $X$ , если выполнено следующее условие: для каждой  $A$ -группы  $G$  – произвольное отображение  $\varphi_0 : X \rightarrow G$  продолжается до  $A$ -гомоморфизма  $\varphi : F_A(X) \rightarrow G$ .  $X$  называется множеством свободных  $A$ -порождающих  $FA(X)$ . Мощность  $|X|$  называется рангом группы  $FA(X)$ .

**Теорема 4.1.** Для любых  $X$  и  $A$  свободная  $A$ -группа  $FA(X)$  существует и единственна с точностью до  $A$ -изоморфизма.

*Доказательство.* Пусть  $F(X)$  – свободная группа в обычном смысле. Тогда ее тензорное  $A$ -пополнение является свободной  $A$ -группой с базой  $X$ . Действительно, пусть  $\varphi_0 : X \rightarrow G$  – произвольное отображение из  $X$  в  $A$ -группу  $G$ .



Тогда  $\varphi_0$  продолжается до гомоморфизма  $\varphi_1 : F(X) \rightarrow G$  по свойству свободной группы. А последнее отображение продолжается до  $A$ -гомоморфизма  $\varphi : (F(X))^A \rightarrow G$ .

Следовательно,  $\varphi : (F(X))^A$  – свободная  $A$ -группа с базой  $X$ .

Единственность следует из единственности тензорного пополнения.

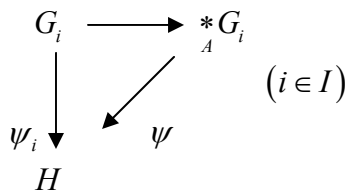
Сформулируем следствие из основной теоремы 3.1 и теоремы 4.1.

**Следствие 4.1.** Пусть  $A$  кольцо, содержащее  $Z$  в качестве подкольца. Тогда свободная группа  $F(X)$  точна относительно кольца  $Z$ . Другими словами,  $F(X)$  является подгруппой  $F_A(X)$ .

*Доказательство.* По теореме 4.1  $F_A(X) \cong (F(X))^A$ . Так как  $F(X) \in \mathcal{P}_0$  и не содержит инволюций, то по теореме 3.1 каноническое отображение  $\lambda : F(X) \rightarrow (F(X))^A$  является вложением.

Введем конструкцию свободного произведения в категории  $A$ -групп.

**Определение.** Пусть  $G_i, i \in I$   $A$ -группы.  $A$ -группа  $*G_i$  называется свободным произведением в категории  $\mathfrak{M}_A$ , если  $A$ -гомоморфизмы  $\varphi_i : G_i \rightarrow *G_i$  такие, что для любых  $A$ -гомоморфизмов  $\psi_i : G_i \rightarrow H$ , где  $H$  – произвольная  $A$ -группа, существует  $A$ -гомоморфизм  $\psi : *G_i \rightarrow H$ , делающий коммутативной следующую диаграмму:



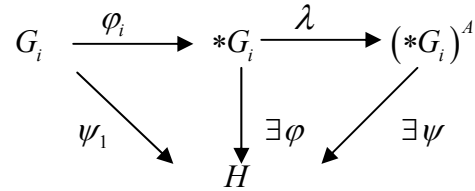
и  $*G_i$   $A$ -порождается множеством  $\{\varphi_i(g_i) \mid g_i \in G_i, i \in I\}$ . Из категорных соображений следует, что группа  $*G_i$  определена однозначно с точностью до  $A$ -изоморфизма.

**Теорема 4.2.** Пусть  $A$  – кольцо, содержащее  $Z$  в качестве подкольца,  $G_i, i \in I$  – некоторое множество  $A$ -групп. Тогда

$$(1) \quad *G_i^A \cong (*G_i^A)^A;$$

(2) каноническое отображение  $\lambda : *G_i \rightarrow (*G_i)^A$  является вложением.

*Доказательство.* (1) Пусть  $\varphi_i^o : G \rightarrow *G_i$  и  $\lambda : *G_i \rightarrow (*G_i)^A$  – каноническое отображение из определения тензорного пополнения. Обозначим  $\lambda \circ \varphi_i^o = \varphi_i$ . Тогда  $\varphi_i : G_i \rightarrow (*G_i)^A$  есть совокупность  $A$ -гомоморфизмов. Пусть  $\psi_i : G_i \rightarrow H$  – произвольные  $A$ -гомоморфизмы. Для того чтобы доказать, что группа  $*G_i^A$  является свободным произведением в категории  $\mathfrak{M}_A$ , мы должны замкнуть диаграмму



до коммутативной. По определению свободного произведения  $*G_i$  существует частичный  $A$ -гомоморфизм  $\varphi : *G_i \rightarrow H$ .

В силу универсального свойства тензорного пополнения существует  $A$ -гомоморфизм  $\psi$ , продолжающий  $\varphi$ . Он и будет искомым. Свойство порождаемости  $(*G_i)^A$  образами  $\varphi_i(G_i)$  также выполнено, а потому  $(*G_i)^A$  является свободным произведением в  $\mathfrak{M}_A$ .

(2) Для доказательства того, что  $\lambda$  есть вложение, достаточно по замечанию 2 из § 3 доказать, что группа  $*G_i \in \mathcal{P}_A^0$ . Последнее легко следует из теоремы Куроша о подгруппах свободного произведения.

**Теорема 4.3.** Класс  $\mathcal{P}_A^0$  замкнут относительно свободных произведений.

*Доказательство.* Пусть  $G_i, i \in I$  семейство групп из  $\mathcal{P}_A^0$ . Пусть  $\lambda_i$  – канонические отображения  $G_i$  в  $G_i^A$ . По условию они являются вложениями. Отсюда следует, что отображение  $\lambda : *G_i \rightarrow (*G_i)^A$  также является вложением. По пункту (2) теоре-

мы 4.2 отображение  $\varphi: G_i^A \rightarrow *G_i^A$  также является вложением. По пункту (1) этой теоремы  $*G_i^A \cong (*G_i^A)^A$ .

Отсюда и следует доказательство теоремы.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Lyndon R.C. Groups with parametric exponents // Trans. Amer. Math. Soc. 96(1960), 518–533.
- [2] Мясников А.Г., Ремесленников В.Н. Степенные группы. I. Основы теории и тензорные пополнения // Сиб. матем. журнал. 35. (1994). № 5. С. 1106–1118.
- [3] Myasnikov A.G., Remeslennikov V.N. Exponential groups. II. Extensions of centralizers and tensor completion of CSA-groups // Internat. J. Algebra Comput. 6 (1996). № 6. 687–711.
- [4] Baumslag G., Myasnikov A., Remeslennikov V. Discriminating completions of hyperbolic groups. Dedicated to John Stallings on the occasion of his 65<sup>th</sup> birthday // Geom. Dedicata 92 (2002). 115–143.
- [5] Амаглобели М.Г. О перестановочности функтора тензорного пополнения с основными групповыми операциями // ИИТПМ. 1993. № 7.
- [6] Линдон Р., Шупп П. Комбинаторная теория групп. М.: Мир, 1980.
- [7] Магнус В., Каррас В., Солитер Д. Комбинаторная теория групп. М.: Наука, 1974.
- [8] Атья М., Макдональд И. Введение в коммутативную алгебру. М.: Мир, 1972.

## О СКРУЧЕННОЙ СОПРЯЖЕННОСТИ ЭЛЕМЕНТОВ НИЛЬПОТЕНТНЫХ АЛГЕБР ЛИ

В статье исследуется проблема скрученной сопряженности и ее классы эквивалентности в конечно порожденных нильпотентных алгебрах Ли над полем  $F$ , допускающим эффективные вычисления.

*Ключевые слова:* нильпотентная алгебра Ли, эндоморфизм, скрученная сопряженность, число Райдемайстера.

### 1. Введение

Пусть  $L$  – алгебра Ли над произвольным полем. Говорят, что элементы  $f, g \in L$  скрученно сопряжены относительно эндоморфизма  $\varphi \in \text{End } L$ , если существует такой элемент  $x \in L$ , что

$$\varphi(x) + f = x + g. \quad (1)$$

В более общем виде элементы  $f, g \in L$  скрученно сопряжены относительно эндоморфизмов  $\varphi, \psi \in \text{End } L$ , если существует такой элемент  $x \in L$ , что

$$\varphi(x) + f = \psi(x) + g. \quad (2)$$

Легко видеть, что скрученная сопряженность является отношением эквивалентности. Если выполняются условия (1) или (2), то будем обозначать это следующим образом  $f \sim_{\varphi} g$  или  $f \sim_{\varphi, \psi} g$  соответственно.

Через  $R(\varphi, \psi)$  обозначим число классов  $\varphi, \psi$ -эквивалентности, называемое числом Райдемайстера.

В данной статье исследуется проблема скрученной сопряженности и ее классы эквивалентности в конечно порожденных нильпотентных алгебрах Ли над полем  $F$ , допускающим эффективные вычисления. Последнее подразумевает алгоритмическую разрешимость систем линейных уравнений над  $F$ , в частности, вычисление базиса подпространства, порожденного данной системой элементов.

Введенное понятие является аналогом хорошо известного отношения в теории групп. Имеется целый ряд работ, в которых изучаются алгоритмические аспекты и структура классов сопряженных элементов (см., например: [1–5]).

### 2. Основные результаты

Прежде всего рассмотрим случай конечномерного линейного пространства  $N$  над полем  $F$ , которое можно считать свободной нильпотентной алгеброй Ли степени 1 (алгеброй с нулевым умножением).

**Теорема 1.** Пусть  $N$  – линейное пространство конечной размерности  $k$  над полем  $F$ , допускающим эффективные вычисления. Тогда в случае бесконечного поля  $F$  число классов эквивалентности  $R(\varphi, \psi)$  для произвольной пары эндоморфизмов  $\varphi, \psi \in \text{End } N$  равно 1 либо  $\infty$ . В случае если  $|F| = p^r$ ,  $p$  – простое число, число  $R(\varphi, \psi)$  равно  $p^{k(r-s)}$ , где  $s$  – размерность образа  $\text{Im}(\varphi - \psi)$  разности эндоморфизмов  $\varphi - \psi$ . В данном случае классы  $\varphi, \psi$ -эквивалентности совпадают со смежными классами пространства  $N$  по образу  $\text{Im}(\varphi - \psi)$ .

**Доказательство.** Запишем выражение (2) в виде

$$\varphi(x) = \psi(x) + h, \quad (3)$$

где  $h = g - f \in N$ .

Можно считать, что пространство  $N = F^k$  задано стандартным базисом. Эндоморфизмам  $\varphi, \psi \in \text{End } N$  соответствуют матрицы  $A_\varphi, A_\psi \in M_k(F)$ . Тогда уравнение (3) равносильно уравнению

$$(A_\varphi - A_\psi)x = h. \quad (4)$$

Уравнение (4) разрешимо относительно  $x$  тогда и только тогда, когда определитель  $|A_\varphi - A_\psi| \neq 0$ . В этом случае  $h \sim_{\varphi, \psi} 0$  для любого элемента  $h \in N$ . Это означает, что  $f \sim_{\varphi, \psi} g$  для любой пары элементов  $f, g \in N$  и пространство  $N$  содержит только один класс эквивалентности относительно введенного отношения.

Из (2) следует, что  $f \sim_{\varphi, \psi} g$  в том и только том случае, если  $g - f$  содержится в образе разности эндоморфизмов  $\varphi - \psi$ . Как обычно,  $\dim \text{Im}(\varphi - \psi) = \text{range}(A_\varphi - A_\psi)$ .

Пусть  $|A_\varphi - A_\psi| = 0$ . Тогда в случае бесконечного поля  $F$  число классов эквивалентности  $R(\varphi, \psi) = \infty$ . Если  $|F| = p^r$  и  $\text{range}(A_\varphi - A_\psi) = s$ , тогда  $|N| = p^{rk}$ ,  $|\text{Im}(\varphi - \psi)| = p^{rs}$  и  $R(\varphi, \psi) = p^{r(k-s)}$ .

Определим подпространство  $L(\varphi, \psi) = \{h \in N \mid \exists x \in N: \varphi(x) = \psi(x) + h\} = \text{Im}(\varphi - \psi)$ .

Если  $f \sim_{\varphi, \psi} g$  для некоторой пары  $f, g \in N$ , то  $g - f \in L(\varphi, \psi)$ . Это значит, что смежные классы  $f + L(\varphi, \psi)$  и  $g + L(\varphi, \psi)$  совпадают. Верно также обратное. Таким образом,  
 $[f] = \{g \mid f \sim_{\varphi, \psi} g\} = \{f + h \mid h \sim_{\varphi, \psi} 0\} = f + L(\varphi, \psi)$ .

Что и требовалось доказать.

Перейдем к рассмотрению произвольного случая. Хорошо известно, что любая конечно порожденная нильпотентная алгебра Ли  $N$  конечномерна. Она порождается как линейное пространство множеством базисных коммутаторов веса, не превышающего ступени нильпотентности. Возможность эффективных вычислений позволяет зафиксировать базис алгебры  $N$ . Значит, любому эндоморфизму  $\varphi \in \text{End } N$  отвечает матрица  $A_\varphi \in M_k(F)$  действия этого эндоморфизма на базисных элементах, где  $k = \dim N$ .

**Теорема 2.** Пусть  $N$  – произвольная конечно порожденная нильпотентная алгебра Ли над полем  $F$ , допускающим эффективные вычисления. Тогда в случае бесконечного поля  $F$  число классов эквивалентности  $R(\varphi, \psi)$  для произвольной пары эндоморфизмов  $\varphi, \psi \in \text{End } N$  равно 1 либо  $\infty$ . В случае если  $|F| = p^r$ ,  $p$  – простое число, число  $R(\varphi, \psi)$  равно  $p^{k(r-s)}$ , где  $k$  – размерность алгебры  $N$ ,  $s$  – размерность образа  $\text{Im}(\varphi - \psi)$  разности эндоморфизмов  $\varphi - \psi$ .

**Доказательство.** Любому элементу  $x \in N$  можно поставить в соответствие набор коэффициентов  $\alpha_x \in F^k$  в его разложении по базису. Тогда (3) примет вид

$$(A_\varphi - A_\psi)\alpha_x = \alpha_h. \quad (5)$$

Аналогично доказательству теоремы 1 в случае бесконечного поля  $F$  число классов  $R(\varphi, \psi) = \infty$  при  $|A_\varphi - A_\psi| = 0$  и  $R(\varphi, \psi) = 1$  иначе. В случае  $|F| = p^r$  прямые вычисления показывают, что число классов  $R(\varphi, \psi) = p^{k(r-s)}$  при  $|A_\varphi - A_\psi| = 0$ .



Можно заметить, что для конечно порожденной нильпотентной алгебры Ли  $N$  над полем, допускающим эффективные вычисления, эффективная процедура, определяющая скрученную сопряженность элементов  $f, g \in N$  относительно произвольной пары эндоморфизмов  $\varphi, \psi \in \text{End } N$  равносильна решению уравнения (5).

*Работа выполнена под руководством профессора В.А. Романькова.*

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Fel'shtyn A., Gonçalves D., Wong P. Twisted conjugacy classes for polyfree groups/ arXiv:0802.2937v2 [math.GR], 2008.
- [2] Gonçalves D., Wong P. Twisted conjugacy classes in exponential growth groups // Bull. London Math. Soc. 35 (2003). № 2. 261–268.
- [3] Romankov V., Ventura E. Twisted conjugacy in nilpotent groups.
- [4] Taback J., Wong P. The geometry of twisted conjugacy classes in wreath products. arXiv:0805.1371v2 [math.GR], 2008
- [5] Вентура Э., Романьков В.А. Проблема скрученной сопряженности в метабелевых группах // Алгебра и логика. 48. № 2.

УДК 519

**Н.В. Перцев, Г.Е. Царегородцева**

Омский филиал Института математики им. С.А. Соболева СО РАН

**А.Н. Пичугина**

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

## АНАЛИЗ УСТОЙЧИВОСТИ ПОЛОЖЕНИЙ РАВНОВЕСИЯ ОДНОЙ МОДЕЛИ ПОПУЛЯЦИОННОЙ ДИНАМИКИ\*

В статье дается анализ устойчивости положений равновесия модели популяционной динамики.

*Ключевые слова:* динамика популяций, нестационарная среда, математическая модель, воздействие вредных веществ.

### 1. Уравнения модели

Будем рассматривать популяцию индивидуумов, динамика которой определяется следующими факторами: 1) индивидуумы дают потомство, при этом репродуктивный потенциал может снижаться за счет воздействия вредных веществ; 2) индивидуумы погибают за счет самолимитирования и конкуренции, а также вследствие потребления вредных веществ, поступающих в составе ресурсов питания. Обозначим через  $x_1(t)$  численность популяции в момент времени  $t \geq 0$ . Предположим, что изменение количества индивидуумов за бесконечно малый промежуток времени  $(t, t + dt), t > 0, dt > 0$  определяется балансовыми соотношениями между процессами рождения и гибели индивидуумов, интенсивность которых зависит от  $x_1(t)$  и  $x_2(t)$ , где  $x_2 = x_2(t)$  – количество вредных веществ в момент времени  $t \geq 0$ . Считаем, что индивидуумы нулевого возраста производятся за счет существующих индивидуумов независимо от их возраста и не поступают из внешнего источника. Примем, что количество индивидуумов нулевого возраста, появившихся за интервал времени  $(t, t + dt)$ , равно  $b(x_2(t))x_1(t)dt$ , где  $b(x_2) = \beta g(\theta(x_2))$ ,  $\beta = const > 0$  описывает максимальную скорость репродукции одного индивидуума без учета влияния вредных веществ. Функция  $g(u)$  учитывает снижение репродуктивного потенциала индивидуумов за счет неблагоприятного воздействия вредных веществ. Функция  $\theta(x_2)$  отражает скорость потребления вредных веществ в составе пищевых ресурсов. Примем, что количество индивидуумов, погибающих за счет самолимитирования и конкуренции за время  $(t, t + dt)$ ,  $dt \rightarrow +0$ , независимо от их воз-

\*Работа поддержана РФФИ, проект № 09-01-00098-а.

раста равно  $\gamma x_1^2(t)dt$ ,  $\gamma = const > 0$  – интенсивность взаимодействия индивидуумов. Потребление вредных веществ в составе ресурсов питания приводит к гибели индивидуумов за время  $(t, t + dt)$ ,  $dt \rightarrow +0$  в количестве  $\sigma\theta(x_2(t))x_1(t)dt$ , где  $\sigma = const > 0$  – коэффициент, отражающий степень токсичности вредного вещества.

Используя сделанные предположения, запишем, что

$$\dot{x}_1(t) = b(x_2(t))x_1(t) - \gamma x_1^2(t) - \sigma\theta(x_2(t))x_1(t).$$

Примем, как и в работе [1], что количество вредных веществ в окружающей среде изменяется по правилу

$$\dot{x}_2(t) = p - \theta(x_2(t))x_1(t) - \delta x_2(t),$$

где  $p = const \geq 0$  описывает скорость поступления вредных веществ,  $\delta = const > 0$  – интенсивность распада вредных веществ.

Объединяя все полученные соотношения и добавляя начальные данные, получаем, что уравнения модели имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= \beta g(\theta(x_2))x_1 - \gamma x_1^2 - \sigma\theta(x_2)x_1, \\ \dot{x}_2 &= p - \theta(x_2)x_1 - \delta x_2, \end{aligned} \quad (1)$$

$$x_i(0) = x_i^0 \geq 0, i = 1, 2. \quad (2)$$

Полагаем, что функция  $g = g(u)$  при  $u \geq 0$  – непрерывная, невозрастающая,  $g(0) = 1$ ,  $g(u) \rightarrow 0$ ,  $u \rightarrow +\infty$ , имеет непрерывную производную  $g'(u)$ . Обозначим эти условия  $(g^*)$ . Функция  $\theta(x_2)$  – непрерывная, неубывающая,  $\theta(0) = 0$ , имеющая конечный предел  $\bar{\theta}$  при  $x_2 \rightarrow +\infty$  и непрерывную производную  $\theta'(x_2)$ . Условия на функцию  $\theta$  будем обозначать  $(\theta^*)$ .

## 2. Исследование свойств решений модели

Рассмотрим систему (1), (2). Предположим, что выполнены условия  $(g^*)$ ,  $(\theta^*)$ . Система (1), (2) является автономной. Опираясь на теорему существования и единственности для нормальной системы уравнений [2], получаем, что (1), (2) имеет единственное решение на некотором промежутке  $0 \leq t \leq t_0$ ,  $0 < t_0 < \infty$ . Ис-

пользуя схему доказательства из [1], можно показать, что решение (1), (2) существует, единственно и неотрицательно на промежутке  $0 \leq t < \infty$ . Для анализа поведения решений системы (1), (2) исследуем устойчивость положений равновесия  $x^* = (x_1^*, x_2^*)$  с неотрицательными компонентами, опираясь на матрицу системы линейного приближения в точке  $x^*$

$$A = \begin{pmatrix} \beta g(\theta) - 2\gamma x_1^* - \sigma\theta & x_1^* \theta'(\beta g'(\theta) - \sigma) \\ -\theta & -\theta' x_1^* - \delta \end{pmatrix}$$

и ее собственные числа,  $\det(A - \lambda E) = 0$ .

СЛУЧАЙ 1.

Положение равновесия:

$$x_1^* = 0, \quad x_2^* = \frac{p}{\delta}. \quad (3)$$

Здесь явно получаем, что

$$\lambda_1 = -\delta < 0, \quad \lambda_2 = \beta g(\theta(\frac{p}{\delta})) - \sigma\theta(\frac{p}{\delta}).$$

Положение равновесия (3) асимптотически устойчиво, если  $\beta g(\theta(\frac{p}{\delta})) < \sigma\theta(\frac{p}{\delta})$ .

При выполнении неравенства  $\beta g(\theta(\frac{p}{\delta})) > \sigma\theta(\frac{p}{\delta})$  оно неустойчиво. В случае  $\lambda_2 = 0$  требуются дополнительные исследования.

СЛУЧАЙ 2.

Точка положения равновесия:

$$x_1^* > 0, \quad x_2^* > 0. \quad (4)$$

Для нахождения положений равновесия (4) решаем систему уравнений:

$$\begin{aligned} (\beta g(\theta(x_2)) - \gamma x_1 - \sigma\theta(x_2))x_1 &= 0, \\ p - \theta(x_2)x_1 - \delta x_2 &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Выражаем  $x_1 > 0$  из системы (5), приходим к уравнению  $F(x_2) = Q(x_2)$ , где

$$\begin{aligned} F(x_2) &= p - \delta x_2, \\ Q(x_2) &= \gamma^{-1} \theta(x_2) (\beta g(\theta(x_2)) - \sigma\theta(x_2)), \\ x_2 &> 0. \end{aligned}$$

Покажем далее, что характер пересечения графиков функций  $F(x_2)$ ,  $Q(x_2)$  определяет асимптотическую устойчивость (неустойчивость) соответствующих точек пересечений, которые задают положения равновесия вида (4).

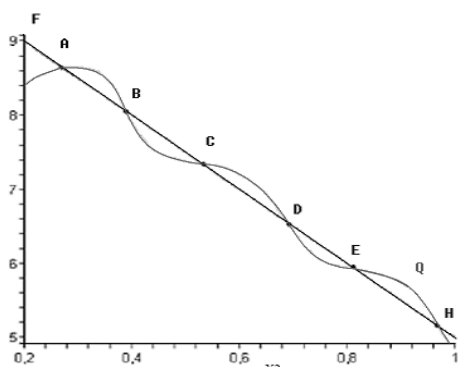


Рис. 1. Типичный вид функций  $F(x_2)$  и  $Q(x_2)$

На рисунке 1 показан пример графиков функций  $F(x_2)$ ,  $Q(x_2)$ , которые пересекаются в нескольких точках. Это означает, что  $x^*$  вида (4) может существовать, причем не одно. Пусть положение равновесия вида (4) существует. Исследуем его на устойчивость. Составляем матрицу  $A$  в точке (4). Для нахождения ее собственных чисел решаем уравнение  $\lambda^2 + a\lambda + b = 0$ , где  $a = \gamma x_1^* + \theta'(x_2^*)x_1^* + \delta$ ,

$$b = x_1^* (\gamma (\theta'(x_2^*)x_1^* + \delta) + \theta(x_2^*)\theta'(x_2^*)(\beta g'(\theta(x_2^*))) - \sigma).$$

Для определения знаков  $\text{Re } \lambda_i$  применим критерий Рауса-Гурвица для уравнений второго порядка. Получаем, что  $\text{Re } \lambda_{1,2} < 0 \Leftrightarrow a > 0, b > 0$ . В рассматриваемом случае  $a > 0$ . Для исследования знака  $b$  используем расположение графиков функций  $F(x_2)$  и  $Q(x_2)$  и геометрический смысл производной, поскольку видно, что  $b = \gamma x_1^* (Q'(x_2^*) - F'(x_2^*))$ . Как следствие, замечаем, что среди точек пересечения графиков функций  $F(x_2)$  и  $Q(x_2)$ , приведенных на рисунке 1, положения равновесия, соответствующие точкам А, С, Е, будут асимптотически устойчивы, положения равновесия В, D, H – неустойчивы.

Покажем, что в положительной части фазовой плоскости для системы (1), (2) выполняются условия критерия Дюлака отсутствия предельных циклов [3]. Обозначим

$$K(x_1, x_2) = \beta g(\theta(x_2))x_1 - \gamma x_1^2 - \sigma \theta(x_2)x_1, \\ L(x_1, x_2) = p - \theta(x_2)x_1 - \delta x_2.$$

В качестве множителя  $B(x_1, x_2)$ , фигурирующего в условии критерия, возьмем  $B(x_1, x_2) = x_1^{-1}$ . Тогда

$$\frac{\partial}{\partial x_1}(B(x_1, x_2)K(x_1, x_2)) + \\ + \frac{\partial}{\partial x_2}(B(x_1, x_2)L(x_1, x_2)) = N(x_1, x_2),$$

где

$$N(x_1, x_2) = -\gamma - \sigma \theta(x_2) - \theta'(x_2) - \delta x_1^{-1} < 0,$$

при  $x_1 > 0, x_2 > 0$ . Следовательно, в положительной части фазовой плоскости не существует замкнутых контуров, составленных из траекторий системы (1), (2) (нет предельных циклов).

### 3. Вычислительный эксперимент

Целью вычислительного эксперимента являлось выявление наиболее характерных режимов поведения решений системы (1), (2). Для проведения расчетов использована программа Maple, библиотека DEtools и функция DEplot. В процессе вычисления варьировались параметры, отвечающие за наличие и устойчивость положений равновесия.

#### ПРИМЕР 1.

Подбираем функции и параметры таким образом, чтобы система (1), (2) имела ровно одно ненулевое положение равновесия:

$$\theta(x_2) = (2 \exp(x_2 / 20) - 2)(1 + \exp(x_2 / 20))^{-1}, \\ g(u) = 0.5(\exp^{-1}(u) + (u + 1)^{-1}), \\ \beta = 2, \gamma = 0.002, \sigma = 0.1, p = 16, \delta = 2.$$

При выбранном наборе параметров система (1), (2) имеет ненулевое положение равновесия  $(x_1^* = 984, x_2^* = 0.3125)$ , которое является асимптотически устойчивым, кроме того, существует положение равновесия  $(x_1^* = 0, x_2^* = 8)$ , которое является неустойчивым. Результаты численного решения модели при различных начальных данных

- n1:  $(x_1(0) = 400, x_2(0) = 6)$ ,  
 n2:  $(x_1(0) = 90, x_2(0) = 0.3)$ ,  
 n3:  $(x_1(0) = 25, x_2(0) = 9)$   
 представлены на рисунке 2.

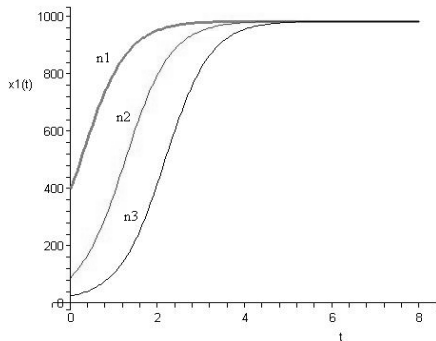


Рис. 2. Динамика численности популяции в зависимости от начальных данных

ПРИМЕР 2.

Рассмотрим случай, в котором существует устойчивое положение равновесия (3). Подберем функции и параметры таким образом, чтобы система (1), (2) имела три положения равновесия:

$$\theta(x_2) = (3 \exp(x_2 / 20) - 3)(1 + \exp(x_2 / 20))^{-1},$$

$$g(u) = 0.5(\exp^{-1}(u) + (u + 1)^{-1}),$$

$$\beta = 2, \gamma = 0.002, \sigma = 8, p = 20, \delta = 4.$$

Положения равновесия  $(x_1^* = 894, x_2^* = 0.281, (x_1^* = 0, x_2^* = 5))$  – асимптотически устойчивы.

$(x_1^* = 49.076, x_2^* = 2.606)$  – неустойчиво. Исследуем поведение решений при различных начальных данных:  
 n1:  $(x_1(0) = 49.076, x_2(0) = 2.606)$ ,  
 n2:  $(x_1(0) = 49.076, x_2(0) = 2.607)$ .

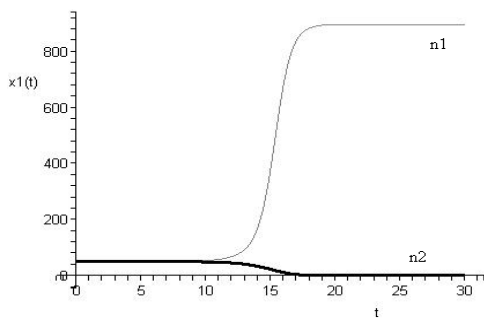


Рис. 3. Динамика численности в случае двух устойчивых положений равновесия

Из рисунка 3 видно, что небольшое отличие в начальных данных приводит к совершенно разным результатам. В случае n1 наблюдается выход популяции на ненулевой стационарный уровень, тогда как в n2 – вырождение популяции.

ПРИМЕР 3.

Приведем набор функций и параметров модели, для которых система (1), (2) имеет пять положений равновесия. Пусть  $\theta(x_2) = \min(2(\sin(x_2) + x_2), 20)$

$$g(u) = 0.5(\exp^{-1}(u/20) + (u + 1)^{-1}),$$

$$\beta = 2, \gamma = 0.02, \sigma = 0.1, p = 110, \delta = 11.$$

На рисунке 4 изображено расположение графиков функций  $F(x_2), Q(x_2)$ , которые пересекаются в четырех точках. Как отмечено выше, точки пересечения этих графиков и начальные данные определяют поведение решений модели при  $t \rightarrow +\infty$ .

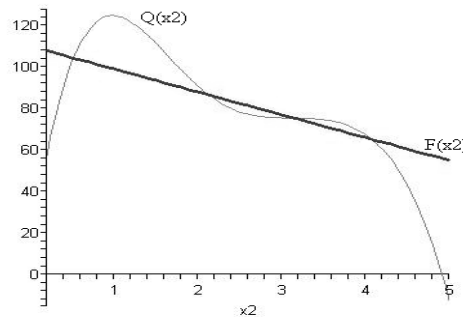


Рис. 4. Графики функций  $F(x_2)$  и  $Q(x_2)$

4. Заключение

Результаты исследования указывают на достаточно сложную динамику популяции, развивающуюся в условиях воздействия вредного вещества. Эффект воздействия этого вещества проявляется в существовании нескольких устойчивых стационарных режимов динамики популяции, одним из которых может являться режим, связанный с вырождением популяции. Предложенная модель позволяет получить условия, при которых возможно снижение численности популяции до наименьшего положительного уровня или ее полное вырождение.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Пичугина А.Н. Интегриродифференциальная модель популяции, подверженной воздействию вредных веществ // Сибирский журнал индустриальной математики. Т. 7. № 4 (20). 2004. С. 130–140.  
 [2] Понтрягин Л.С. Обыкновенные дифференциальные уравнения. М.: Наука, 1974.  
 [3] Баутин Н.Н., Леонтович Е.А. Методы и приемы качественного исследования динамики систем на плоскости. М.: Наука, 1976.

УДК 519.711

**К.К. Логинов**

Омский филиал Института математики им. С.А. Соболева СО РАН

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ ПОПУЛЯЦИИ, РАЗВИВАЮЩЕЙСЯ В НЕСТАЦИОНАРНОЙ СРЕДЕ

В работе рассмотрена математическая модель динамики популяции, развивающейся в нестационарной среде. Описаны уравнения модели и исследованы математическое ожидание и дисперсия численности популяции. Представлены результаты вычислительного эксперимента.

*Ключевые слова:* динамика популяции, ветвящийся случайный процесс, нестационарная среда, метод Монте-Карло.

### 1. Постановка задачи

Будем рассматривать динамику численности некоторой популяции, развивающейся в нестационарных условиях среды обитания. Предполагаем, что процессы рождения и гибели особей зависят от воздействия ряда факторов, которые влияют на численность и выживаемость потомства, а также на продолжительность жизни особей. Такими факторами могут являться температурный режим, наличие ресурсов питания и т. д.

Процесс рождения особей будем задавать следующим образом. Принимаем, что в моменты времени  $t_k = k + \delta_k, k = \overline{1, \infty}$  каждая оплодотворенная особь производит потомство, численность которого зависит от величины  $\delta_k$ . Считаем, что при выполнении неравенства  $\delta_k \leq 0$  имеются благоприятные условия для рождения и дальнейшего развития потомства. В этом случае от каждой оплодотворенной особи появляется  $m_1$  особей, где  $m_1 = \text{const}, 0 < m_1 < \infty$ . Если  $\delta_k > 0$ , то условия для рождения и развития потомства являются неблагоприятными и величина потомства от одной оплодотворенной особи составляет  $m_2$  особей. Полагаем, что  $m_2$  является константой либо случайной величиной с заданным законом распределения, причем  $0 \leq m_2 \leq m_1$  с вероятностью 1. Величины  $\delta_k$  образуют ограниченную числовую последовательность,  $|\delta_k| \leq q < 1, k = \overline{0, \infty}, \delta_0 = 0$ .

Целью статьи является построение уравнений модели и исследование характерных режимов динамики популяции с помощью аналитических и численных методов.

## 2. Уравнения модели

Пусть  $\lambda > 0$  – интенсивность гибели особей.

Полагаем, что за малый промежуток времени  $h > 0$  вероятность гибели одной особи равна  $\lambda \cdot h + o(h)$ ,  $h \rightarrow +0$  (независимо от остальных существующих особей и предшествующих событий). Пусть  $0 < \alpha < 1$  – вероятность оплодотворения одной особи в течение промежутка  $(t_{k-1}, t_k)$ . Обозначим через  $y(t_k)$  численность особей в момент времени  $t_k$ . Величина  $y(t_k)$  зависит от тех оплодотворенных или неоплодотворенных особей, которые дожили до момента  $t_k$  и дали соответствующее потомство. Уравнения модели имеют вид:

$$\begin{cases} y(t_k) = \sum_{i=1}^{y(t_{k-1})} \eta_i(t_k), & k = \overline{1, \infty}, \\ y(t_0) = y_0 > 0, \end{cases} \quad (1)$$

где случайные величины  $\eta_i(t_k)$ ,  $k = \overline{1, \infty}$  являются независимыми между собой, одинаково распределенными и не зависящими от случайной величины  $y(t_k)$ ,  $k = \overline{0, \infty}$ ,  $y_0$  – заданная константа. Закон распределения этих величин имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} P(\eta_1(t_k) = 0) &= 1 - e^{-\lambda \Delta t_k}, \\ P(\eta_1(t_k) = 1) &= (1 - \alpha) \cdot e^{-\lambda \Delta t_k}, \\ P(\eta_1(t_k) = \mu_k + 1) &= \alpha \cdot e^{-\lambda \Delta t_k}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\Delta t_k = t_k - t_{k-1} = 1 + \delta_k - \delta_{k-1}$ ,  
 $\mu_k = m_1 \cdot I\{\delta_k \leq 0\} + m_2 \cdot I\{\delta_k > 0\}$ ,  
 $I\{\delta_k > 0\} = 1 - I\{\delta_k \leq 0\}$ ,

$I\{\delta_k \leq 0\} = \begin{cases} 1 & \text{при } \delta_k \leq 0, \\ 0 & \text{при } \delta_k > 0 \end{cases}$  – индикаторная

функция,  $k = \overline{1, \infty}$ . Заметим, что  $\{y(t_k)\}_{k=0, \infty}$  является случайным марковским процессом с множеством состояний  $E_n = \{0, 1, 2, \dots\}$  и поглощающим состоянием  $E_0 = \{0\}$ .

Для исследования свойств процесса  $\{y(t_k)\}_{k=0, \infty}$  могут быть использованы результаты теории ветвящихся случайных процессов, описывающих размножение и

превращение частиц в случайной и переменной среде [1]. В настоящей работе основное внимание уделяется поведению числовых характеристик  $y(t_k)$  (математическое ожидание и дисперсия), а также особенностям динамики выборочных реализаций  $y(t_k)$ , получаемых с помощью метода Монте-Карло [2].

## 3. Уравнения для математического ожидания и дисперсии численности особей

Для изучения поведения случайного процесса  $\{y(t_k)\}_{k=0, \infty}$  исследуем динамику математического ожидания  $E(y(t_k))$ . Зафиксируем  $t_{k-1}, t_k$  и вычислим математическое ожидание случайной величины  $y(t_k)$ . Используя свойства величин  $\eta_i(t_k)$  [3], находим, что

$$E(y(t_k)) = E(\eta_1(t_k)) \cdot E(y(t_{k-1})).$$

Пусть  $H_k = E(\eta_1(t_k))$ . Из (2) следует, что  $H_k = e^{-\lambda \cdot \Delta t_k} \cdot (1 + \mu_k \cdot \alpha)$ ,  $k = \overline{1, \infty}$ .

Обозначая

$$r_k = 1 + \mu_k \cdot \alpha = \begin{cases} 1 + m_1 \cdot \alpha, & \delta_k \leq 0, \\ 1 + m_2 \cdot \alpha, & \delta_k > 0, \end{cases} \quad k = \overline{1, \infty},$$

получаем, что  $H_k = e^{-\lambda \cdot \Delta t_k} \cdot r_k$ ,

$$E(y(t_k)) = \left( \prod_{j=1}^k H_j \right) \cdot y_0 = \left( \prod_{j=1}^k r_j \right) \cdot \left( \prod_{j=1}^k e^{-\lambda \cdot \Delta t_j} \right) \cdot y_0,$$

где

$$\prod_{j=1}^k e^{-\lambda \cdot \Delta t_j} = e^{-\lambda \cdot \sum_{j=1}^k (1 + \delta_j - \delta_{j-1})} = e^{-\lambda(k + \delta_k - \delta_0)} = e^{-\lambda t_k},$$

следовательно,

$$E(y(t_k)) = e^{-\lambda t_k} \cdot \left( \prod_{j=1}^k r_j \right) \cdot y_0, \quad k = \overline{1, \infty}. \quad (3)$$

Рассмотрим характерные особенности динамики  $y(t_k)$  в зависимости от асимптотического поведения  $E(y(t_k))$  при  $k \rightarrow \infty$ .

1. Если  $e^{-\lambda t_k} \cdot \left( \prod_{j=1}^k r_j \right) \rightarrow 0$  при  $k \rightarrow \infty$ , то популяция вырождается с вероятностью 1, т. е.  $P(y(t_k) = 0) \rightarrow 1$  при  $k \rightarrow \infty$ , что следует из неравенства Чебышева. В частности, популяция вырождается с вероятностью 1 при выполнении неравенства  $b_1 < 1$ , где  $b_1 = e^{-\lambda} \cdot (1 + m_1 \cdot \alpha)$ . Действительно:

$$E(y(t_k)) = e^{-\lambda \cdot k} \cdot e^{-\lambda \cdot \delta_k} \cdot \left( \prod_{j=1}^k r_j \right) \cdot y_0 \leq e^{\lambda \cdot q} \cdot \left( \prod_{j=1}^k e^{-\lambda} \cdot r_j \right) \cdot y_0 \leq e^{\lambda \cdot q} \cdot b_1^k \cdot y_0$$

и  $b_1^k \rightarrow 0, k \rightarrow \infty$ .

2. Если  $0 < \lim_{k \rightarrow \infty} e^{-\lambda \cdot t_k} \cdot \left( \prod_{j=1}^k r_j \right) < \infty$  или для всех  $t_k$  верно  $0 \leq E(y(t_k)) \leq const$ , то математическое ожидание численности популяции ограничено. Учитывая существование нулевого поглощающего состояния и положительную вероятность попадания в него из любого другого состояния, можно утверждать, что в этом случае популяция вырождается с вероятностью 1.

3) Если  $e^{-\lambda \cdot t_k} \cdot \left( \prod_{j=1}^k r_j \right) \rightarrow \infty$  при  $k \rightarrow \infty$ , то можно утверждать, что численность популяции неограниченно возрастает, если только она не вырождается в какой-либо момент времени  $t_k$ . В частности, этот случай возникает при  $b_2 > 1$ , где  $b_2 = e^{-\lambda} \cdot (1 + m_2 \cdot \alpha)$ , поскольку

$$E(y(t_k)) = e^{-\lambda \cdot t_k} \cdot \left( \prod_{j=1}^k r_j \right) \cdot y_0 \geq e^{-\lambda \cdot q} \cdot b_2^k \cdot y_0$$

и  $b_2^k \rightarrow \infty, k \rightarrow \infty$ .

Зафиксируем  $t_{k-1}$ ,  $t_k$  и вычислим дисперсию  $D(y(t_k))$  случайной величины  $y(t_k)$ . Опираясь на формулы для дисперсии случайной суммы случайных величин  $\eta_i(t_k)$  [3], находим, что

$$D(y(t_k)) = D(\eta_1(t_k)) \cdot E(y(t_{k-1})) + (E(\eta_1(t_k)))^2 \cdot D(y(t_{k-1})), \quad k = \overline{1, \infty}.$$

Пусть  $B_k^2 = E(\eta_1^2(t_k))$ ,

$$B_k^2 = e^{-\lambda \cdot (1 + \delta_k - \delta_{k-1})} \cdot (1 + \mu_k \cdot (\mu_k + 2) \cdot \alpha),$$

$$\sigma_k^2 = D(\eta_1(t_k)) = B_k^2 - H_k^2. \quad \text{Обозначим}$$

$M_k = \sigma_k^2 \cdot E(y(t_{k-1}))$ . Тогда имеем следующее разностное уравнение:

$$\overline{D(y(t_k))} = M_k + H_k^2 \cdot \overline{D(y(t_{k-1}))}, \quad (4)$$

$k = \overline{1, \infty}$ . Уравнение (4) дополняется начальным условием  $D(y(t_0)) = 0$ . Нахождение решения  $D(y(t_k))$  является довольно трудной задачей, поскольку (4)

представляет собой линейное разностное неоднородное уравнение с переменными коэффициентами. Поэтому значения  $D(y(t_k))$  определялись численно, исходя из рекуррентных соотношений (4).

#### 4. Вычислительный эксперимент

Для проведения вычислений была разработана моделирующая программа, опирающаяся на уравнения (1) и стандартные алгоритмы моделирования случайных величин [2]. Ниже представлены результаты вычислений для последовательности  $\{\delta_k\}_{k=0, \infty}$ , заданной следующей формулой:

$$\delta_0 = 0, \delta_k = c \cdot \cos(d \cdot k / 2\pi), \quad k > 0,$$

причем  $0 < c < 1$ ,  $d > 1$ .

Зафиксируем следующие параметры:  $y_0 = 300$ ,  $\lambda = 0.8$ ,  $\alpha = 0.4$ ,  $c = 0.2$ ,  $d = 5.5$ . Рассмотрим характерные режимы динамики популяции при различных параметрах  $m_1$ ,  $m_2$ . На рисунках 1, 2 цифрой 1 обозначена типичная реализация случайного процесса  $\{y(t_k)\}_{k=0, \infty}$ , цифрой 2 – математическое ожидание численности популяции  $\{E(y(t_k))\}_{k=0, \infty}$ , цифрой 3 – стандартное отклонение численности популяции  $\{\sqrt{D(y(t_k))}\}_{k=0, \infty}$ .

Пусть  $m_2 = 1$ ,  $m_1 = 3$ . При этих параметрах величина  $b_1 \approx 0.99$  и популяция вырождается с вероятностью 1.

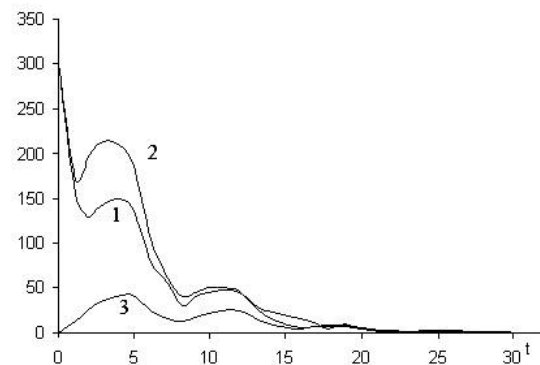
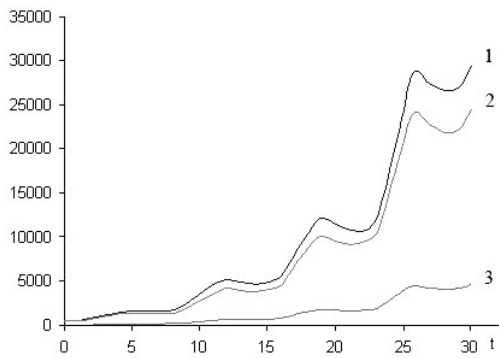


Рис. 1. Вырождение популяции при  $b_1 < 1$

Пусть  $m_2 = 4$ ,  $m_1 = 6$ . При этих параметрах величина  $b_2 \approx 1.04$  и численность популяции неограниченно возрастает, ес-



ли только она не вырождается в какой-либо момент времени  $t_k$ .



**Рис. 2.** Неограниченный рост численности популяции при  $b_2 > 1$

В завершение отметим, что дальнейшее развитие этой модели предполагает учет конкуренции особей, что существенно усложняет описание динамики численности популяции. Вместе с тем, кон-

куренция особей оказывает решающее влияние на ограничение роста численности популяции. Результаты работы [4] позволяют предположить, что, несмотря на довольно сложную динамику на конечных промежутках времени, популяция будет вырождаться с вероятностью 1.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Ватутин В.А., Дьяконова Е.Е. Ветвящиеся процессы в случайной среде и бутылочные горлышки в эволюции популяций // Теория вероятностей и ее применения. 2006. Т. 51. № 1. С. 22–47.  
 [2] Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Курс статистического моделирования. М.: Наука, 1976.  
 [3] Боровков А.А. Теория вероятностей. М.: Наука, 1976.  
 [4] Нагаев С.В., Недорезов Л.В., Вахтель В.И. Вероятностная непрерывно-дискретная модель динамики численности изолированной популяции // Сибирский журнал индустриальной математики. 1999. Т. II. Вып. 2(4). С. 147–152.

УДК 519.862

**И.В. Чирков, М.А. Шевелин**

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

**АЛГЕБРАИЧЕСКИЕ АВТОМОРФИЗМЫ СВОБОДНЫХ АЛГЕБР ЛИ**

Изучаются алгебраические автоморфизмы свободных алгебр Ли

*Ключевые слова:* алгебра Ли, алгебраический автоморфизм, группа автоморфизмов.**1. Введение**

Пусть  $k$  – поле нулевой характеристики,  $L_n$  – свободная алгебра Ли над полем  $k$  с множеством свободных порождающих  $x_1, \dots, x_n$ ,  $n \geq 2$ . Обозначим через  $Aut(L_n)$  группу автоморфизмов алгебры  $L_n$ . Все элементы этой группы являются линейными преобразованиями. Поэтому определено понятие алгебраического автоморфизма. Именно элемент  $\varphi \in Aut(L_n)$  называется алгебраическим, если для некоторого многочлена  $f \in k[t]$  справедливо равенство  $f(\varphi) = 0$ . В частности, периодические элементы группы  $Aut(L_n)$  являются алгебраическими.

Цель этой работы – доказательство обратного утверждения (см. теорему 1). Достаточно доказать, что каждый алгебраический автоморфизм имеет конечный порядок при дополнительном предположении, что поле  $k$  алгебраически замкнуто. Действительно, условия не меняются при расширении поля, а заключение не меняется при переходе к подполю. Поэтому дальше везде считаем, что  $k$  – алгебраически замкнутое поле характеристики нуль.

Мы используем обозначение  $[x, y; 1] = [x, y]$ ,  $[x, y; m] = [[x, y; m-1], y]$  ( $m > 1$ ) для длинного коммутатора в алгебре Ли. Символы  $L'$  и  $L''$  обозначают коммутант  $[L, L]$  и второй коммутант  $(L')$  алгебры Ли  $L$ . Единичную матрицу обозначаем 1.

Напомним, что автоморфизм алгебры полностью определен своим действием на порождающие.

**2. Предварительные леммы**

Пусть  $A$  – алгебраическое линейное преобразование не обязательно конечномерного пространства  $V$ . Поскольку каждый модуль над алгеброй многочленов от одной неизвестной является прямой суммой циклических модулей, то пространство  $V$  раскладывается в прямую сумму конечномерных  $A$ -инвариантных подпространств. Отсюда

следует, что каждое алгебраическое преобразование над алгебраически замкнутым полем можно привести к жордановой форме с ограниченными в совокупности размерами жордановых клеток.

Сделаем еще одно замечание. Пусть  $a, b$  – два линейно независимых элемента алгебры  $L_n$ . Тогда подалгебра, порожденная этими элементами в  $L_n$ , порождается этими элементами свободно, так как в противном случае она была бы одномерна.

**Лемма 1.** Пусть  $\wp \in \text{Aut}(L_n)$  – алгебраический автоморфизм. Тогда для некоторого натурального числа  $l$  собственные значения  $\wp$  есть все корни степени  $l$  из единицы.

**Доказательство.** Для заданного собственного значения  $\lambda$  пусть  $v \in L_n$  – собственный вектор преобразования  $\wp$  с собственным значением  $\lambda$ . Пусть  $\mu$  – какое-нибудь собственное значение преобразования  $\wp$ , для которого собственный вектор  $w \in L_n$ , отвечающий собственному значению  $\mu$ , линейно независим с  $v$ . Согласно первому замечанию, сделанному перед леммой, такой вектор обязательно найдется. Тогда  $[v, w]\wp = [v\wp, w\wp] = \lambda\mu[v, w]$ ,  $[v, w; m]\wp = \lambda\mu^m[v, w; m]$  для всех натуральных  $m$  и все векторы  $[v, w; m]$  ненулевые. Так как  $\wp$  – алгебраический автоморфизм, то  $\lambda \neq 0$ ,  $\mu \neq 0$  и среди элементов  $\mu^m \in k$  ( $m \geq 1$ ) только конечное число различных. Пусть  $\mu^s = 1$ . Тогда элемент  $w_1 = [v, w; s]$  – собственный для  $\wp$  с собственным значением  $\lambda$  и линейно независимый с  $v$ . Следовательно, (ненулевой) вектор  $[v, w_1; r]$   $r$  натуральных будет собственным для  $\wp$ , отвечающим собственному значению  $\lambda^{r+1}$ .

Таким образом, для любых двух различных собственных значений  $\lambda, \mu$  преобразования  $\wp$  элементы  $\lambda^m, \lambda^{-1}, \lambda\mu$  – тоже собственные значения для  $\wp$ . То

есть собственные значения образуют конечную подгруппу в мультипликативной группе поля  $k$ .

**Лемма 2.** Автоморфизм  $\psi \in \text{Aut}(L_2)$ , переводящий  $x_1$  в  $x_1 + x_2$ , а  $x_2$  в  $x_2$  не является алгебраическим.

**Доказательство.** Рассмотрим фактор-алгебру  $M_2 = L_2/L_2''$  – свободную метабелеву алгебру Ли над полем  $k$  с множеством свободных порождающих  $y_1 = x_1 + L_2'', y_2 = x_2 + L_2''$ .

Определим автоморфизм  $\psi_M : M_2 \rightarrow M_2$  правилом  $y_1\psi_M = y_1 + y_2, y_2\psi_M = y_2$ . Это эквивалентно следующему:  $(a + L_2'')\psi_M = a\psi + L_2''$  ( $a \in L_2$ ).

Предположим, вопреки тому, что требуется доказать, что  $\psi$  – алгебраический автоморфизм. Пусть  $f \in k[t]$  – такой многочлен, что  $f(\psi) = 0$ . Тогда для всех  $a \in L_2''$  выполнено равенство  $(a + L_2'')f(\psi_M) = af(\psi) + L_2'' \equiv 0 \pmod{L_2''}$ . Это означает, что  $f(\psi_M) = 0$ . Докажем, что это невозможно. Точнее, мы установим, что для всех  $j \geq 1$  существуют такие  $\psi_M$  – инвариантные подпространства  $V_j$  в  $k$ -пространстве  $M_2$ , что минимальные многочлены преобразований  $\psi_M|_{V_j}$  имеют как угодно большие степени.

Напомним (см.: [1]), что коммутант  $M'_2$  алгебры  $M_2$  является модулем без кручения над универсальной обертывающей алгеброй  $U(M_2/M'_2)$ , которая изоморфна алгебре многочленов  $k[y_1 + M'_2, y_2 + M'_2]$ . Из этого следует линейная независимость одночленов  $[[y_1, y_2], y_1; s], y_2; t] \in M_2$  ( $s \geq 0, t \geq 0$ ).

Подпространство с базисом из одночленов вида  $y_{s,t} = [[y_1, y_2], y_1; s], y_2; t] \in M_2$  при  $s \geq 0, t \geq 0, s + t = j$  обозначим через  $V_j$ . Понятно, что  $\dim V_j = j + 1, V_j$  инвариантно относительно действия  $\psi_M$ .

Вычислим образы  $y_{s,t}\psi_M$ :

$$\begin{aligned} y_{s,t}\psi_M &= \llbracket y_1 + y_2, y_2 \rrbracket, y_1 + y_2; s \rrbracket y_2; t \rrbracket = \\ &= \sum_{p=0}^s \binom{s}{p} \llbracket y_1, y_2 \rrbracket, y_1; p \rrbracket, y_2; s-p+t \rrbracket = \\ &= \sum_{p=0}^s \binom{s}{p} y_{p,s-p+t}. \end{aligned}$$

При фиксированном  $j = s + t$  получаем

$$y_{s,j-s}\psi_M = \sum_{p=0}^s \binom{s}{p} y_{p,j-p}. \quad \text{Если обозначить}$$

$P_j$  матрицу преобразования  $\psi_M \downarrow_{V_j}$  относительно базиса  $y_{0,j}, y_{1,j-1}, \dots, y_{j,0}$ , то матрица  $B_j = P_j - 1$  является верхней нильтреугольной и ранг матрицы  $B_j$  равен  $j$ . Из этого следует, что минимальный многочлен для матрицы  $P_j$  – это в точности  $(t-1)^{j+1}$ .

Этим доказано, что преобразование  $\psi_M \downarrow_{V_j}$  имеет минимальный многочлен  $(t-1)^{j+1}$ . Отсюда следует лемма.

### 3. Основной результат

**Теорема 1.** Каждый алгебраический автоморфизм  $\wp$  алгебры  $L_n$  имеет конечный порядок.

**Доказательство.** Предположим, что это не так и приведем  $\wp$  к жордановой форме. Найдется жорданова клетка конечного размера, большего 1. Отсюда следует, что найдется двупорожденная (свободная по теореме Ширшова [2]) подалгебра  $A$  с такими свободными порождающими  $a_1, a_2$ , что  $a_1\wp = \lambda a_1 + a_2$ ,  $a_2\wp = \lambda a_2$  ( $\lambda \in k$ ). Лемма 1 дает  $\lambda^m = 1$  для некоторого целого числа  $m$ . Тогда  $a_1\wp^m = a_1 + m\lambda^{m-1}a_2$ ,  $a_2\wp^m = a_2$ . Положим  $x_1 = a_1$ ,  $x_2 = m\lambda^{m-1}a_2$ ,  $\psi = \wp^m$ . Мы попали в условия леммы 2, которая утверждает, что  $\psi$  не алгебраический автоморфизм. Тогда и  $\wp$  не алгебраический – противоречие.

**Замечание.** Несмотря на то, что для доказательства теоремы использован переход к свободной метабелевой алгебре Ли  $M_2$ , для самой алгебры  $M_2$  утверждение теоремы ложно. Можно проверить,

что автоморфизм  $\wp$  свободной метабелевой алгебры Ли ранга 2 над полем характеристики, не равной 2, определенный правилом

$$x_1 \rightarrow x_1 + \llbracket x_1, x_2 \rrbracket, x_1 \rrbracket, x_2 \rightarrow x_2 + \llbracket x_1, x_2 \rrbracket, x_2 \rrbracket,$$

удовлетворяет уравнению  $(1 - \wp)^2 = 0$ , не удовлетворяет линейному уравнению и поэтому не является периодическим.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Artamonov V.A. The categories of free metabelian groups and Lie algebras // Commentationes Mathematicae Universitates Carolinae. Vol. 18. 1. 1977. P. 143–159.
- [2] Ширшов А.И. Подалгебры свободных лиевых алгебр // Мат. сб. Т. 33(75). 2. 1953. С. 441–452.

**В.В. Прудников, П.В. Прудников, В.Ю. Колесников**

*Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского*

### **ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ СИЛЬНО НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ ТРЕХМЕРНОЙ ХУ-МОДЕЛИ С ЛИНЕЙНЫМИ ДЕФЕКТАМИ\***

Осуществлено компьютерное моделирование критического поведения сильно-неупорядоченной трехмерной ХУ-модели с линейными дефектами со спиновой концентрацией  $p=0,60$ .

*Ключевые слова:* метод Монте-Карло, фазовые переходы и критические явления, неупорядоченные системы, ХУ-модель, протяженные дефекты структуры.

Структурный беспорядок, обусловленный присутствием дефектов структуры играет важную роль в поведении реальных материалов. В случае систем, испытывающих фазовые превращения, дефекты структуры задают новые классы универсальности их критического поведения, модифицируя кинетические свойства данных систем. Данная статья посвящена численному исследованию влияния линейных протяженных дефектов структуры на неравновесное критическое поведение трехмерных спиновых систем, описываемых ХУ-моделью, в области высокой концентрации дефектов с  $c_{\text{imp}}=0.40$ , недоступной для аналитического ренормгруппового описания. На примере данных систем будут выявлены отличительные особенности в поведении слабо неупорядоченных [1; 2] и сильно неупорядоченных систем с эффектами дальнедействующей корреляции дефектов.

Для описания сложных протяженных дефектов вводятся различные модели структурного беспорядка. В данной статье применяется модель Вейнриба-Гальперина с так называемой дальнедействующей изотропной корреляцией дефектов [3], когда парная корреляционная функция  $g(\mathbf{x}-\mathbf{y})$ , характеризующая пространственное распределение замороженных дефектов структуры, спадает с расстоянием по степенному закону с  $g(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \sim |\mathbf{x}-\mathbf{y}|^{-a}$ , где  $a$  – параметр корреляции дефектов. Линейным протяженным дефектам, ориентированным изотропно в пространстве, в данной модели соответствует  $a=2$ . В работе [1] было осуществлено теоретико-полевое описание критического поведения непосредственно трехмерных систем с дальнедействующей корреляцией дефектов, которое показало, что данный тип дефектов, в отличие от некоррелированных дефектов, существенно изменяет критическое поведение не только изингоподобных систем с однокомпонент-

\*Работа поддержана грантом 2.1.1/930 программы «Развитие научного потенциала высшей школы».

ным параметром порядка, но и систем, характеризуемых многокомпонентным параметром порядка. Предсказываемые в [1] значения критических индексов нашли подтверждение в результатах численных исследований для слабо неупорядоченных систем [2]. Однако область влияния эффектов сильного структурного беспорядка осталась неисследованной.

В данной статье исследуются сильно неупорядоченные спиновые системы, описываемые ХУ-моделью, с гамильтонианом

$$H = -J \sum_{i,j} p_i p_j \bar{S}_i \bar{S}_j, \quad (1)$$

где  $\bar{S}_i = (S_i^x, S_i^y)$  – это плоский единичный вектор в узле  $i$ ,  $J > 0$  характеризует обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее ферромагнитный характер,  $p_i$  – случайные переменные, характеризующие замороженный структурный беспорядок в системе ( $p_i = 1$ , когда узел  $i$  занят спином, и  $p_i = 0$ , когда узел пуст). Общая спиновая концентрация в системе была выбрана равной  $p = 0.60$ . Полагается, что дальнедействующие эффекты корреляции между точечными дефектами реализуются в виде случайно ориентированных линий с корреляционными характеристиками, спадающими по степенному закону с показателем  $\alpha = 2$ . Для этого был использован следующий способ создания примесных конфигураций: из заполненной спинами трехмерной решетки случайным образом удалялись линии, параллельные осям координат, до достижения заданной концентрации примесей. Для обеспечения изотропности распределения дефектов в кристалле число удаляемых линий в каждом из трех направлений поддерживалось одинаковым.

Для описания особенностей критического поведения данных систем с протяженными дефектами было применено компьютерное моделирование методами Монте-Карло. Параметром порядка для трехмерной ХУ-модели является средний модуль намагниченности системы:

$$m = \frac{1}{N_s} \left[ \left\langle \sqrt{M_x^2 + M_y^2} \right\rangle \right], \quad (2)$$

$$\sum_i M_x = \sum_i S_i^x, M_y = \sum_i S_i^y,$$

где  $N_s = pL^3$  – количество спинов в решетке, угловые скобки характеризуют статистическое усреднение, а квадратные скобки – усреднение по различным реализациям распределения дефектов в решетке.

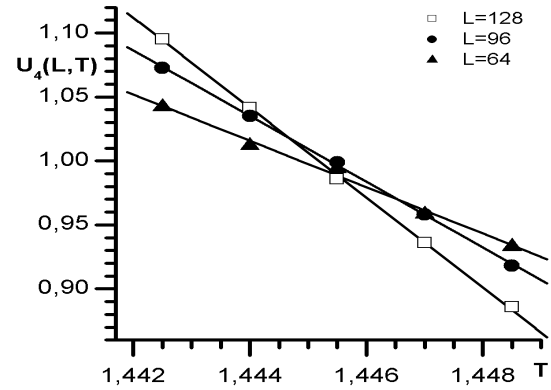


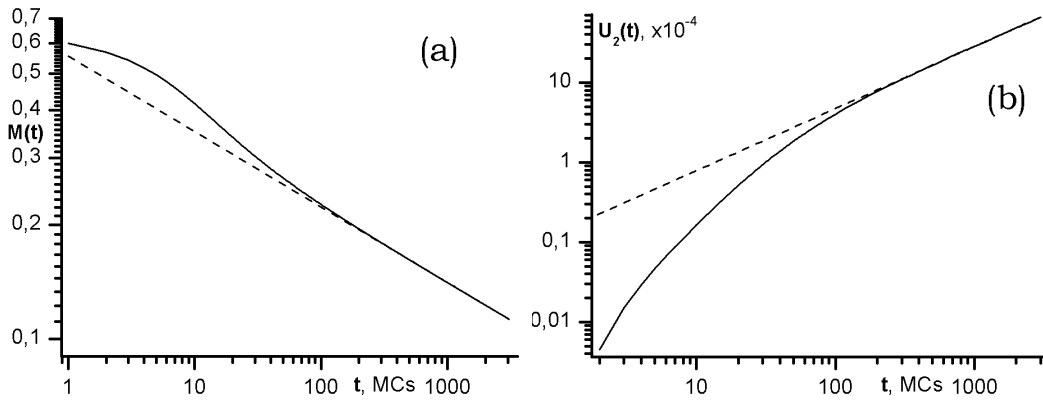
Рис. 1. Температурные зависимости кумулянта Биндера  $U_4(T, L)$  для решеток с различными размерами  $L$

На первом этапе исследований было осуществлено определение критической температуры системы методом кумулянтов Биндера 4-го порядка. Данный кумулянт задается следующим выражением

$$U_4(L, T) = \frac{1}{2} \left( 3 - \frac{[\langle M^4 \rangle]}{[\langle M^2 \rangle]^2} \right). \quad (3)$$

$U_4(L, T)$  имеет важную для описания поведения конечных систем скейлинговую форму  $U_4(L, T) = u(L^{1/\nu}(T - T_c))$ , которая позволяет определить критическую температуру  $T_c(L = \infty)$  для бесконечной системы через координату точки пересечения кривых, задающих температурную зависимость  $U_4(L, T)$  для различных  $L$ . Для уменьшения эффектов критического замедления использовался кластерный алгоритм моделирования Вольфа. В результате анализа температурного поведения кумулянтов для кубических решеток с размерами  $L$  от 64 до 128 (рис. 1) была определена критическая температура  $T_c = 1.4455(10)$ .

При данном значении критической температуры было проведено моделирование кубических решеток с линейными размерами  $L = 128$  методом коротковременной динамики (МКД). Особенностью метода является то, что информация об универсальном критическом поведении может быть получена на относительно малых макроскопических промежутках времени (от 1000 до 3000 шагов Монте-Карло



**Рис. 2.** Временные зависимости намагниченности  $m(t)$  (а) и кумулянта Биндера  $U_2(t)$  (б) для образцов с размером решетки  $L=128$  при  $T_c=1.4455$

на спин (MCS)) на ранней стадии развития системы в критической точке или ее окрестности. В последние годы МКД был применен к исследованию критического поведения широкого ряда систем (см. обзор [4]), при этом получаемые результаты находятся в хорошем соответствии с результатами применения традиционных методов Монте-Карло. МКД позволяет получать значения как динамических, так и статических критических индексов.

МКД был обоснован результатами аналитических и численных исследований, проведенных в работах [5; 6]. Так, в работе [5] на основе ренормгруппового анализа было показано, что после микроскопически малого времени  $t_{mic}$  для  $k$ -го момента намагниченности системы реализуется скейлинговая форма

$$M^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-k\beta/\nu} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{-1}L, b^{x_0}m_0), \quad (4)$$

где  $t$  – время,  $\tau=(T-T_c)/T_c$  – приведенная температура,  $b$  – произвольный масштабный фактор,  $L$  – линейный размер решетки,  $\beta, \nu, z$  – известные критические индексы,  $x_0$  – новый независимый критический индекс, задающий масштабную размерность начального значения намагниченности  $m_0$ . Для неупорядоченных систем вычисление  $M^{(k)}(t)$  осуществляется в виде

$$M^{(k)}(t) = \left\langle \left\langle \left( \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} p_i S_i \right)^k \right\rangle \right\rangle. \quad (5)$$

Начальное состояние системы выбирается обычно либо с  $m_0 \ll 1$ , либо с  $m_0=1$ . Исследования показывают, что динамический процесс, начинающийся с полностью упорядоченного состояния ( $m_0=1$ ), более предпочтителен из-за меньшего влияния флуктуаций на результаты. Более того, в этом случае не возникает зависимости от нового критического индекса  $x_0$ . В данной статье мы исследовали оба случая как с  $m_0=1$ , т. е. полностью упорядоченным начальным состоянием, так и с  $m_0 \ll 1$  – неупорядоченным начальным состоянием.

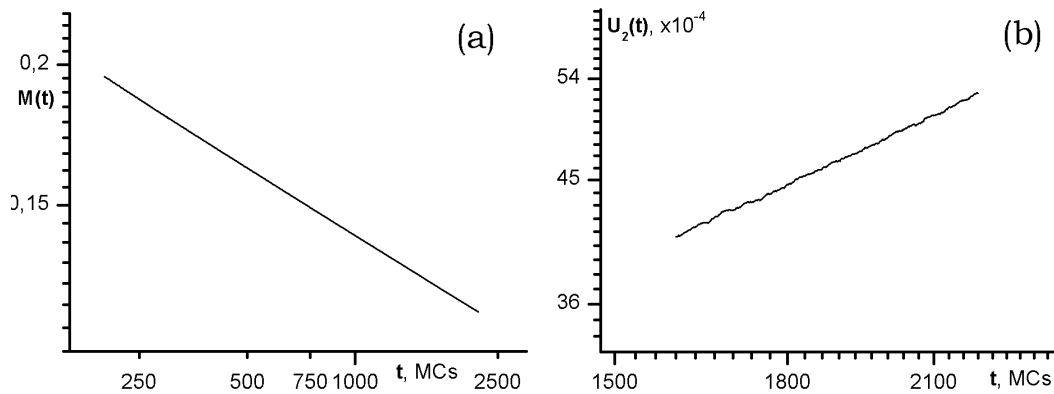
### 1. Случай с $m_0=1$

На ранней стадии релаксации системы корреляционная длина еще достаточно мала, и конечность размера моделируемой системы оказывается несущественной. Поэтому для решеток с достаточно большими размерами  $L$  динамическая скейлинговая зависимость (4) для намагниченности ( $k=1$ ) приобретает при  $b = t^{1/z}$  следующий вид в критической области;

$$M(t, \tau) = t^{-\beta/\nu z} F(1, t^{1/\nu z} \tau) \approx t^{-\beta/\nu z} \left( 1 + at^{1/\nu z} \tau + O(\tau^2) \right). \quad (6)$$

При критической температуре  $\tau=0$  релаксация намагниченности характеризуется степенной зависимостью от времени  $t$ :

$$M(t) \sim t^{-\beta/\nu z}. \quad (7)$$



**Рис. 3.** Линейная аппроксимация временной зависимости намагниченности  $m(t)$  (а) и кумулянта Биндера  $U_2(t)$  (б)

Если  $\tau \neq 0$ , то степенная зависимость  $M(t)$  модифицируется скейлинговой функцией  $F(1, t^{1/\nu z} \tau)$ . Для независимого определения динамического критического индекса  $z$  используется кумулянт второго порядка

$$U_2(t, L) = \frac{M^{(2)}(t)}{M^2(t)} - 1 \quad (8)$$

со скейлинговой зависимостью

$$U_2(t, L) \sim t^{d/z}, \quad (9)$$

где  $d$  – размерность системы. На рисунке 2 (а, б) приведены полученные кривые для намагниченности  $M(t)$  и кумулянта  $U_2(t)$  для образцов с размером решетки  $L=128$  при  $T_c=1.4455$ , представленные в двойном логарифмическом масштабе для всего временного интервала измерения до 3000 MCS. На рисунке 3 (а, б) представлены временные зависимости тех же величин, но в интервалах  $[300, 3000]$  для  $M(t)$  и  $[1600, 2200]$  для  $U_2(t)$ , где они демонстрируют степенную зависимость от времени, определяемую влиянием дефектов структуры на критическое поведение.

В данной статье мы также осуществили учет поправок к асимптотической зависимости измеряемых величин за счет влияния конечности моделируемых систем, так как только учет данных поправок к скейлингу позволяет получать корректные значения критических индексов в термодинамическом пределе  $L \rightarrow \infty$ . Для этого мы применили следующие выражения для временной зависимости наблюдаемых величин:

$$M(t) \sim t^{-\beta/\nu z} (1 + At^{-\omega/z}), \quad (10)$$

$$U(t) \sim t^{d/z} (1 + Bt^{-\omega/z}), \quad (11)$$

где  $A, B$  – неуниверсальные амплитуды,  $\omega$  является критическим индексом поправки к скейлингу.

Для расчета значений критических индексов  $\beta/\nu z$ ,  $d/z$  и  $\omega/z$  на временном интервале, соответствующем влиянию структурного беспорядка, был применен метод наименьших квадратов для осуществления наилучшей аппроксимации значений  $M(t)$  и  $U(t)$  выражениями (11)–(12). Процедура заключалась в следующем: 1) временной интервал проявления влияния дефектов структуры разбивался на всевозможные участки  $\Delta t$ , начиная от участков с  $\Delta t = 50$  до участков с  $\Delta t = 550$ ; 2) на каждом из участков  $\Delta t$  осуществлялось определение значений показателей  $\beta/\nu z$  и  $d/z$  при фиксированном значении  $\omega/z$ ; 3) найденные значения показателей усреднялись по выбранным участкам с определением их среднего значения и погрешности аппроксимации; 4) индекс  $\omega/z$  определялся из условия минимальности значений относительных погрешностей проведенных аппроксимаций.

Наряду с аппроксимационной погрешностью для показателей  $\beta/\nu z$  и  $d/z$  определялась их статистическая погрешность. Для этого общее количество используемых для усреднения 8000 примесных конфигураций делилось на 4 группы. Для каждой из групп вычислялись показатели  $\beta/\nu z$  и  $d/z$ , затем вычислялись отклонения от показателей, найденных при использовании усредненных по общему количеству примесных конфигураций значений.



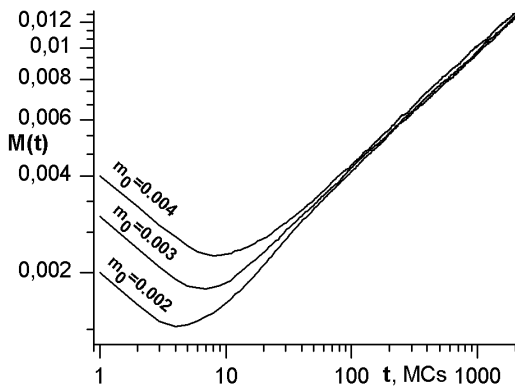


Рис. 4. Временная зависимость намагниченности  $m(t)$  для различных значений начальной намагниченности  $m_0=0.002, 0.003, 0.004$

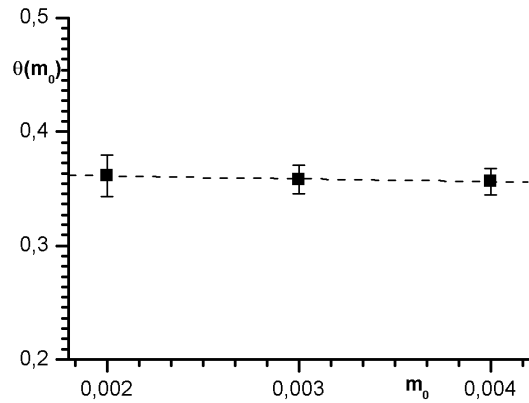


Рис. 5. Линейная аппроксимация критических показателей  $\theta(m_0)$  при  $m_0 \rightarrow 0$

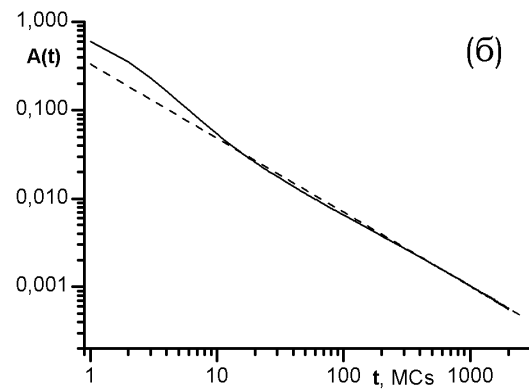
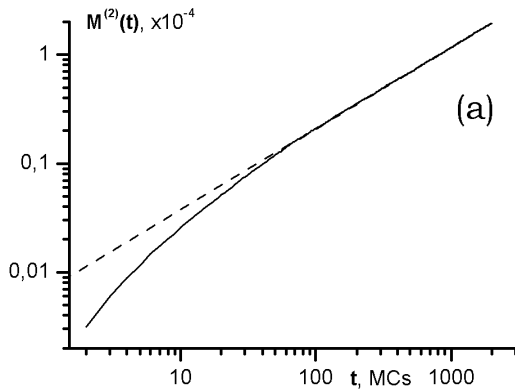


Рис. 6. Временные зависимости второго момента намагниченности  $M^{(2)}(t)$  (а) и автокорреляционной функции  $A(t)$  (б)

Итоговые значения рассчитанных критических индексов с учетом статистических погрешностей и погрешностей аппроксимаций равны:

$$z=2.514(16), \beta/\nu=0.540(23), \omega=1.25(18).$$

### 2. Случай с $m_0 \ll 1$

Полагая в (4)  $b = t^{1/z}$ , для первого момента намагниченности ( $k = 1$ ) и малой величины  $m_0 t^{1/z}$  получаем следующее выражение:

$$M(t, \tau, m_0) \sim m_0 t^\theta (1 + at^{1/z\nu} \tau) + O(\tau^2, m_0^2), \quad (12)$$

где  $\theta = (x_0 - \beta/\nu)/z$ . Для  $\tau \rightarrow 0$  и достаточно малых  $t$  получаем асимптотическое поведение  $M(t) \sim t^\theta$ , характеризуемое увели-

чением намагниченности во временном интервале  $t_0 \sim m_0^{z/x_0}$ .

Для независимого вычисления динамических критических индексов  $\theta$  и  $z$ , а также отношения статических критических индексов  $\beta/\nu$  в данной работе на каждом этапе эволюции системы наряду с намагниченностью системы определялась автокорреляционная функция

$$A(t) = \left\langle \left\langle \left( \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} p_i S_i(t) S_i(0) \right) \right\rangle \right\rangle \quad (13)$$

и второй момент намагниченности  $M^{(2)}(t)$ . Их скейлинговый анализ показал [4], что при  $m_0=0$  и критической температуре  $\tau=0$  данные величины характеризуются степенной зависимостью от времени

$$A(t) \sim t^{-c_a}, M^{(2)}(t) \sim t^{-c_2}, \quad (14)$$

где  $c_a = d/z - \theta$ ,  $c_2 = (d - 2\beta/v)/z$ ,  $d$  – размерность системы.

Для определения динамического индекса  $\theta$  было исследовано временное поведение намагниченности для образцов с размером решетки  $L=128$  при  $T_c=1.4455$  с начальными малыми значениями  $m_0=0.002$ ;  $0.003$  и  $0.004$  на временах до 3000 MCS. На рисунке 4 представлены в двойном логарифмическом масштабе усредненные временные зависимости для намагниченностей данных систем. Они позволяют определить показатели  $\theta(m_0)$  и их асимптотическое значение  $\theta(m_0 \rightarrow 0)$  на основе линейной аппроксимации значений  $\theta(m_0)$  при  $m_0 \rightarrow 0$  (рис. 5). На рисунке 6 для данных систем, стартующих из неравновесного начального состояния с близким к нулю значением  $m_0=10^{-6}$ , представлены временные зависимости для второго момента намагниченности (рис. 6 а) и автокорреляционной функции (рис. 6 б), также изображенные в двойном логарифмическом масштабе. Анализ данных зависимостей позволяет определять значения показателей  $c_a$  и  $c_2$  в соответствии с (14). В таблице приведены вычисленные значения показателей  $\theta(m_0)$ ,  $\theta(m_0 \rightarrow 0)$ ,  $c_a$ ,  $c_2$  и погрешности их определения.

**Значения показателей временных зависимостей намагниченности, автокорреляционной функции и второго момента намагниченности**

Показатель	Значения показателей	Погрешности
( $m_0=0.002$ )	0.36175	0.01812
$\theta$ ( $m_0=0.003$ )	0.35835	0.01262
$\theta$ ( $m_0=0.004$ )	0.35644	0.01166
$\theta$ ( $m_0 \rightarrow 0$ )	0.36635	0.02430
$c_a$	-0.8377	0.00937
$c_2$	0.74435	0.03046

На основе значений данных показателей были определены и значения критических индексов:

$$\theta=0.366(24), z=2.488(20), \beta/v=0.574(39).$$

Сопоставление полученных значений критических индексов  $z$  и  $\beta/v$  при разных начальных неравновесных условиях (с  $m_0=1$  и  $m_0 \ll 1$ ) показывает их достаточно хо-

рошее согласие в пределах погрешностей определения. Сравним эти значения критических индексов со значениями, вычисленными в работе [1] в рамках теоретико-полевого подхода:

$$z=2.365, v = 0.76, \beta = 0.37, \beta/v=0.487$$

и значениями, полученными в работе [2] при компьютерном моделировании слабо неупорядоченной XY-модели с линейными дефектами со спиновой концентрацией  $p=0.80$  для случая с  $m_0 \ll 1$ :

$$\theta = 0.374(14), z = 2.342(57), \beta/v = 0.534(35)$$

и для случая с  $m_0=1$ :

$$z = 2.364(7), v = 0.778(26), \beta = 0.370(30), \\ \beta/v = 0.476(54), \omega = 1.05(4).$$

Сопоставление показывает, что значения критических индексов  $\theta$  и  $\beta/v$  хорошо согласуются в пределах статистических погрешностей моделирования и аппроксимаций и не проявляют явной зависимости от концентрации дефектов, в то время как динамический критический индекс  $z$  для сильно неупорядоченных систем принимает большие значения, чем для слабо неупорядоченных, и разница их значений превышает погрешности их определения.

**ЛИТЕРАТУРА**

- [1] Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Fedorenko A.A. Field-theory approach to critical behavior of systems with long-range correlated defects // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. P. 8777.
- [2] Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Zheng B. et al. Short-time critical dynamics of the three-dimensional systems with long-range correlated disorder // Progress of Theoretical Physics. 2007. V. 117. № 6. P. 973–991.
- [3] Weinrib A, Halperin B.I. Critical phenomena in systems with long-range-correlated quenched disorder // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. P. 413–427.
- [4] Zheng B. Monte Carlo simulations of short-time critical dynamics // Int. J. Mod. Phys. B 1998. V. 12. P. 1419–1484.
- [5] Janssen H.K., Schaub B., Schmittmann B. New universal short-time scaling behaviour of critical relaxation process // Z. Phys. B. 1989. V. 73. P. 539–549.
- [6] Huse D. Monte Carlo simulations of short-time critical relaxation of Ising model // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. P. 304.

**В.В. Прудников, М.В. Мамонова, Н.С. Морозов**

*Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского*

### **ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ АДсорбЦИИ ИОНОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ НА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЯХ С ОБРАЗОВАНИЕМ СУБМОНОСЛОЙНЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЕНОК\***

Впервые, в рамках метода функционала спиновой плотности осуществлено описание влияния ферромагнитного упорядочения на адсорбцию ионов переходных металлов Fe, Co, Ni на парамагнитной медной подложке при образовании субмонослойной пленки.

*Ключевые слова:* поверхностные свойства, ферромагнетизм тонких пленок, неактивированная адсорбция.

Свойства ультратонких магнитных пленок являются объектом интенсивных исследований, что во многом определяется возможностями применения ферромагнитных пленок в микроэлектронике и вычислительной технике в качестве магнитных носителей для записи и хранения информации в запоминающих устройствах [1–3]. Магнитные пленки обладают рядом уникальных особенностей, способствующих повышению плотности записи информации и быстрейшему записыванию информации. Наряду с этим, изучение физических свойств ферромагнитных пленок носит фундаментальный характер, обуславливая развитие как физики магнитных явлений, так и физики поверхностных явлений. К настоящему времени изучению магнитного упорядочения в ультратонких пленках Fe, Co, Ni посвящено множество экспериментальных работ [4], в которых установлено, что в пленках устанавливается дальний ферромагнитный порядок. Однако природа и закономерности этого явления в ультратонких пленках остаются не вполне ясными. Данная статья посвящена теоретическому исследованию адсорбции магнитных ионов переходных металлов Fe, Co, Ni на металлических поверхностях парамагнитных материалов и выявлению условий образования ферромагнитных субмонослойных пленок.

Рассмотрим полубесконечный металл со средней плотностью заряда  $n_1$ , ограниченный бесконечной плоской поверхностью и занимающий область  $z < -D$ . Пленка адсорбата с плотностью заряда  $n_2$  и толщиной  $h$  занимает область  $D < z < D + h$ . Между пленкой и подложкой в данной модели задается вакуумный зазор шириной  $2D$ . Положительный заряд фона, таким образом, оказывается распределенным в соответствии с соотношением:

$$n_0(z) = n_1\theta(-z - D) + n_2\theta(z - D)\theta(D + h - z), \quad (1)$$

где  $\theta(z)$  – ступенчатая функция.

\*Работа поддержана грантом 2.1.1/930 программы «Развитие научного потенциала высшей школы».

Решение линеаризованного уравнения Томаса-Ферми использованием граничных условий, отражающих непрерывность потенциала  $\varphi(z)$  и его первой производной  $d\varphi/dz$  при  $z = \pm D$  и  $z = D + h$ , а также условий конечности потенциала

$$\begin{cases} n(z) = n_1 \left[ 1 - 0.5 e^{\beta(z+D)} \right] + 0.5 n_2 e^{\beta(z-D)} (1 - e^{-\beta h}), & z < -D \\ n(z) = 0.5 n_1 e^{-\beta(z+D)} \frac{\beta^2}{4\pi} + 0.5 n_2 e^{\beta(z-D)} (1 - e^{-\beta h}), & |z| < D \\ n(z) = n_2 \left[ 1 - 0.5 e^{\beta(z-D-h)} \right] - 0.5 (n_2 - n_1 e^{-2\beta h}) e^{-\beta(z-D)}, & D < z < D + h \\ n(z) = 0.5 e^{-\beta(z-D-h)} \left[ n_1 e^{-\beta(2D+h)} - n_2 e^{-\beta h} + n_2 \right], & z > D + h \end{cases} \quad (2)$$

Здесь  $\beta$  – вариационный параметр. Величина  $1/\beta$  представляет собой характерную толщину поверхностного слоя, на котором резко меняется электронная плотность. Определим межфазную энергию взаимодействия, приходящуюся на единицу площади контакта, как интеграл по  $z$  от объемной плотности свободной энергии электронного газа:

$$\sigma_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \{f[n(z, \beta)] - f[n_0(z)]\} dz. \quad (3)$$

В рамках модели «желе» объемная плотность свободной энергии неоднородного электронного газа может быть представлена в виде градиентного разложения [5]:

$$\begin{aligned} f[n(z)] = & w_0[n(z)] + w_2[n(z), |\nabla n(z)|^2] + \\ & + w_4[n(z), |\nabla n(z)|^4] - T(s_{id} + s_{order}). \end{aligned} \quad (4)$$

$$w_0[n(z)] = w_{kin} + w_{kul} + w_x + w_c \quad (5)$$

есть плотность энергии однородного электронного газа в атомных единицах, включающая последовательно кинетическую, электростатическую, обменную и корреляционную энергии,  $s_{id}$ ,  $s_{order}$  – энтропийные вклады в свободную энергию, учитывающие, соответственно, температурные изменения в энтропии для идеального электронного газа и эффекты магнитного упорядочения в электронной подсистеме.

В магнитоупорядоченном состоянии в металлах происходит перераспределение электронов по одночастичным состояниям за счет влияния возникающего внутреннего магнитного поля обменной природы [6]. При этом электронная плотность квазичастиц со спином «вверх»  $n_+$  оказывается отличной от электронной плотно-

сти квазичастиц со спином «вниз»  $n_-$ . Распределение квазичастиц каждой из подсистем по электронным состояниям может быть охарактеризовано своим уровнем Ферми с энергией  $\varepsilon_{F+/-}(n_{+/-})$ . Тогда кинетическая энергия электронной системы будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} w_{kin}(z) = & 0.3(6\pi^2)^{2/3} \{n_+^{5/3}(z) + n_-^{5/3}(z)\} + \\ & + k_B \left( \frac{\pi^2}{4} \right) k_B T \left\{ \frac{n_+(z)}{\varepsilon_{F+}} + \frac{n_-(z)}{\varepsilon_{F-}} \right\}, \end{aligned} \quad (6)$$

кулоновская энергия:

$$w_{kul} = 0.5\varphi(z)n(z), \quad (7)$$

обменная энергия:

$$w_x = -0.75(6/\pi)^{1/3} \{n_+^{4/3}(z) + n_-^{4/3}(z)\}, \quad (8)$$

корреляционная энергия:

$$\begin{aligned} w_c = & -0.056 \frac{n_-^{1/3}(z)n_+(z)}{0.079 + n_-^{1/3}(z)} - \\ & -0.056 \frac{n_+^{1/3}(z)n_-(z)}{0.079 + n_+^{1/3}(z)}. \end{aligned} \quad (9)$$

Плотности  $n_+$ ,  $n_-$  могут быть выражены через относительную намагниченность  $m$  системы следующим образом:

$$n_{+/-}(z) = n(z) \frac{1 \pm m}{2}. \quad (10)$$

Относительная намагниченность  $m$  в приближении молекулярного поля может быть найдена из решения известного уравнения [6]:

$$m = B_S (3mST_c / (S+1)T), \quad (11)$$

определяемого функцией Бриллюэна

$$B_S(x) = \frac{2S+1}{2S} \operatorname{cth} \left\{ \frac{2S+1}{2S} x \right\} - \frac{1}{2S} \operatorname{cth} \left\{ \frac{x}{2S} \right\}, \quad (12)$$

где  $S$  – спиновый момент магнитных ионов,  $T_c$  – температура Кюри. Соотношение (11) позволяет достаточно хорошо описывать наблюдаемую температурную зависимость относительной намагниченности ферромагнетиков (в частности, переходных металлов  $Fe$ ,  $Co$ ,  $Ni$  при спинах  $S_{Fe} \cong 1.11$ ,  $S_{Co} \cong 0.86$ ,  $S_{Ni} \cong 0.30$ , соответствующих эффективным дробным магнитным моментам ионов в данных металлах [6]) за исключением критической флуктуационной области и области низких температур, в которой для описания  $m(T)$  применимо спин-волновое приближение.

Энтропийные вклады в свободную энергию задаются выражениями

$$s_{id} = k_B \left( \frac{\pi^2}{2} \right) k_B T \left\{ \frac{n_+(z)}{\varepsilon_{F+}} + \frac{n_-(z)}{\varepsilon_{F-}} \right\},$$

$$s_{order} = k_B \frac{n(z)}{2} [\ln 4 - (1+m) \ln(1+m) - (1-m) \ln(1-m)]. \quad (13)$$

Градиентные поправки к плотности кинетической и обменно-корреляционной энергий неоднородного электронного газа определяются соотношениями [5]:

$$w_2 = \sum_{n=n_-,n_+} \frac{1}{72} \frac{|\nabla n|^2}{n} + w_{2,xc} [n, |\nabla n|^2]$$

$$w_{2,xc} [n_{+/-}] = \frac{A(n_{+/-}) B^2(n_{+/-}) |\nabla n_{+/-}|^2}{3^{4/3} \pi^{5/3} n_{+/-}^{4/3}},$$

$$w_4(z) = w_{4,kin}(z) + w_{4,xc}(z),$$

$$w_{4,kin} = \sum_{n=n_-,n_+} \frac{1.336}{540(3\pi^2 n)^{3/2}} \left[ \left( \frac{\nabla^2 n}{n} \right)^2 - \frac{9}{8} \left( \frac{\nabla^2 n}{n} \right) \frac{|\nabla n|^2}{n} + \frac{1}{3} \frac{|\nabla n|^4}{n} \right], \quad (14)$$

$$w_{4,xc} = \sum_{n=n_-,n_+} 2 \cdot 10^{-5} \exp(-0.2986n^{-0.26}) \left( \frac{\nabla^2 n}{n} \right)^2,$$

где

$$A(n_{+/-}) = 0.4666 + 0.3735 k_{F+/-}^{-2/3} (n_{+/-}),$$

$$B(n_{+/-}) = -0.0085 + 0.3318 k_{F+/-}^{1/5} (n_{+/-}),$$

$$k_{F+/-} (n_{+/-}) = (3\pi^2 n_{+/-})^{1/3},$$

$k_F$  – фермиевский волновой вектор.

Учет дискретности в распределении ионов приводит к поправкам в электростатической энергии взаимодействия как за

счет ион-ионного, так и электрон-ионного взаимодействий [5]. В результате межфазную энергию взаимодействия можно записать в виде:

$$\sigma = \sigma_0 + \sigma_{ei} + \sigma_{ii}, \quad (15)$$

где  $\sigma_0$  – вклад от электронной системы в рамках модели «желе»,  $\sigma_{ii}$  – поправка к энергии электростатического взаимодействия ионов,  $\sigma_{ei}$  – поправка к энергии, связанная с разностью в электростатическом взаимодействии электронов с дискретными ионами и однородным фоном «желе». В соответствии с [5] выражение для  $\sigma_{ii}$  имеет вид:

$$\sigma_{ii} = \sqrt{3} \frac{Z_1^2}{c_1^3} \exp\left(-\frac{4\pi d_1}{\sqrt{3}c_1}\right) + 2\sqrt{3} \frac{Z_2^2}{c_2^3} \exp\left(-\frac{4\pi h}{\sqrt{3}c_2}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{4\pi h}{\sqrt{3}c_2}\right)\right) - 2\sqrt{3} \frac{Z_1 Z_2}{(c_1 c_2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}} \left(\frac{d_1 + D}{c_1} + \frac{h + D}{c_2}\right)\right) \times \left(1 - \exp\left(-\frac{4\pi h}{\sqrt{3}c_2}\right)\right), \quad (16)$$

где  $Z_1, Z_2$  – заряды ионов,  $c_1$  – расстояние между ближайшими ионами подложки в плоскостях, параллельных поверхности,  $c_2$  – расстояние между ближайшими ионами в слое адсорбата. Электрон-ионная составляющая поверхностной энергии  $\sigma_{ei}$  задается выражением:

$$\sigma_{ei} = \frac{2\pi}{\beta} [(n_1^2 - n_1 n_2 e^{-\beta l} (1 - e^{-\beta h})) (1 - \frac{\beta d_1 e^{-\beta d_1 / 2}}{1 - e^{-\beta d_1}} \operatorname{ch}(\beta r_{c1})) + (2n_2^2 - n_1 n_2 e^{-\beta l}) \times (1 - e^{-\beta h}) (1 - \frac{\beta h e^{-\beta h / 2}}{1 - e^{-\beta h}} \operatorname{ch}(\beta r_{c2}))], \quad (17)$$

$r_{c1}$  и  $r_{c2}$  – радиусы обрезания псевдопотенциала Ашкрофта для ионов подложки и пленки,  $d_1$  – расстояние между ионными плоскостями материала подложки.

В соответствии с методом функционала плотности величина вариационного параметра  $\beta$  находится из требования минимальности полной межфазной энергии системы, т. е.

$$\left( \frac{\partial \sigma(\beta, D)}{\partial \beta} \right)_{\beta=\beta_{\min}} = 0. \quad (18)$$

Решение уравнения (18) задает значения параметра  $\beta_{\min}$  как функцию величины зазора и структурных параметров для

подложки и покрытия. Итогом решения данной вариационной задачи является полная межфазная энергия системы:  $\sigma(\beta_{\min}(D), D)$ . Зная ее, легко найти энергию адгезии системы как работу, которую необходимо совершить для удаления подложки и пленки друг от друга на бесконечность, т. е.

$$E_a(2D) = \sigma(\infty) - \sigma(2D). \quad (19)$$

Энергия адгезии используется для расчета энергии адсорбции системы. Энергию адсорбции можно измерять экспериментально. Ее мерой является теплота испарения адсорбированных атомов, которая соответствует работе, необходимой для удаления адсорбированной частицы с поверхности подложки. Поэтому за энергию адсорбции может быть выбрана величина удельной энергии адгезии, приходящейся на один адсорбированный атом:

$$E_{ads} = E_a / n_{s2}, \quad (20)$$

где поверхностная концентрация адатомов  $n_{s2}$  является функцией параметров  $c_1$  и  $c_2$ , характеризующих симметрию поверхности субстрата и расположение атомов в адслое. Поверхностная концентрация  $n_{s2}$  является также функцией параметра  $\Theta$ , определяющего степень заполнения адатомами поверхности подложки,

$$\Theta = n_{s2} / n_{s1}, \quad (21)$$

где  $n_{s1}$  характеризует поверхностную концентрацию атомов подложки. Степень заполнения  $\Theta$  адатомами поверхности подложки задается таким образом, чтобы при  $\Theta = 1$  число адатомов равнялось числу атомов на поверхностной грани подложки. Электронную плотность пленки можно представить в виде:

$$n_2(\Theta, h) = Z_2 n_{s2}(\Theta) / h. \quad (22)$$

В настоящей статье полагается, что адатомы, располагаясь на субстрате, повторяют симметрию его поверхностной грани. В этом случае параметр заполнения  $\Theta$  можно выразить через параметры  $c_1$  и  $c_2$ :

$$\Theta = \frac{c_1^2}{c_2^2}. \quad (23)$$

С использованием соотношений (21)–(23) при расчете суммарной межфазной энергии могут быть выделены энергетические характеристики адсорбции как функции параметра заполнения  $\Theta$ , толщины

пленки  $h$  и величины зазора  $D$  между подложкой и адсорбированной пленкой.

Критическая температура магнитного упорядочения моноатомной пленки зависит от параметра покрытия  $\Theta$ , т. е.  $T_{cS}(\Theta)$ , и отличается от критической температуры магнетика в объеме  $T_{cV}$ . Она может быть вычислена следующим образом:

$$T_{cS}(\Theta) \cong \Theta T_{cV} \frac{z_{surf}}{z_{bulk}}, \quad (24)$$

где  $z_{surf}$  – число ближайших соседей в ферромагнитной пленке, а  $z_{bulk}$  – в объемном ферромагнетике. При этом в качестве критической температуры магнитного упорядочения объемного ферромагнетика  $T_{cV}$  предлагается воспользоваться его экспериментальным значением.

При изучении влияния ферромагнитного упорядочения на величину энергии адсорбции было рассмотрено четыре модельных варианта:

1. Случай с отсутствием зазора между подложкой и пленкой ( $D=0$ ) и фиксированной толщиной пленки ( $h=d_2=const$ ), задаваемой объемным значением межплоскостного расстояния  $d_2$  для адсорбируемого металла. Данный подход является классическим в теории адсорбции.

2. Случай с фиксированной толщиной пленки ( $h=d_2=const$ ), но равновесным зазором  $D=D_{\min}$ .  $D_{\min}$  находится из минимума полной межфазной энергии  $\sigma(\beta_{\min}, \Theta, D_{\min})$ . Это позволяет определять равновесные состояния системы при заданном заполнении поверхности адатомами. Нами был также осуществлен учет релаксации толщины пленки  $h$ , задаваемой в виде

$$h=d_2+\gamma, \quad (25)$$

где  $\gamma$  – вариационный параметр, характеризующий релаксацию толщины пленки и определяемый из минимума полной межфазной энергии. Это позволяет выделить еще два случая.

3. Случай с отсутствием зазора между подложкой и пленкой ( $D=0$ ), но равновесной толщиной пленки  $h=h_{\min}$ , определяемой по формуле (25) при известном значении вариационного параметра  $\gamma_{\min}$ .

4. Случай с равновесным зазором  $D=D_{\min}$  и равновесной толщиной пленки  $h=h_{\min}$ . Их значения находятся из минимума полной межфазной энергии  $\sigma(\beta_{\min}, \gamma_{\min}, \Theta, D_{\min})$ . Данный подход позволяет предсказывать образование устойчивых покрытий

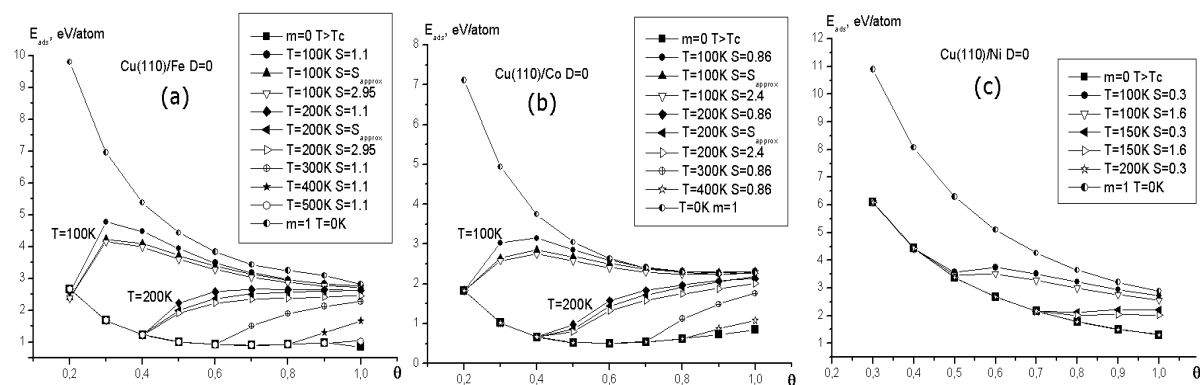


Рис. 1. Зависимость энергии адсорбции от параметра покрытия  $\Theta$  для систем Cu(110)/Fe (a), Cu(110)/Co (b) и Cu(110)/Ni (c) при рассмотрении в рамках первого модельного случая

или указывать на их отсутствие.

В данной статье нами были осуществлены расчеты энергии адсорбции ионов Fe, Co и Ni на подложке из меди при различных ориентациях ее поверхностной грани. Однако проведенные в обобщенных условиях четвертого модельного случая исследования зависимости межфазной энергии от параметра покрытия  $\Theta$ , изменяющегося в интервале  $0.2 \leq \Theta \leq 1$ , выявили невозможность образования устойчивых моноатомных пленок из Fe, Co и Ni на плотноупакованных гранях (111) и (100) медной подложки (отсутствует минимум в межфазной энергии). Было показано, что образование субмонослойных пленок Fe, Co и Ni может осуществляться лишь на рыхлых гранях медной подложки (110) и с более высокими индексами Миллера. Это обосновывает наблюдаемую лишь «островковую» адсорбцию ионов металлов на плотноупакованных гранях металлических поверхностей [4]. Ниже приводятся результаты расчета энергии адсорбции ионов Fe, Co и Ni на рыхлой грани (110) медной подложки для всех четырех модельных случаев.

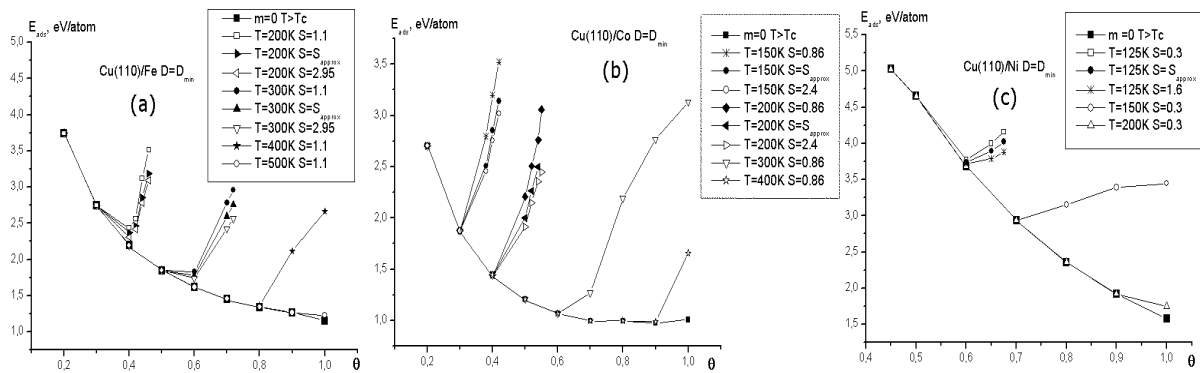
На рисунке 1 представлены результаты расчета энергии адсорбции ионов железа (рис. 1 а), кобальта (рис. 1 б) и никеля (рис. 1 с) на поверхностной грани (110) меди в рамках первого модельного случая. В соответствии с соотношением (24) температура ферромагнитного фазового перехода в пленке железа при параметре покрытия  $\Theta=1$  оценивается  $T_{CS}(\Theta=1)=521$  К, в пленке кобальта  $T_{CS}(\Theta=1)=464$  К и пленке никеля  $T_{CS}(\Theta=1)=209$  К. Из рисунков наглядно видно, что учет эффектов ферромагнитного упорядочения вносит существенный вклад в изменение энергии

адсорбции. Энергия адсорбции в парамагнитной фазе ( $m=0$ ) значительно меньше энергии полностью упорядоченной ферромагнитной фазы ( $m=1$ ). Так, различия в энергии для парамагнитного и ферромагнитного ( $T=0$  К) состояний для систем «железо-медь», «кобальт-медь» и «никель-медь» (при параметре покрытия  $\Theta=1$ ) оказываются около 2–3 эВ. Это говорит о том, что образование ферромагнитной пленки на поверхности подложки значительно увеличивает энергию адсорбции по сравнению с парамагнитной пленкой.

Расчеты показывают, что энергия адсорбции для ионов Ni на медной подложке при всех параметрах напыления  $T$  и  $\Theta$  характеризуется большими значениями, чем для ионов Fe и Co, что отражает лучшую адгезию пленок никеля к меди по отношению к пленкам железа и кобальта на той же медной подложке.

Из рисунка 1 (а, б, с) видно, что с понижением температуры относительно температуры  $T_c$  ферромагнитного фазового перехода энергия адсорбции демонстрирует быстрый рост с увеличением  $\Theta$  от ее значений в парамагнитной фазе к значениям, соответствующим энергии адсорбции для полностью упорядоченного состояния пленки с  $m=1$ . Рассмотрение первого модельного случая показывает, что во всем диапазоне изменения  $\Theta$  реализуется условие существования сплошной моноатомной пленки адсорбата на грани (110).

Значения эффективных спинов магнитных ионов Fe, Co и Ni в соответствующих металлах ( $S_{Fe} \approx 1.11$ ,  $S_{Co} \approx 0.86$ ,  $S_{Ni} \approx 0.30$ ) были использованы нами в качестве параметров расчета, но в области малых  $\Theta=0.2 \div 0.4$  и низких температур бо-



**Рис. 2.** Зависимость энергии адсорбции от параметра покрытия  $\Theta$  для систем Cu(110)/Fe (a), Cu(110)/Co (b) и Cu(110)/Ni (c) при рассмотрении в рамках второго модельного случая

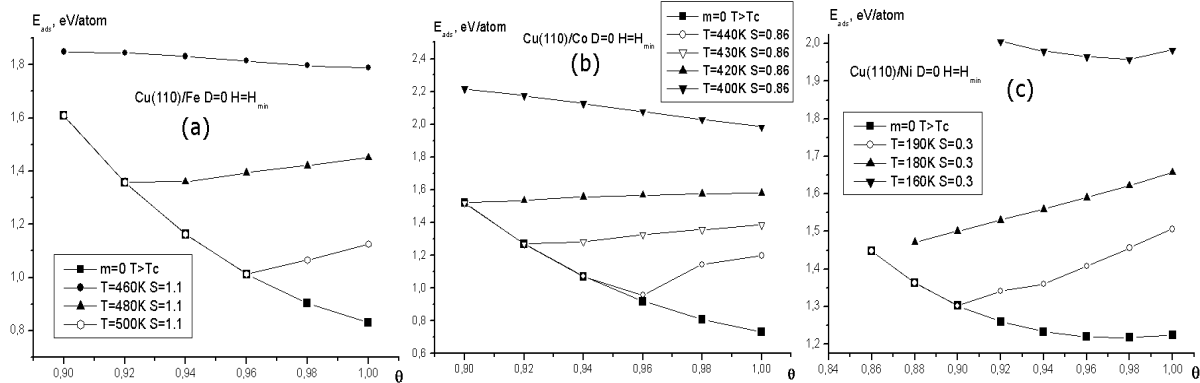
лее предпочтительными для расчетов могут оказаться значения спинов для изолированных ионов с  $S_{Fe} \approx 2.95$ ,  $S_{Co} \approx 2.4$ ,  $S_{Ni} \approx 1.6$ . На рисунке 1 (a, b, c) приведены результаты расчетов энергии адсорбции ионов Fe и Co при  $T=100$  К и  $T=200$  К, а ионов Ni при  $T=100$  К и  $T=150$  К при спинах изолированных ионов, а также при использовании для эффективных спинов в Fe и Co линейной экстраполяции по  $\Theta$  от их значений в металлах при  $\Theta=1$  к значениям в изолированных ионах при  $\Theta=0.2$ . Видно, что использование значений спинов для изолированных ионов сказывается лишь для ионов Fe и Co при  $T=100$  К, приводя к понижению энергии адсорбции на величину  $\Delta E_{ads} \leq 0.5$  эВ при  $\Theta=0.3 \div 0.4$ .

На рисунке 2 представлены результаты расчета энергии адсорбции в рамках второго модельного случая. Видно (рис. 2 a), что в отличие от первого случая устойчивая субмонослойная пленка для железа при температурах  $T=200$  К и  $T=300$  К образуется лишь при  $\Theta < 0.46$  и  $\Theta < 0.72$  соответственно, а при  $\Theta$  больших данных значений энергетически более выгодной оказывается «островковая» адсорбция магнитных ионов железа. При температурах  $T=400$  К и  $T=500$  К образуется устойчивое покрытие во всем диапазоне значений параметра  $\Theta$ . Для температур 200–500 К энергия адсорбции сначала убывает с ростом параметра  $\Theta$  в области, где удельная намагниченность пленки равна нулю (в данной области графики сливаются с графиком, соответствующим  $m=0$   $T > T_c$ ), а при удельной намагниченности, отличной от нуля, энергия адсорбции начинает резко возрастать с ростом  $\Theta$ . Для пленки кобальта предсказываются аналогичные эффекты (рис. 2 b): для температур  $T=150$  К

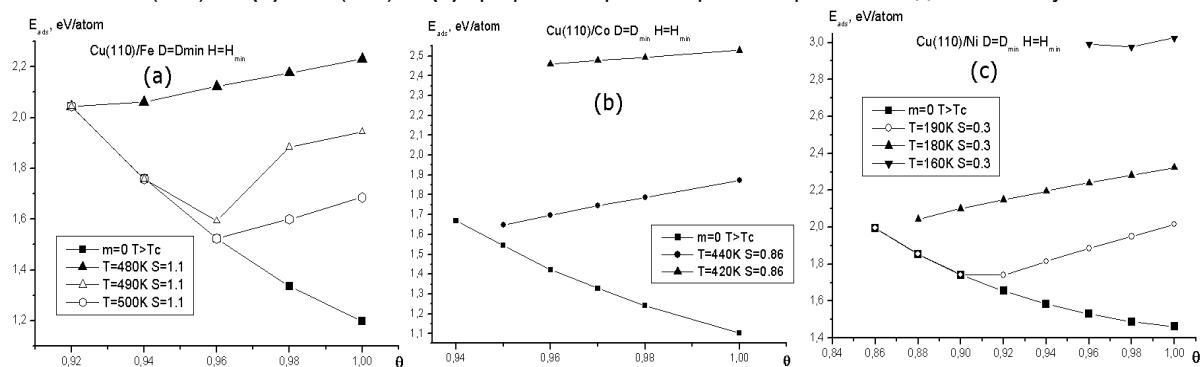
и  $T=200$  К устойчивая магнитоупорядоченная пленка образуется лишь при  $\Theta < 0.42$  и  $\Theta < 0.55$  соответственно, а при  $\Theta$  больших данных значений энергетически более выгодной оказывается «островковая» адсорбция; для  $T=300$  К и  $T=400$  К устойчивое покрытие кобальта образуется во всем диапазоне значений параметра  $\Theta$ . Для пленки никеля (рис. 2 c) при температуре  $T=125$  К устойчивая магнитоупорядоченная пленка образуется при  $\Theta < 0.675$  (уже при  $T \leq 120$  К ферромагнитная составляющая в  $E_a$  пропадает), а при  $\Theta$  больших данных значений энергетически более выгодной оказывается «островковая» адсорбция; для температур  $T=150$  К и  $T=200$  К устойчивое покрытие образуется во всем диапазоне значений параметра  $\Theta$ . При этом в области малых  $\Theta$ , где удельная намагниченность пленки равна нулю, энергия адсорбции убывает с ростом  $\Theta$ , а затем, начиная с некоторых значений  $\Theta$  ( $\Theta=0.7$  для  $T=150$  К и  $\Theta=0.9$  для  $T=200$  К), энергия адсорбции за счет эффектов ферромагнитного упорядочения в пленке меняет характер своего изменения (растет с увеличением  $\Theta$  для  $T=150$  К).

На рисунке 2 представлены также результаты использования в расчетах энергии адсорбции значений спинов для изолированных ионов и процедуры линейной экстраполяции по  $\Theta$  для эффективных спинов магнитных ионов для системы Cu(110)/Fe при  $T=200$  К и  $T=300$  К (рис. 2 a), для системы Cu(110)/Co при  $T=150$  К и  $T=200$  К (рис. 2 b), для системы Cu(110)/Ni при  $T=125$  К (рис. 2 c). Для пленок железа учет данных эффектов приводит к изменениям энергии адсорбции  $\Delta E_{ads} \approx 0.4$  эВ для  $T=300$  К при  $\Theta=0.72$  и  $\Delta E_{ads} \approx 0.3$  эВ для  $T=200$  К при  $\Theta=0.46$ , для пленок кобальта приводит





**Рис. 3.** Зависимость энергии адсорбции от параметра покрытия  $\Theta$  для систем Cu(110)/Fe (a), Cu(110)/Co (b) и Cu(110)/Ni (c) при рассмотрении в рамках третьего модельного случая



**Рис. 4.** Зависимость энергии адсорбции от параметра покрытия  $\Theta$  для систем Cu(110)/Fe (a), Cu(110)/Co (b) и Cu(110)/Ni (c) при рассмотрении в рамках четвертого модельного случая

к изменениям  $\Delta E_{\text{ads}} \cong 0.6$  эВ для  $T=200$  К при  $\Theta=0.55$  и  $\Delta E_{\text{ads}} \cong 0.3$  эВ для  $T=150$  К при  $\Theta=0.44$ , для пленок никеля – к  $\Delta E_{\text{ads}} \cong 0.3$  эВ для  $T=125$  К при  $\Theta=0.67$ . Однако для области малых значений параметра покрытия  $\Theta=0.2 \div 0.4$ , в которой имеет смысл проводить учет данных эффектов, изменения  $\Delta E_{\text{ads}}$  не превышают значений 0.3 эВ для пленок железа и кобальта. В остальных случаях изменения энергии адсорбции слишком малы или лежат в области достаточно больших  $\Theta$ , где эффективные спины магнитных ионов принимают значения как в соответствующих металлах.

На рисунках 3 и 4 представлены результаты расчетов  $E_{\text{ads}}$  для третьего и четвертого модельных вариантов описания адсорбции. Видно, что в данных случаях устойчивое субмонослойное покрытие образуется лишь в очень узком интервале изменения  $\Theta$ : от  $\Theta = 0.90-0.92$  до 1 для пленки железа, в интервале от  $\Theta = 0.90-0.96$  до 1 для пленки кобальта, в интервале от  $\Theta = 0.86-0.96$  до 1 для пленки нике-

ля. Кроме того, температуры, при которых возможно образование устойчивого монослойного покрытия, достаточно высоки и близки к критической температуре. Так, минимальная температура образования устойчивой моноатомной магнитной пленки железа для третьего модельного случая составляет 460 К, а для четвертого случая – 480 К, в то время как для пленки кобальта – 400 К (третий случай) и 420 К (четвертый случай), для пленки никеля – 160 К для третьего и четвертого случаев. В остальном диапазоне изменения параметра покрытия  $\Theta$  и для температур более низких, чем отмечено выше, предсказывается реализация энергетически более выгодной островковой адсорбции.

Анализ результатов исследований позволяет сделать следующие выводы:

1) образование устойчивых субмонослойных пленок ферромагнитных металлов может осуществляться лишь на рыхлых гранях металлических подложек, что объясняет наблюдаемую «островковую»

адсорбцию на плотноупакованных гранях металлических поверхностей;

2) учет эффектов ферромагнитного упорядочения в моноатомной адсорбируемой пленке приводит к заметному увеличению энергии адсорбции;

3) адсорбция ионов переходных металлов на металлической подложке при равновесной толщине пленки и равновесном межфазном зазоре приводит к образованию устойчивой моноатомной ферромагнитной пленки лишь в узком интервале температур, близких к температуре фазового перехода, и значениях параметра  $\Theta$ , близких к единице. В остальном диапазоне значений  $\Theta$  и температурах, существенно ниже температуры фазового перехода, предсказывается осуществление энергетически более выгодной «островковой» адсорбции.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Василевский Ю.А. Носители магнитной записи. М.: Наука, 1989.
- [2] *Nabiyouni G., Schwarzacher W.* // J. Crystal Growth. 2005. V. 275. P. 1259.
- [3] *Ranjbar M., Ahadian M.M., Iraj-zad A., Dolati A.* // Mater. Science Engin. B. 2006. V. 127. P. 17.
- [4] *Schneider C.M., et al.* // Phys. Rev. Lett. 1990. V.64. P.1059; *de Figuera J., et al.* // Phys.Rev. B. 1993. V.47. P.13043; *Kief M.T., Egelhoff W.F.* // Phys.Rev. B. 1993. V.47. P.10785; *Shumann F.O., et. al.* // Phys.Rev. B. 1994. V.50. P.16424; *Elmers H.J., et al.* // Phys. Rev. Lett. 1994. V.73. P.898; *Gu E., et al.* // Phys.Rev. B. 1999. V.60. P.4092.
- [5] *Вакилов А.Н., Мамонова М.В., Матвеев А.В., Прудников В.В.* Теоретические модели и методы в физике поверхности. Омск: ОмГУ, 2005. 212 с.
- [6] *Вонсовский С.В.* Магнетизм. М.: Наука, 1971.

### **ТЕОРЕТИКО-ПОЛЕВОЕ ОПИСАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОЙ КРИТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ СТРУКТУРНО НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ\***

Впервые осуществлено теоретико-полевое описание неравновесной критической динамики неупорядоченной системы в двух петлевом приближении непосредственно для трехмерных систем без использования метода  $\epsilon$ -разложения.

*Ключевые слова:* фазовые переходы и критические явления, коротковременная динамика, ренормгруппа, неупорядоченные системы.

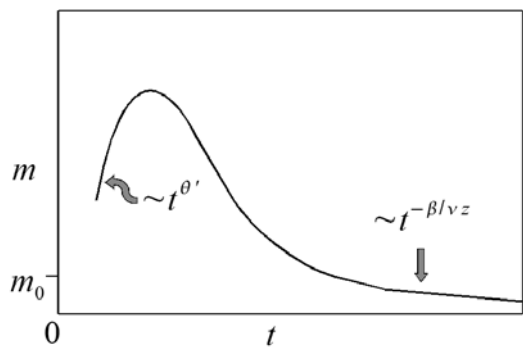
Данная статья посвящена разработке теоретико-полевых методов описания влияния неравновесных начальных состояний на эволюцию намагниченности и корреляционных функций в критической точке для структурно неупорядоченных систем с фиксированной размерностью и осуществлению их реализации для трехмерных систем в двухпетлевом приближении с применением на каждом этапе расчетов методов суммирования асимптотических рядов.

Структурный беспорядок, обусловленный присутствием примесей или других дефектов структуры, зачастую играет важную роль в поведении реальных материалов и физических систем. Дефекты структуры задают новые классы универсальности критического поведения, модифицируя кинетические свойства систем и обуславливая низкочастотные особенности в динамике системы. Статистические особенности описания неупорядоченных систем с замороженным беспорядком и эффекты критического замедления, усиливаемые дефектами структуры, создают значительные трудности как для аналитического описания, так и для численного моделирования поведения подобных систем. В последнее десятилетие был достигнут прогресс в понимании и описании неравновесного критического поведения макроскопических систем, далеких от состояния равновесия. Определяющими особенностями динамики подобных систем являются критическое замедление времени релаксации системы и аномально большие времена корреляции различных состояний системы. Данные особенности приводят к реализации динамического скейлингового поведения, даже когда системы находятся в состояниях, далеких от состояния равновесия.

В пионерской работе [1] на основе ренормгруппового анализа неравновесного критического поведения однородных систем было предсказано, что если начальное состояние системы характеризуется достаточно высокой степенью хаотизации спиновых переменных со значе-

\* Работа поддержана грантом 2.1.1/930 программы «Развитие научного потенциала высшей школы».

нием намагниченности, далеким от состояния насыщения, то в критической точке процесс релаксации системы из данного начального неравновесного состояния на макроскопически малых временах будет характеризоваться не уменьшением, а увеличением намагниченности со временем по степенному закону с показателем, характеризуемым новым независимым динамическим критическим индексом  $\theta'$ :  $m(t) \sim t^{\theta'}$ . При этом с увеличением времени коротковременная динамика увеличения параметра порядка сменяется на привычную долговременную динамику уменьшения параметра порядка со временем по степенному закону  $m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$  с показателем, определяемым отношением  $\beta/\nu z$  со статическими критическими индексами  $\beta$  и  $\nu$  и динамическим критическим индексом  $z$  (рис. 1).



**Рис. 1.** График эволюции намагниченности в критической точке из неравновесного начального состояния с малой  $m_0$

В работе [1] было показано, что на макроскопически малых временах эволюции системы точно так же, как и на больших временах, критические дальнедействующие корреляции флуктуаций параметра порядка обеспечивают универсальный характер сингулярного поведения для многих динамических характеристик системы, таких как динамическая восприимчивость, временная корреляционная функция и т. д. При этом предсказывалась двухвременная зависимость для функции отклика  $\chi(t, t_w)$  и корреляционной функции  $C(t, t_w)$ , которая принимала в коротковременном режиме вид степенной зависимости от отношения переменных  $t/t_w$  ( $t_w$  – время ожидания), характеризуемой показателем  $\theta$ :

$$\chi(t, t_w) \sim (t/t_w)^\theta, C(t, t_w) \sim (t/t_w)^{\theta-1}. \quad (1)$$

Между показателями  $\theta$  и  $\theta'$  в работе было получено связывающее их отношение  $\theta' = \theta + (2-z-\eta)/z$ , поэтому независимым критическим индексом является лишь один из них. С использованием метода  $\varepsilon$ -разложения в работе [1] был проведен расчет нового динамического критического индекса  $\theta'$  (как и показателя  $\theta$ ) в двухпетлевом приближении.

В работе [2] впервые было осуществлено исследование влияния точечных замороженных дефектов структуры на характеристики неравновесного поведения и проведен расчет функции отклика, корреляционной функции и показателей их степенной зависимости от времени в коротковременном режиме в первом порядке теории с использованием метода  $\varepsilon$ -разложения. В работе [3] было осуществлено исследование влияния точечных дефектов структуры во втором порядке теории также с использованием метода  $\varepsilon$ -разложения.

Описание неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных систем предполагает необходимость при теоретико-полевоом описании учета в динамическом производящем функционале дополнительного распределения для начальных значений спиновой плотности  $s_0 = s(\mathbf{x}, 0)$  в момент времени  $t=0$  относительно неравновесного начального значения намагниченности  $m_0$ . Учет данного распределения приводит к появлению в эффективном функционале действия новой вершины взаимодействия, определяющей влияние неравновесных начальных состояний системы на ее критическое поведение [4]. В результате как рассмотрение влияния неравновесных начальных состояний системы, так и учет структурных нарушений в системе приводят в рамках теоретико-полевого описания к усложнению эффективного функционала действия в динамическом производящем функционале по сравнению с критической динамикой однородных систем и к появлению в функционале действия дополнительных вершин динамического взаимодействия флуктуаций намагниченности.

Рассмотрение критического поведения систем, описываемых многовершинными моделями, как показали наши ис-

следования [5], характеризуется рядом особенностей. Во-первых, обычно применяемый для ренормгруппового описания критического поведения различных систем метод  $\varepsilon$ -разложения в случае с многовершинными моделями дает, как было нами показано для ряда случаев [5], ненадежные результаты. Это объясняется конкуренцией различных типов критического поведения в многопараметрическом пространстве модели, что делает протяжку полагаемого малым параметра  $\varepsilon$  к значениям  $\varepsilon=1$  для трехмерных систем невозможной без пересечения областей стабильности различных фиксированных точек ренормгрупповых уравнений. Кроме того, при описании структурно неупорядоченных систем ренормгрупповые уравнения при использовании  $\varepsilon$ -разложения характеризуются случайным вырождением. Для получения достоверных результатов описания критического поведения многовершинных моделей требуется применение более надежного теоретико-полевого метода ренормгруппового описания с фиксированной размерностью системы и последовательным применением методов суммирования асимптотических рядов к получающимся на каждом этапе вычислений рядам теории для ренормгрупповых функций в дифференциальном уравнении Каллана-Симанчика.

Для описания критического поведения структурно неупорядоченных изинговских систем используется модельный гамильтониан Гинзбурга-Ландау-Вильсона:

$$H_V[s] = \int d^d x \left\{ \frac{1}{2!} [(\nabla s(\mathbf{x}))^2 + \tau(\mathbf{x})s^2(\mathbf{x})] + \frac{g}{4!} s^4(\mathbf{x}) \right\}, \quad (2)$$

где  $s(\mathbf{x})$  – поле параметра порядка (спиновой плотности),  $\tau(\mathbf{x})$  – приведённая случайная локальная температура перехода. Случайную температуру можно представить в виде  $\tau(\mathbf{x}) = \tau + V(\mathbf{x})$ , где  $\tau$  – приведённая температура однородной системы, а  $V(\mathbf{x})$  – потенциал поля дефектов. Для точечных дефектов накладывается требование на средние значения моментов случайных величин  $V(\mathbf{x})$  по примесным конфигурациям:

$$\begin{aligned} \langle\langle V(\mathbf{x}) \rangle\rangle &= 0, \\ \langle\langle V(\mathbf{x})V(\mathbf{y}) \rangle\rangle &= v\delta(\mathbf{x}-\mathbf{y}). \end{aligned} \quad (3)$$

Зададим распределение для начальных значений параметра порядка  $s_0(\mathbf{x})$

функцией распределения  $P[s_0] \sim \exp(-H_0[s_0])$ , где

$$H_0[s_0] = \int d^d x \left( \frac{\tau_0}{2} [s_0(\mathbf{x}) - m_0(\mathbf{x})]^2 \right). \quad (4)$$

Будем рассматривать случай чисто релаксационной динамики параметра порядка (модель А), задаваемой уравнением Ланжевена:

$$\partial_t s(\mathbf{x}, t) = -\lambda \frac{\delta H[s]}{\delta s(\mathbf{x}, t)} + \zeta(\mathbf{x}, t), \quad (5)$$

в котором случайная сила  $\zeta$  является белым шумом с кинетическим коэффициентом  $\lambda$ :

$$\begin{aligned} \langle\zeta(\mathbf{x}, t)\rangle_\zeta &= 0, \\ \langle\zeta(\mathbf{x}, t)\zeta(\mathbf{y}, t')\rangle_\zeta &= 2\lambda\delta(\mathbf{x}-\mathbf{y})\delta(t-t'). \end{aligned} \quad (6)$$

В рамках теоретико-полевого описания критической динамики вводится вспомогательное поле  $\tilde{s}(\mathbf{x}, t)$  и производящий функционал для динамических корреляционных функций и функций отклика в виде:

$$\begin{aligned} W[h, \tilde{h}] &= \ln \left\{ \int D(s, \tilde{s}) \exp(-L[s, \tilde{s}] - H_0[s_0]) \times \right. \\ &\quad \left. \times \exp \left( \int d^d x \int_0^\infty dt (\tilde{h}\tilde{s} + hs) \right) \right\}, \end{aligned} \quad (7)$$

в котором функционал действия  $L$  системы с точечными дефектами характеризуется выражением:

$$\begin{aligned} L[s, \tilde{s}] &= \int_0^\infty dt \int d^d x \left\{ \tilde{s}[\dot{s} + \lambda(\tau - \nabla^2)s - \lambda\tilde{s}] \right\} + \\ &+ g \frac{\lambda}{6} \int_0^\infty dt \int d^d x \left\{ \tilde{s}s^3 \right\} - v \frac{\lambda^2}{2} \left[ \int_0^\infty dt \int d^d x \left\{ s\tilde{s} \right\} \right]^2. \end{aligned} \quad (8)$$

Рассмотрение гауссовой составляющей функционала (8) при  $g=0$  позволяет при граничном условии Дирихле ( $\tau_0 = \infty$ ) получить выражения для затравочной функции отклика и затравочной корреляционной функции [1]:

$$G_0(\mathbf{p}, t-t') = \exp(-\lambda(p^2 + \tau)|t-t'|), \quad (9)$$

$$C_0^{(D)}(\mathbf{p}, t, t') = C_0^{(e)}(\mathbf{p}, t-t') + C_0^{(i)}(\mathbf{p}, t+t'), \quad (10)$$

где

$$C_0^{(e)}(\mathbf{p}, t-t') = \frac{1}{p^2 + \tau} \exp(-\lambda(p^2 + \tau)|t-t'|),$$

$$C_0^{(i)}(\mathbf{p}, t+t') = -\frac{1}{p^2 + \tau} \exp(-\lambda(p^2 + \tau)(t+t')).$$

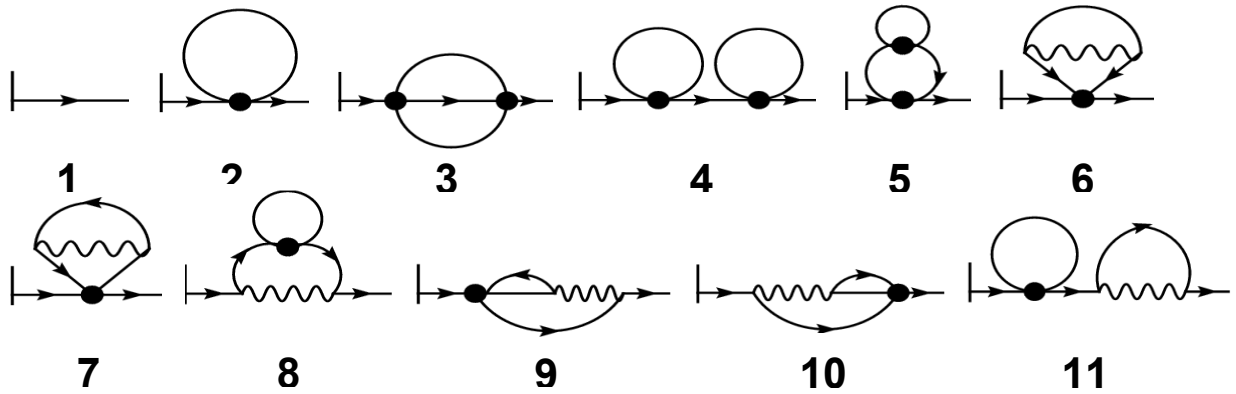


Рис. 2. Диаграммы, определяющие вклад в  $\Gamma_{1,0}^{(i)}$

Линии означают корреляторы  $C_0^{(i)}$ , линии со стрелкой – пропагаторы  $G_0$ . Вершине взаимодействия  $g$  соответствует жирная точка, вершине  $v$  – волнистая линия. «Поверхность»  $t = 0$  обозначена вертикальной чертой

При ренорм-групповом анализе модели для устранения возникающих в пределе  $\tau \rightarrow 0$  при учете взаимодействия критических флуктуаций параметра порядка расходимостей в динамических корреляционных функциях и функциях отклика нами была применена процедура размерной регуляризации и схема минимальных вычитаний [6] с последующим переопределением параметров гамильтониана и мультипликативной перенормировкой полей функционала (7):

$$\begin{aligned} s &\rightarrow Z_s^{1/2} s, & \tilde{s} &\rightarrow Z_{\tilde{s}}^{1/2} \tilde{s}, \\ \lambda &\rightarrow (Z_s/Z_{\tilde{s}})^{1/2} \lambda, & \tau &\rightarrow Z_s^{-1} Z_{\tau} \mu^2 \tau, \\ v &\rightarrow Z_v Z_s^{-2} \mu^{4-d} v, & g &\rightarrow Z_g Z_s^{-2} g \mu^{4-d}, \\ \tilde{s}_0 &\rightarrow (Z_{\tilde{s}} Z_0)^{1/2} \tilde{s}_0, \end{aligned} \quad (11)$$

где  $\mu$  – размерный параметр. Вычисление всех констант перенормировки  $Z_i$ , кроме  $Z_0$ , можно найти в работе [7]. В данной работе представлен расчёт  $Z_0$  для структурно неупорядоченных систем при размерности системы  $d=3$ .

За счёт введения в теорию начальных условий вида (4) возникает необходимость в перенормировке функции отклика  $\langle s(p, t) \tilde{s}(-p, 0) \rangle$ , задающей влияние начальных состояний системы. Поправочные слагаемые в собственнoэнергетической части функции отклика, возникающие за счет эффектов взаимодействия флуктуаций параметра порядка, характеризуются приводимыми динамическими диаграммами Фейнмана, поскольку их вычисление осуществляется с

использованием коррелятора (10), не обладающего свойством трансляционной инвариантности во времени. В работе [1] было введено следующее представление для данной функции отклика:

$$\begin{aligned} G_{1,1}^{(i)}(p, t) &= \langle s(p, t) \tilde{s}(-p, 0) \rangle = \\ &= \int_0^t \tilde{G}_{1,1}(p, t, t') \Gamma_{1,0}^{(i)}(p, t')_{\{\tilde{s}_0\}} dt'. \end{aligned} \quad (12)$$

Одночастичная вершинная функция  $\Gamma_{1,0}^{(i)}(p, t')_{\{\tilde{s}_0\}}$  с одной вставкой поля  $\tilde{s}_0$  в двухпетлевом приближении описывается диаграммами, представленными на рисунке 2 и характеризуемыми требованием, чтобы они содержали хотя бы один коррелятор  $C_0^{(i)}$ . Множитель  $\tilde{G}_{1,1}(p, t, t')$  определяется равновесной составляющей коррелятора  $C_0^{(e)}$  в (10). Отметим, что он отличен от равновесной функции отклика  $G_{1,1}^{(eq)}(p, t - t')$  по причине интегрирования в (12) по времени от начального момента с  $t=0$  вместо  $t = -\infty$ . Однако между ними можно установить функциональную связь уже в двухпетлевом приближении для структурно неупорядоченных систем, если воспользоваться вместо функционала (4) функционалом  $H_{\text{GL}}[S_0]$  (2) с новыми вершинами взаимодействия в функционале действия (8)

$$g \frac{\lambda}{6} \int_0^\infty dt \int d^d x \{ \tilde{s}_0 s_0^3 \} - v \frac{\lambda^2}{2} \left[ \int_0^\infty dt \int d^d x \{ s_0 \tilde{s}_0 \} \right]^2. \quad (13)$$

За счет усреднения по начальным полям возникает дополнительная вершинная функция  $\Gamma_{1,0}^{(eq)}$ , локализованная на «поверхности»  $t=0$ . От первого слагаемого в (13), как показано нами в [4], флуктуационные поправки в  $\Gamma_{1,0}^{(eq)}$  возникают только начиная с трехпетлевого приближения, в то время как за счет второго слагаемого в (13), обусловленного влиянием структурных дефектов, флуктуационные поправки в  $\Gamma_{1,0}^{(eq)}$  возникают уже начиная с двухпетлевого приближения (рис. 3).

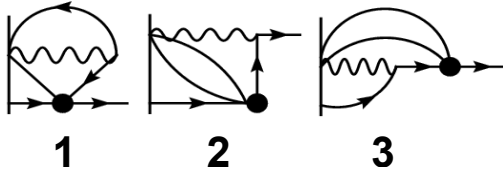


Рис. 3. Диаграммы, определяющие вклад в  $\Gamma_{1,0}^{(eq)}$

Линиям соответствует равновесный коррелятор  $C_0^{(e)}$

Подобно (12), имеет место следующее выражение:

$$G_{1,1}^{(eq)}(p, t-t') = \int_{t'}^t \tilde{G}_{1,1}(p, t, t'') \Gamma_{1,0}^{(eq)}(p, t'')_{\{\tilde{s}(t)\}} dt'' \quad (14)$$

Решив интегральное уравнение

$$\delta(t-t') = \int_{t'}^t K(q, t', t'') \Gamma_{1,0}^{(eq)}(q, t'')_{\{\tilde{s}(t'')\}} dt'' \quad (15)$$

в каждом порядке теории найдем его ядро  $K(q, t', t'')$ , флуктуационные поправки к которому для неупорядоченных систем возникают начиная со второго порядка, а для однородных систем – только с третьего порядка теории. В результате одночастичная вершинная функция  $\Gamma_{1,0}(p, t)$ , определяющая функцию отклика на неравновесные начальные состояния системы, определяется выражением:

$$\Gamma_{1,0}(p, t) = \int_0^t K(p, t, t') \Gamma_{1,0}^{(i)}(p, t')_{\{\tilde{s}_0\}} dt' \quad (16)$$

и задается в двухпетлевом приближении диаграммами, изображенными на рисунках 2 и 3. Используя выражения (12), (14)–(16), а также осуществляя перенормировку полей в соответствии с (11), определим следующее нормировочное соот-

ношение для определения перенормировочной константы  $Z_0$ :

$$Z_0^{-1/2} \Gamma_{1,0}^R(p=0, i\omega/2\lambda = \mu^2) = 1, \quad (17)$$

где  $\Gamma_{1,0}^R(p, \omega)$  – Фурье-образ перенормированной одночастичной вершинной функции  $\Gamma_{1,0}(p, t)$ , рассчитываемой в удобной для нормировки точке с  $\tau=0$ , импульсом  $p=0$  и частотой  $i\omega/2\lambda = \mu^2$ .

Последовательная реализация изложенной процедуры и расчет диаграмм при  $d=3$  позволили вычислить константу перенормировки  $Z_0$  в двухпетлевом приближении:

$$Z_0 = 1 + \frac{2}{3} g_R + 0.660325 g_R^2 + 0.511678 g_R v_R, \quad (18)$$

где  $g_R, v_R$  – перенормированные константы связи.

Инвариантность по отношению к ренорм-групповым преобразованиям обобщенной связной функции Грина  $G_{N,\tilde{N}}^{\tilde{M}} \equiv \langle [s]^N [\tilde{s}]^{\tilde{N}} [\tilde{s}_0]^{\tilde{M}} \rangle$  можно выразить дифференциальным ренорм-групповым уравнением Каллана-Симанчика [6]:

$$\left[ \gamma N/2 + \tilde{\gamma} \tilde{N}/2 + (\tilde{\gamma} + \gamma_0) \tilde{M}/2 + \mu \partial_\mu + \zeta \lambda \partial_\lambda + \kappa \tau \partial_\tau + \beta_g \partial_g + \beta_v \partial_v \right] G_{N,\tilde{N}}^{\tilde{M}} = 0. \quad (19)$$

Ренорм-групповые функции – коэффициенты в (19), характеризующиеся выражениями:

$$\begin{aligned} \gamma &= (\partial_\mu)_0 \ln Z_s, & \tilde{\gamma} &= (\partial_\mu)_0 \ln Z_{\tilde{s}}, \\ \zeta &= (\partial_\mu)_0 \ln \lambda, & \kappa &= (\partial_\mu)_0 \ln \tau, \\ \beta_v &= (\partial_\mu)_0 v, & \beta_g &= (\partial_\mu)_0 g, \\ \gamma_0 &= (\partial_\mu)_0 \ln Z_0, \end{aligned} \quad (20)$$

где  $(\partial_\mu)_0 \equiv \left( \frac{\partial}{\partial \mu} \right)_0$  обозначает дифферен-

цирование с постоянными затравочными параметрами  $g, v, \lambda$  и  $\tau$ . Для коротковременного режима неравновесной критической релаксации принципиально новой является лишь ренорм-групповая функция  $\gamma_0$ , которая в двухпетлевом приближении, как показали наши расчеты, принимает следующее выражение:

$$\gamma_0 = -\frac{2}{3} g_R - 0.209539 g_R^2 - 0.023356 g_R v_R. \quad (21)$$

Неподвижная точка  $(g^*, v^*)$  ренорм-групповых преобразований определяется из системы уравнений:

$$\beta_g(g^*, v^*) = 0, \beta_v(g^*, v^*) = 0. \quad (22)$$

Общее решение дифференциального уравнения (19) методом характеристик в неподвижной точке характеризуется следующей скейлинговой формой [1]:

$$\begin{aligned} G_{N,\tilde{N}}^{\tilde{M}}(\{x, t\}, \tau, \tau_0^{-1}, \lambda, g^*, v^*, \mu) = \\ = l^{(d-2+\eta_s)\frac{N}{2} + (d+2+\eta_{\tilde{s}})\frac{\tilde{N}}{2} + (d+2+\eta_{\tilde{s}}+\eta_0)\frac{\tilde{M}}{2}} \times \\ \times G_{N,\tilde{N}}^{\tilde{M}}(\{x, l^{2+\zeta^*} t\}, d^{-2+\kappa^*}, \tau_0^{-1} l^{2+\zeta^*}, \lambda, g^*, v^*, \mu), \end{aligned} \quad (23)$$

где  $\eta_s = \gamma^*$ ,  $\eta_{\tilde{s}} = \tilde{\gamma}^*$  и  $\eta_0 = \gamma_0^*$  – показатели аномальных размерностей. Можно связать функции в (23) с критическими индексами, фигурирующими в скейлинговых соотношениях, например:

$$\begin{aligned} z = 2 + \zeta^*, 1/\nu = 2 - \kappa^*, \\ \theta = -\frac{\gamma_0^*}{2(2 + \zeta^*)}, \theta' = -\frac{\zeta^* + \gamma^* + \gamma_0^*/2}{2 + \zeta^*}, \end{aligned} \quad (24)$$

и задающими динамический критический индекс  $z$ , критический индекс  $\nu$  корреляционной длины,  $\theta$  и  $\theta'$  – критические индексы неравновесной эволюции функции отклика и намагниченности. В результате в настоящей статье для неупорядоченной модели Изинга были получены следующие выражения для динамических критических индексов:

$$\begin{aligned} z = 2 - 0.25v^* + 0.00840(g^*)^2 + \\ + 0.030862g^*v^* + 0.053240(v^*)^2, \\ \theta = \frac{g^*}{6} + 0.052385(g^*)^2 + 0.026672g^*v^*, \\ \theta' = \frac{g^*}{6} + \frac{v^*}{8} + 0.042698(g^*)^2 - \\ - 0.001106g^*v^* - 0.031250(v^*)^2. \end{aligned} \quad (25)$$

В работе [8] представлены значения констант связи в неподвижной точке  $g^*=2.2514(42)$ ,  $v^*=-0.7049(13)$ , определенные с применением методов суммирова-

ния из уравнений типа (22) с  $\beta$ -функциями, вычисленными в шестипетлевом приближении. Однако ряды теории по константам связи как для  $\beta$ -функций, так и для критических индексов в (25) являются факториально расходящимися, но могут рассматриваться в их асимптотическом контексте. Для получения физически разумных значений критических индексов для трехмерных систем применяются специально разработанные методы суммирования асимптотических рядов [8], из которых наиболее эффективными являются методы Паде-Бореля, Паде-Бореля-Лероя и конформного отображения. К рядам для индексов  $z$ ,  $\theta$  и  $\theta'$  в (25) нами были применены все эти методы суммирования, что позволило получить следующие результаты:

$$z = 2.202(2), \theta = 0.504(2), \theta' = 0.243(2). \quad (26)$$

Полученные значения критических индексов могут быть сопоставлены со значениями  $z \approx 2.185(10)$ ,  $\theta \approx 0.120(16)$ , и  $z \approx 2.504(37)$  и  $\theta \approx 0.270(39)$  из работы [9], полученными при компьютерном моделировании слабо неупорядоченных систем со спиновой концентрацией  $p=0.80$  и сильно неупорядоченных систем с  $p=0.60$  методом коротковременной динамики, и  $z=2.18(10)$  при экспериментальном исследовании слабо неупорядоченных изинговских магнетиков [10].

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Janssen H.K., Schaub B., Schmittmann B. // Z. Phys. B. 1989. V. 73. P. 539.
- [2] Kissner J.G. // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. P. 2676.
- [3] Oerding K., Janssen H.K. // J. Phys. A. 1995. V. 28. P. 4271.
- [4] Прудников В.В., Прудников П.В., Калашников И.А. и др. // ЖЭТФ. 2008. Т. 133. С. 1251.
- [5] Прудников В.В., Прудников П.В., Федоренко А.А. // ЖЭТФ. 1999. Т. 116. № 2. С. 611; Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Fedorenko A.A. // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. P. 8777; Phys. Rev. B. 2001. V. 63. № 18. P. 184201; Прудников В.В., Прудников П.В. // ЖЭТФ. 2002. Т. 122. № 3. С. 636.
- [6] Васильев А.Н. Квантовополевая ренорм-группа в теории критического поведения и стохастической динамике. СПб.: ПИЯФ, 1998.
- [7] Прудников В.В. и др. // ЖЭТФ. 1998. Т. 114. С. 972.
- [8] Криницын А.С., Прудников В.В., Прудников П.В. // ТМФ. 2006. Т. 147. № 1. С. 137.
- [9] Прудников В.В. и др. // Вестник ОмГУ. 2008. № 4. С. 35.
- [10] Rosov N., Hohenemser C., Eibschutz M. // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. P. 3452.



**В.В. Прудников, М.В. Мамонова, С.П. Климов, Н.С. Морозов**

*Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского*

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭФФЕКТОВ ЗАМЕСТИТЕЛЬНОЙ АДСОРБЦИИ МАГНИТНЫХ ИОНОВ НА ПРОЦЕСС ОБРАЗОВАНИЯ СУБМОНОСЛОЙНЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЕНОК НА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЯХ\***

В рамках метода функционала спиновой плотности осуществлено описание активированной адсорбции ионов переходных металлов Fe, Co, Ni на парамагнитной медной подложке при образовании субмонослойной пленки. Исследован процесс вытеснения атомов субстрата ионами адсорбата из приповерхностного слоя.

*Ключевые слова:* поверхностные свойства, ферромагнетизм тонких пленок, активированная адсорбция.

Изучение физических свойств ультратонких ферромагнитных пленок актуально с точки зрения их практического применения в микроэлектронике и вычислительной технике [1–3]. Магнитные пленки обладают рядом уникальных особенностей, способствующих повышению плотности записи информации и быстродействия запоминающих устройств. На основе тонких магнитных пленок разрабатываются также конструкции различных управляемых устройств в СВЧ диапазоне: фильтров, амплитудных модуляторов, ограничителей мощности, фазовых манипуляторов. Наряду с этим изучение физических свойств ферромагнитных пленок носит фундаментальный характер, обуславливая как развитие физики магнитных явлений, так и физики поверхностных явлений. К настоящему времени изучению магнитного упорядочения в ультратонких пленках Fe, Co, Ni посвящено множество экспериментальных работ [4], в которых установлено, что при некоторой эффективной толщине пленок в них устанавливается дальний ферромагнитный порядок. Однако природа и закономерности этого явления в ультратонких пленках остаются не вполне ясными. Основная трудность обобщения и адекватного описания экспериментальных результатов связана со сложным характером процесса роста таких пленок, морфология и свойства которых очень сильно зависят от множества факторов.

Данная статья посвящена теоретическому исследованию адсорбции магнитных ионов переходных металлов Fe, Co, Ni на парамагнитных металлических поверхностях. В работе представлена реализация

\* Работа поддержана грантом 2.1.1/930 программы «Развитие научного потенциала высшей школы».

результатов исследования адсорбции данных магнитных ионов на плотноупакованной грани медной поверхности. Рассматривается вопрос о влиянии магнитного упорядочения на энергетические характеристики адсорбции при учете процессов перемешивания ионов адсорбата и ионов подложки в приповерхностном слое, исследуются условия реализации активированной (заместительной) и неактивированной адсорбции.

Рассмотрим полубесконечный металл со средней плотностью заряда  $n_1$ , ограниченный бесконечной плоской поверхностью и занимающий область  $z < -D-l$ . Пленка адсорбата с плотностью заряда  $n_3$  толщиной  $h$  занимает область  $D < z < D+h$ . В результате процессов взаимного перемешивания атомов адсорбата и субстрата, характерных для активированной адсорбции, поверхность подложки подвергается различным реконструкциям. Наиболее значительную реконструкцию испытывает первый приповерхностный слой подложки. Поэтому этот слой выделен в от-

дельную область со средней плотностью заряда  $n_2$  и толщиной  $l$ . Между пленкой и подложкой в данной модели задается вакуумный зазор шириной  $2D$ . Положительный заряд фона, таким образом, оказывается распределенным в соответствии с формулой:

$$n_0(z) = n_1\theta(-z-D-l) + n_2\theta(z+D+l)\theta(-z-D) + n_3\theta(z-D)\theta(D+h-z). \quad (1)$$

Решение линеаризованного уравнения Томаса-Ферми с использованием граничных условий, отражающих непрерывность потенциала  $\varphi(z)$  и его первой производной  $d\varphi/dz$  при  $z=-D-l$ ,  $z=\pm D$  и  $z=D+h$ , а также конечность потенциала при  $z \rightarrow \pm\infty$ , позволяет при связи  $\varphi(z) = -4\pi n(z)/\beta^2$  получить следующее выражение для плотности электронного распределения  $n(z)$  в системе:

$$\begin{cases} n(z) = n_1(1 - 0.5e^{\beta(z+D+l)}) + 0.5n_2e^{\beta(z+D)}(e^{-\beta h} - 1) + 0.5n_3e^{\beta(z-D)}(1 - e^{-\beta h}), & z < -D-l \\ n(z) = 0.5n_1e^{-\beta(z+D+l)} + n_2(1 - 0.5e^{\beta(z+D)} - 0.5e^{-\beta(z+D+l)}) + 0.5n_3e^{\beta(z-D)}(1 - e^{-\beta h}), & -D-l < z < -D \\ n(z) = 0.5n_1e^{-\beta(z+D+l)} + 0.5n_2e^{-\beta(z+D)}(1 - e^{-\beta l}) + 0.5n_3e^{\beta(z-D)}(1 - e^{-\beta h}), & -D < z < D \\ n(z) = 0.5n_1e^{-\beta(z+D+l)} + 0.5n_2e^{-\beta(z+D)}(1 - e^{-\beta l}) + n_3(1 - 0.5e^{-\beta(z-D)} - 0.5e^{\beta(z-D-h)}), & D < z < D+h \\ n(z) = 0.5n_1e^{-\beta(z+D+l)} + 0.5n_2e^{-\beta(z+D)}(1 - e^{-\beta l}) + 0.5n_3e^{-\beta(z-D)}(e^{\beta h} - 1), & z > D+h \end{cases} \quad (2)$$

Здесь  $\beta$  – вариационный параметр. Величина  $1/\beta$  представляет собой характерную толщину поверхностного слоя, на котором резко меняется электронная плотность. Определим межфазную энергию взаимодействия, приходящуюся на единицу площади контакта, как интеграл по  $z$  от объемной плотности свободной энергии электронного газа:

$$\sigma_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \{f[n(z, \beta)] - f[n_0(z)]\} dz. \quad (3)$$

В рамках модели «желе» объемная плотность свободной энергии неоднородного электронного газа может быть представлена в виде градиентного разложения [5]:

$$f[n(z)] = w_0[n(z)] + w_2[n(z), |\nabla n(z)|^2] + w_4[n(z), |\nabla n(z)|^4] - T(s_{id} + s_{order}), \quad (4)$$

где

$$w_0[n(z)] = w_{kin} + w_{kul} + w_x + w_c \quad (5)$$

есть плотность энергии однородного электронного газа в атомных единицах, включающая последовательно кинетическую, электростатическую, обменную и корреляционную энергии,  $s_{id}$ ,  $s_{order}$  – энтропийные вклады в свободную энергию, учитывающие, соответственно, температурные изменения в энтропии для идеального электронного газа и эффекты магнитного упорядочения в электронной подсистеме.

В магнитоупорядоченном состоянии в металлах происходит перераспределение электронов по одночастичным состояниям за счет влияния возникающего внутреннего магнитного поля обменной природы [6]. При этом электронная плотность квазичастиц со спином «вверх»  $n_+$  оказы-

вается отличной от электронной плотности квазичастиц со спином «вниз»  $n_-$ . Распределение квазичастиц каждой из подсистем по электронным состояниям может быть охарактеризовано своим уровнем Ферми с энергией  $\varepsilon_{F+/-}(n_{+/-})$ . Тогда кинетическая энергия электронной системы будет иметь следующий вид:

$$w_{kin}(z) = 0.3(6\pi^2)^{2/3} \{n_+^{5/3}(z) + n_-^{5/3}(z)\} + k_B \left(\frac{\pi^2}{4}\right) k_B T \left\{ \frac{n_+(z)}{\varepsilon_{F+}} + \frac{n_-(z)}{\varepsilon_{F-}} \right\}; \quad (6)$$

кулоновская энергия:

$$w_{kul} = 0.5\varphi(z)n(z); \quad (7)$$

обменная энергия:

$$w_x = -0.75(6/\pi)^{1/3} \{n_+^{4/3}(z) + n_-^{4/3}(z)\}; \quad (8)$$

корреляционная энергия:

$$w_c = -0.056 \frac{n_-^{1/3}(z)n_+(z)}{0.079 + n_-^{1/3}(z)} - 0.056 \frac{n_+^{1/3}(z)n_-(z)}{0.079 + n_+^{1/3}(z)}. \quad (9)$$

Плотности  $n_+$  и  $n_-$  могут быть выражены через относительную намагниченность  $m$  электронной системы следующим образом:

$$n_{+/-}(z) = n(z) \frac{1 \pm m}{2}. \quad (10)$$

Относительная намагниченность  $m$  в приближении молекулярного поля может быть найдена из решения известного уравнения [6]:

$$m = B_S(3mST_c / (S+1)T), \quad (11)$$

определяемого функцией Бриллюэна

$$B_S(x) = \frac{2S+1}{2S} \operatorname{cth} \left\{ \frac{2S+1}{2S} x \right\} - \frac{1}{2S} \operatorname{cth} \left\{ \frac{x}{2S} \right\}, \quad (12)$$

где  $S$  – спиновый момент магнитных ионов,  $T_c$  – температура Кюри. Несмотря на то, что соотношение (11) было введено для описания магнитных свойств локализованных спинов, в отличие от соотношений, получаемых в теории Стонера ферромагнетизма коллективизированных электронов, оно позволяет достаточно хорошо описывать наблюдаемую температурную зависимость относительной намагниченности ферромагнетиков (в частности, переходных металлов  $Fe$ ,  $Co$ ,  $Ni$  при

спинах  $S_{Fe} \cong 1.11$ ,  $S_{Co} \cong 0.86$ ,  $S_{Ni} \cong 0.30$ , соответствующих эффективным дробным магнитным моментам ионов в данных металлах [6]) за исключением критической флуктуационной области и области низких температур, в которой для описания  $m(T)$  применимо спин-волновое приближение.

Энтропийные вклады в свободную энергию задаются выражениями

$$s_{id} = k_B \left(\frac{\pi^2}{2}\right) k_B T \left\{ \frac{n_+(z)}{\varepsilon_{F+}} + \frac{n_-(z)}{\varepsilon_{F-}} \right\},$$

$$s_{order} = k_B \frac{n(z)}{2} [\ln 4 - (1+m) \ln(1+m) - (1-m) \ln(1-m)]. \quad (13)$$

Градиентные поправки в (4) второго и четвертого порядков по градиентам плотности к кинетической и обменно-корреляционной энергиям неоднородного электронного газа определяются следующими соотношениями [5]:

$$w_2 = \sum_{n=n_-,n_+} \frac{1}{72} \frac{|\nabla n|^2}{n} + w_{2,xc} [n, |\nabla n|^2],$$

$$w_{2,xc} [n_{+/-}] = \frac{A(n_{+/-}) B^2(n_{+/-}) |\nabla n_{+/-}|^2}{3^{4/3} \pi^{5/3} n_{+/-}^{4/3}},$$

$$w_4(z) = w_{4,kin}(z) + w_{4,xc}(z),$$

$$w_{4,kin} = \sum_{n=n_-,n_+} \frac{1.336}{540(3\pi^2 n)^{3/2}} \left[ \left( \frac{\nabla^2 n}{n} \right)^2 - \frac{9}{8} \left( \frac{\nabla^2 n}{n} \right) \frac{|\nabla n|^2}{n} + \frac{1}{3} \frac{|\nabla n|^4}{n} \right], \quad (14)$$

$$w_{4,xc} = \sum_{n=n_-,n_+} 2 \cdot 10^{-5} \exp(-0.2986n^{-0.26}) \left( \frac{\nabla^2 n}{n} \right)^2,$$

где

$$A(n_{+/-}) = 0.4666 + 0.3735 k_{F+/-}^{-2/3} (n_{+/-}),$$

$$B(n_{+/-}) = -0.0085 + 0.3318 k_{F+/-}^{1/5} (n_{+/-}),$$

$$k_{F+/-} (n_{+/-}) = (3\pi^2 n_{+/-})^{1/3},$$

$k_F$  – фермиевский волновой вектор.

Учет дискретности в распределении ионов приводит к поправкам в электростатической энергии взаимодействия как за счет ион-ионного, так и электрон-ионного взаимодействий [5]. В результате межфазную энергию взаимодействия можно записать в виде:

$$\sigma = \sigma_0 + \sigma_{ei} + \sigma_{ii}, \quad (15)$$

где  $\sigma_0$  – вклад от электронной системы в рамках модели «желе»,  $\sigma_{ii}$  – поправка к

энергии электростатического взаимодействия ионов,  $\sigma_{ei}$  – поправка к энергии, связанная с разностью в электростатическом взаимодействии электронов с дискретными ионами и однородным фоном «желе». В соответствии с [5] выражение для  $\sigma_{ii}$  имеет вид:

$$\begin{aligned} \sigma_{ii} = & \sqrt{3} \frac{Z_1^2}{c_1^3} \exp\left(-\frac{4\pi d_1}{\sqrt{3}c_1}\right) + \\ & + 2\sqrt{3} \frac{Z_2^2}{c_2^3} \exp\left(-\frac{4\pi l}{\sqrt{3}c_2}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{4\pi l}{\sqrt{3}c_2}\right)\right) + \\ & + 2\sqrt{3} \frac{Z_3^2}{c_3^3} \exp\left(-\frac{4\pi h}{\sqrt{3}c_3}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{4\pi h}{\sqrt{3}c_3}\right)\right) - \\ & - 2\sqrt{3} \frac{Z_1 Z_2}{(c_1 c_2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}} \left(\frac{d_1}{c_1} + \frac{l}{c_2}\right)\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{4\pi l}{\sqrt{3}c_2}\right)\right) - \\ & - 2\sqrt{3} \frac{Z_2 Z_3}{(c_2 c_3)^{3/2}} \exp\left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}} \left(\frac{l+D}{c_2} + \frac{h+D}{c_3}\right)\right) \times \\ & \times \left(1 - \exp\left(-\frac{4\pi l}{\sqrt{3}c_2}\right)\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{4\pi h}{\sqrt{3}c_3}\right)\right) - \\ & - 2\sqrt{3} \frac{Z_1 Z_3}{(c_1 c_3)^{3/2}} \exp\left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}} \left(\frac{d_1+D+l/2}{c_1} + \frac{h+D+l/2}{c_3}\right)\right) \times \\ & \times \left(1 - \exp\left(-\frac{4\pi h}{\sqrt{3}c_3}\right)\right), \end{aligned} \quad (16)$$

где  $Z_1, Z_2, Z_3$  – заряды ионов,  $c_1$  – расстояние между ближайшими ионами подложки в плоскостях, параллельных поверхности,  $c_2$  – расстояние между ближайшими ионами адслоя,  $d_1$  – межплоскостное расстояние в подложке,  $h$  – толщина адсорбированной пленки,  $l$  – толщина приповерхностного слоя. Электрон-ионная составляющая поверхностной энергии  $\sigma_{ei}$  задается выражением:

$$\begin{aligned} \sigma_{ei} = & \frac{2\pi}{\beta^2} [(n_1^2 - n_1 n_2 (1 - e^{-\beta l}) - \\ & - n_1 n_3 e^{-\beta(2D+l)} (1 - e^{-\beta h})) \times \\ & \times (1 - \frac{\beta d_1 e^{-\beta d_1/2}}{1 - e^{-\beta d_1}} ch(\beta r_{c1})) + \\ & + (2n_2^2 - n_1 n_2 - n_2 n_3 e^{-2\beta D} (1 - e^{-\beta h})) \times \\ & \times (1 - e^{-\beta l}) (1 - \frac{\beta l e^{-\beta l/2}}{1 - e^{-\beta l}} ch(\beta r_{c2})) + \\ & + (2n_3^2 - n_1 n_3 e^{-\beta(2D+l)} - n_2 n_3 e^{-2\beta D} (1 - e^{-\beta h})) \times \\ & \times (1 - e^{-\beta l}) (1 - \frac{\beta h e^{-\beta h/2}}{1 - e^{-\beta h}} ch(\beta r_{c3}))], \end{aligned} \quad (17)$$

где  $r_{c1}, r_{c2}, r_{c3}$  – радиусы обрезания псевдопотенциала Ашкрофта.

В соответствии с методом функционала плотности величина вариационного

параметра  $\beta$  находится из требования минимальности полной межфазной энергии системы, т. е.

$$\left(\frac{\partial \sigma(\beta, D)}{\partial \beta}\right)_{\beta=\beta_{\min}} = 0. \quad (18)$$

Решение уравнения (18) задает значения параметра  $\beta_{\min}$  как функцию величины зазора и структурных параметров для подложки и покрытия. Итогом решения данной вариационной задачи является полная межфазная энергия системы:  $\sigma(\beta_{\min}(D), D)$ . Зная ее, легко найти энергию адгезии системы как работу, которую необходимо совершить для удаления подложки и пленки друг от друга на бесконечность, т. е.

$$E_a(2D) = \sigma(\infty) - \sigma(2D). \quad (19)$$

Энергия адгезии используется для расчета энергии адсорбции системы. Энергию адсорбции можно измерять экспериментально. Ее мерой является теплота испарения адсорбированных атомов, которая соответствует работе, необходимой для удаления адсорбированной частицы с поверхности подложки. В связи с этим за энергию адсорбции может быть выбрана величина удельной энергии адгезии, приходящейся на один адсорбированный атом,

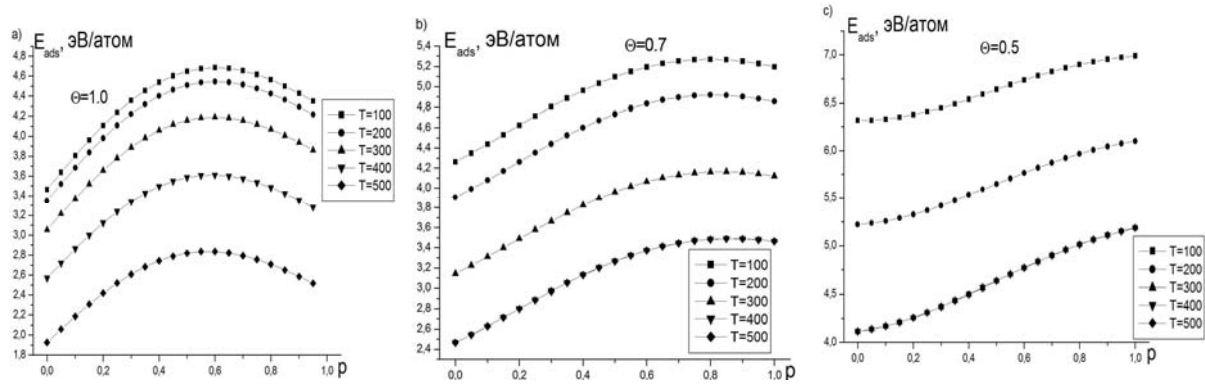
$$E_{ads} = E_a / n_s^a, \quad (20)$$

где поверхностная концентрация адатомов  $n_s^a$  является функцией параметров  $c_1$  и  $c_2$ , характеризующих симметрию поверхности подложки и распределение атомов в адслое. Поверхностная концентрация  $n_s^a$  является также функцией параметра  $\Theta$ , определяющего степень заполнения адатомами поверхности подложки,

$$\Theta = n_s^a / n_{s1}, \quad (21)$$

где  $n_{s1}$  характеризует поверхностную концентрацию атомов нереконструированной подложки.

В данной статье полагается, что в случае активированной адсорбции адатомы, располагаясь на подложке, вызывают реконструкцию только ее первого приповерхностного слоя. В результате в пленке и в приповерхностном слое подложки образуется смесь ионов субстрата и адсорбата, которая по своим свойствам напоминает бинарный сплав двух металлов.



**Рис. 1.** Зависимость энергии адсорбции  $E_{ads}$  от параметра  $p$  для системы  $Fe/Cu(110)$  при  $\Theta=1.0$ ,  $\Theta=0.7$  и  $\Theta=0.5$

Обозначим индексом  $p$  относительную долю атомов адсорбата в пленке. Заряд ионов для бинарного сплава пленки определим как:

$$Z = pZ^a + (1-p)Z^s, \quad (22)$$

где индекс  $a$  характеризует параметры адсорбата, индекс  $s$  – субстрата. Электронную плотность пленки можно представить в виде:

$$n_3(\Theta, p) = Z_3 n_{s3} / h, \quad (23)$$

где  $Z_3$  определяется выражением (22),  $n_{s3}$  – поверхностная концентрация атомов в пленке,  $h$  – толщина пленки, определяемая выражением

$$h = pd^a + (1-p)d^s, \quad (24)$$

где  $d^a$ ,  $d^s$  – расстояния между наиболее плотноупакованными плоскостями в кристаллах адсорбата и субстрата. Аналогичные формулы использовались и для описания бинарного сплава в приповерхностном слое подложки:

$$n_2(\Theta, p') = Z_2 n_{s2} / l, \quad (25)$$

$$l = p'd^a + (1-p')d_1, \quad (26)$$

где  $Z_2$  определяется выражением (22),  $n_{s2}$  – поверхностная концентрация атомов в слое,  $p'$  – относительная доля атомов адсорбата в приповерхностном слое,  $l$  – толщина слоя «перемешивания».

Предполагая равномерное распределение адатомов в приповерхностном слое подложки с повторением ее симметрии, параметр заполнения  $\Theta$  можно выразить через параметры бинарных растворов  $p$  и  $p'$ :

$$\Theta = pq + p'q', \quad (27)$$

где параметры  $q$  и  $q'$  определяются выражениями:

$$q = n_{s3} / n_{s1}, \quad q' = n_{s2} / n_{s1} \quad (28)$$

и характеризуют степень заполнения атомами пленки и приповерхностного слоя соответственно. Параметры  $\Theta$ ,  $q$  и  $q'$  связаны друг с другом соотношением:

$$\Theta = q + q' + 1. \quad (29)$$

Степень заполнения  $\Theta$  адатомами поверхности подложки задается при этом таким образом, чтобы для  $\Theta=1$  число адатомов равнялось числу атомов в поверхностной грани подложки. Параметры  $c_2$  и  $c_3$ , задающие минимальные расстояния между атомами в пленке и приповерхностном слое, определяются через параметр  $c_1$  соотношениями:

$$c_2 = c_1 \sqrt{q'}, \quad c_3 = c_1 \sqrt{q}. \quad (30)$$

Поверхностные концентрации  $n_{s1}$  и  $n_{s2}$  являются функциями этих параметров и зависят от симметрии грани подложки, на которой происходит адсорбция.

Критическая температура магнитного упорядочения моноатомной пленки зависит от параметра покрытия  $\Theta$ , т. е.  $T_{cs}(\Theta)$ , и отличается от критической температуры магнетика в объеме  $T_{cv}$ . Она может быть вычислена следующим образом:

$$T_{cs}(\Theta) \cong \Theta T_{cv} \frac{z_{surf}}{z_{bulk}}, \quad (31)$$

где  $z_{surf}$  – число ближайших соседей в ферромагнитной пленке, а  $z_{bulk}$  – в ферромагнетике.

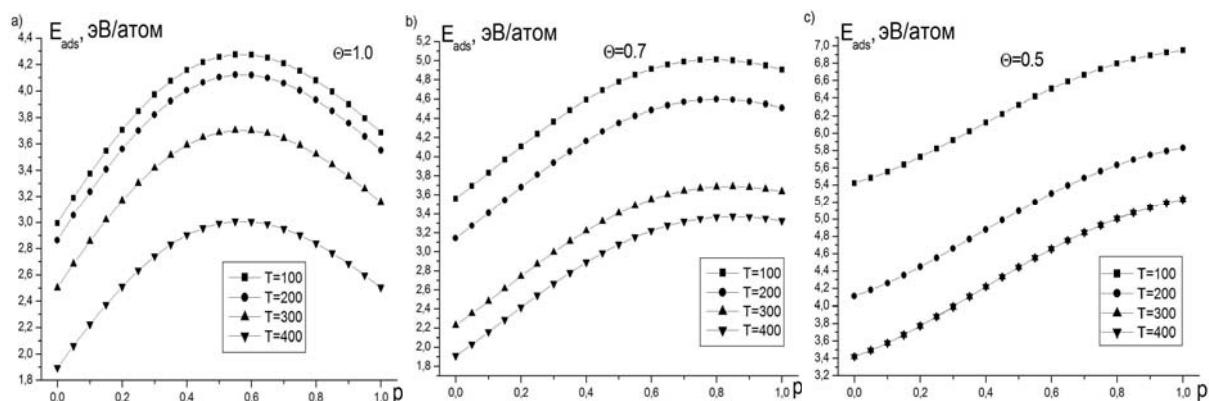


Рис. 2. Зависимость энергии адсорбции  $E_{ads}$  от параметра  $p$  для системы  $Co/Cu(110)$  при  $\Theta=1.0$ ,  $\Theta=0.7$  и  $\Theta=0.5$

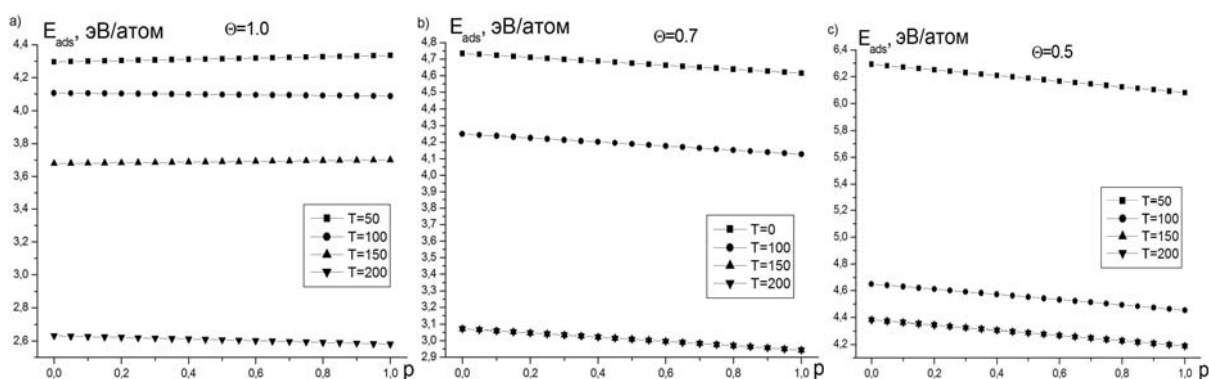


Рис. 3. Зависимость энергии адсорбции  $E_{ads}$  от параметра  $p$  для системы  $Ni/Cu(110)$  при  $\Theta=1.0$ ,  $\Theta=0.7$  и  $\Theta=0.5$

Теоретические построения модели в данной работе были реализованы для случая адсорбции магнитных ионов металлов на парамагнитной медной подложке с ориентацией поверхностной грани (110).

На рисунке 1 представлены графики рассчитанной энергии адсорбции субмонослойной пленки железа  $Fe$  на грани  $Cu(110)$  в зависимости от параметра бинарного раствора  $p$ , задающего относительную долю атомов адсорбата в пленке, для трех значений  $\Theta=1.0$ ,  $0.7$ ,  $0.5$ .

Отчетливо заметно смещение положения максимума энергии адсорбции как функции параметра  $p$  от значений  $p=0.5$ – $0.6$ , характеризующих в зависимости от температуры энергетическую выгодность практически половинного перемешивания ионов адсорбата с ионами подложки для  $\Theta=1.0$ , к максимуму при  $p=1$  для  $\Theta=0.5$ , характеризующему проявление энергетической невыгодности заместительной адсорбции с уменьшением параметра покрытия  $\Theta$ .

Аналогичные выводы следуют из изучения поведения графиков энергии ад-

сорбции для субмонослойной пленки  $Co$  (рис. 2). Однако для адсорбции ионов  $Ni$  наблюдается иная картина (рис. 3): положение максимума энергии адсорбции практически при всех  $\Theta < 1$  находится при  $p=0$ , что указывает на энергетическую выгодность для  $Ni/Cu(110)$  адсорбционной структуры типа «сэндвича», когда атомы адсорбата почти полностью вытесняют атомы субстрата из первого приповерхностного слоя. При  $\Theta=1$  для энергии адсорбции  $Ni$  наблюдается настолько слабая зависимость от состава адсорбируемой пленки, что тепловые флуктуации могут полностью перемешивать ионы адсорбата и подложки. Такие отличия в адсорбции  $Ni$  от адсорбции  $Fe$  и  $Co$  обусловлены, с одной стороны, его наименьшим ионным радиусом по сравнению с ионами  $Fe$ ,  $Co$  и  $Cu$ , что способствует более легкому проникновению ионов  $Ni$  в приповерхностный слой меди, а с другой стороны, кристаллические ГЦК структуры металлов  $Ni$  и  $Cu$  наиболее близки по сравнению с другими исследуемыми металлами, их постоянные решетки  $a_{Ni}=3.52\text{Å}$ ,  $a_{Cu}=3.61\text{Å}$ .

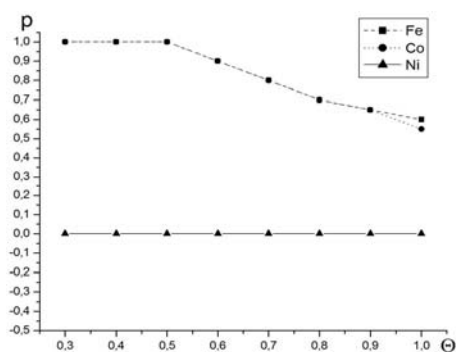


Рис. 4. Зависимость положения максимума энергии адсорбции от параметра покрытия  $\theta$

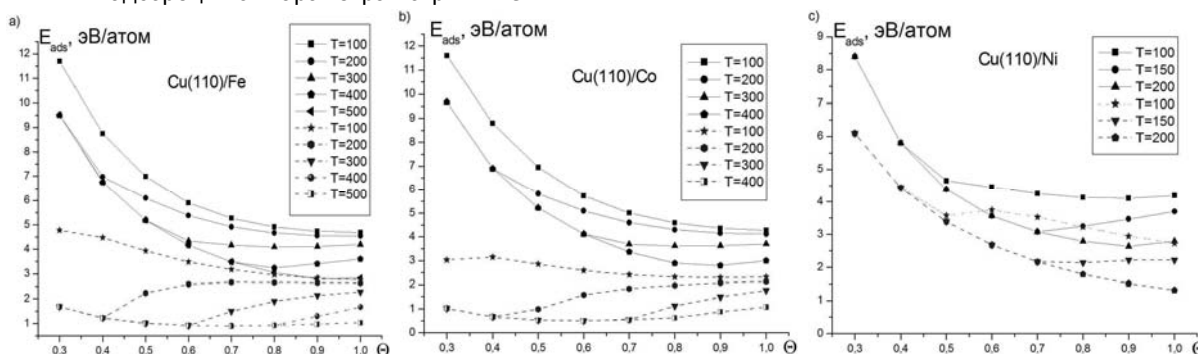


Рис. 5. Зависимость энергии адсорбции  $E_{ads}$  от параметра покрытия  $\theta$  для систем  $Cu(110)/Fe$ ,  $Cu(110)/Co$  и  $Cu(110)/Ni$

На рисунке 5 пунктирными линиями обозначены графики для случая неактивированной адсорбции (отсутствие эффектов перемешивания и замещения ионами адсорбата ионов подложки), сплошными линиями – для случая активированной адсорбции в системе. Из представленных графиков наглядно видно: значения энергии активированной адсорбции значительно превышают значения для неактивированной адсорбции ( $\Delta E_{ads} \geq 2$  эВ), особенно в области малых значений параметра  $\theta$ , что указывает на энергетическую выгодность заместительной адсорбции по сравнению с неактивированной. Кроме того, эффекты ферромагнитного упорядочения оказывают значительное влияние на энергию адсорбции, приводя к ее увеличению. Так, в парамагнитной фазе ( $m=0$ ,  $T > T_{cS}$ ) энергия адсорбции оказывается меньше, чем в случаях с заметным ферромагнитным упорядочением, например, при  $T=100$ К.

Отметим, что наблюдаемые температурные изменения энергии адсорбции во многом обусловлены температурной зависимостью намагниченности ферромагнитной пленки, так как без учета эффектов намагниченности влияние температу-

На рисунке 4 представлены графики зависимости значений параметра  $p$  состава пленки в максимуме энергии адсорбции ионов  $Fe$ ,  $Co$  и  $Ni$  на медной подложке с изменением параметра покрытия  $\theta$ . Данные значения были использованы для расчета энергии адсорбции для энергетически более выгодной адсорбционной структуры ионов железа  $Fe$ , кобальта  $Co$  и никеля  $Ni$  на грани  $Cu(110)$  в зависимости от параметра покрытия пленки  $\theta$  (рис. 5).

ры на величину энергии адсорбции является незначительным.

Таким образом, в данной статье показано, что учет эффектов спонтанного намагничивания в субмонослойных пленках из ферромагнитных материалов оказывает существенное влияние на величину энергии адсорбции, а также стимулирует заместительные процессы с ростом параметра покрытия  $\theta$ .

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Василевский Ю.А. Носители магнитной записи. М.: Наука, 1989.
- [2] *Nabiyouni G., Schwarzacher W.* // J. Crystal Growth. 2005. V. 275. P. 1259.
- [3] *Ranjbar M., Ahadian M.M., Irajizad A., Dolati A.* // Mater. Science Engin. B. 2006. V. 127. P. 17.
- [4] *Schneider C.M., Dressler P., Schuster P. et al.* // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. P. 1059; *Figuera J., Pietro J.E., Okal C. et al.* // Phys.Rev. B. 1993. V. 47. P. 13043; *Kief M.T., Egelhoff W.F.* // Phys.Rev. B. 1993. V. 47. P. 10785; *Shumann F.O., Buckley M.E., Bland J.A.C.* // Phys.Rev. B. 1994. V. 50. P. 16424; *Elmers H.J., Haushild J., Hoche H. et al.* // Phys. Rev. Lett. 1994. V. 73. P. 898; *Gu E., Hope S., Tselepi M. et al.* // Phys.Rev. B. 1999. V. 60. P. 4092.
- [5] *Вакилов А.Н., Мамонова М.В., Матвеев А.В., Прудников В.В.* Теоретические модели и методы в физике поверхности. Омск, 2005.
- [6] *Вонсовский С.В.* Магнетизм. М.: Наука, 1971.

## **ВОЛНОВОЙ МЕХАНИЗМ МАССОПЕРЕНОСА В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ ПРИ ВЫСОКОИНТЕНСИВНЫХ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ**

В рамках модельной задачи рассматривается массоперенос частиц примеси с поверхности металла в его объем под действием концентрированных потоков энергии. Предполагается, что одновременно протекает процесс релаксации системы к состоянию локального равновесия. Показано, что на временах  $t \leq \tau_D$ , где  $\tau_D$  - есть время релаксации диффузионного потока к своему локально-равновесному значению, преобладает волновой механизм переноса. На основе рассмотренной модели делаются предположения относительно некоторых экспериментальных результатов.

*Ключевые слова:* локально-неравновесный массоперенос, эффекты дальнего действия, волновой механизм переноса.

### **Введение**

Воздействие высокоэнергетическими пучками частиц и лазерным излучением на твердые тела является в настоящее время одним из эффективных методов модификации свойств металлических материалов [1; 2]. Помимо технологического аспекта, существует значительный интерес и с физической точки зрения, так как взаимодействие концентрированных потоков энергии с твердым телом сопровождается рядом сложных физических явлений, происходящих в приповерхностном слое, полного понимания которых пока еще нет.

Быстрый ввод энергии индуцирует в образце такие явления, как фазовые переходы, формирование упруго-пластичных и ударных волн, дефектообразование, эрозию вещества, значительные температурные поля, интенсивный массоперенос [1; 2]. Существенной особенностью этих процессов является высокая скорость их протекания с характерными временами порядка  $10^{-8}$ – $10^{-5}$  с. Помимо этого, воздействие интенсивных пучков частиц вызывает изменения как в облученной, так и в не облученной области, приводя к разного рода эффектам дальнего действия [3–5].

Одно из проявлений такого эффекта было обнаружено при облучении слоистых металлических образцов мощными пучками ионов углерода [6]. В эксперименте была зафиксирована значительная глубина проникновения атомов пленки в подложку, в несколько раз превышающая глубину проникновения ионов пучка. Подобный эффект интенсивного массопереноса наблюдался и в ряде других работ [7–9].

Природа эффектов дальнего действия еще мало понятна. В частности, пока не удалось в рамках известных диффузионных механизмов



объяснить высокоинтенсивный массоперенос вещества с поверхности вглубь образца. Так, учет эффекта термодиффузии не дал даже качественного согласия между теоретическими и экспериментальными кривыми [6].

Теоретическое исследование массопереноса в облученных образцах обычно проводится в рамках гидродинамического описания, основанного на гипотезе о локальном равновесии. Между тем, как уже упоминалось, индуцированные в образцах процессы протекают достаточно быстро с характерными временами, лежащими на наносекундной шкале. Полученные, например, в экспериментах концентрационные профили относятся к моментам времени порядка  $10^{-7}$ – $10^{-6}$  с. [6] На таких временных промежутках в образце может просто не успевать устанавливаться локальное равновесие. Как следствие, использование обычных гидродинамических уравнений и, в частности, диффузионного уравнения (основанного на законе Фика) для описания массопереноса становится некорректным. В случае быстрых изменений процессы переноса в среде будут происходить на фоне релаксации системы к состоянию локального равновесия. Вместе с другими этот фактор может оказаться существенным при анализе наблюдаемых закономерностей.

В отсутствие локального равновесия в среде как диффузионный, так и тепловой потоки уже не будут определяться, например, градиентами концентрации и температуры соответственно, а должны рассматриваться как независимые переменные наравне с другими параметрами, определяющими макроскопическое состояние системы. Общий подход в соответствии с расширенной необратимой термодинамикой (РНТ) [10; 11] состоит в том, что для описания быстрых гидродинамических процессов требуется увеличение числа независимых переменных, определяющих неравновесное состояние системы, по сравнению с классической термодинамикой. В качестве таких новых переменных часто используются диссипативные потоки, входящие в законы сохранения массы, энергии и импульса. В рамках РНТ для потоков получаются дифференциальные уравнения релаксационного типа. Так, если  $\mathbf{q}$  и  $\mathbf{J}$  – тепловой и диффузионный потоки, а  $T$  и  $C$  –

температура среды и массовая концентрация примеси, то уравнения для потоков имеют вид (уравнения Максвелла-Каттанео) [10]

$$\mathbf{q} + \tau_T \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = -\lambda \nabla T, \quad (1)$$

$$\mathbf{J} + \tau_D \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} = -\rho D \nabla C, \quad (2)$$

где  $\rho$  – плотность среды,  $\lambda$  и  $D$  – коэффициенты теплопроводности и диффузии,  $\tau_T$  и  $\tau_D$  – времена релаксации потоков к своим локально-равновесным значениям. При  $\tau_T = \tau_D = 0$  (1) и (2) сводятся к обычным законам Фурье и Фика. Как следствие, использование соотношений (1) и (2) приводит к гиперболическим уравнениям переноса, которые в отличие от параболических уравнений дают конечную скорость распространения возмущений в среде и обладают волновыми свойствами.

Гиперболические уравнения переноса достаточно давно используются для описания теплопереноса в локально-неравновесных системах [12] и, в частности, в среде, подверженной лазерному облучению (см., например: [13; 14]). Этот подход активно применяется также и для описания ряда явлений, происходящих при высокоскоростном затвердевании в бинарных двухфазных системах, когда локальное равновесие нарушается в области движущейся границы раздела фаз [15–18]. Некоторые другие применения можно найти также в [19–21].

Цель данной статьи состоит в теоретическом исследовании массопереноса в облучаемом образце в локально-неравновесных условиях. Приведенные выше оценки позволяют предположить, что наблюдаемые в некоторых экспериментах концентрационные профили формируются на малых временах, когда система еще не находится в локальном равновесии. Следует отметить, что протекание данного процесса подвержено влиянию разнообразных и взаимосвязанных явлений, перечисленных выше. Однако учет всех факторов в рамках одной модели пока представляется нереалистичным. Чтобы изучить особенности массопереноса в локально-неравновесных условиях, здесь рассматривается достаточно простая модель, мотивированная условиями экспе-

римента, описанного выше [6]. Имеется двухкомпонентная система, состоящая из однородного металлического образца с тонким поверхностным слоем другого элементного состава, имитирующего пленку на поверхности металла. В результате облучения частицы примеси мигрируют вглубь образца, при этом предполагается отсутствие в системе фазовых превращений. Несмотря на относительно простую формулировку, такая постановка дает возможность воспроизвести некоторые особенности экспериментальных концентрационных кривых и сделать определенные предположения о протекании процесса в реальных условиях.

#### Математическая постановка

Рассмотрим одномерную систему, в которой металлический образец занимает полупространство  $x > 0$ . В начальный момент времени поверхностный слой глубины  $l_0$  равномерно заполнен примесными частицами (аналог поверхностной пленки) с массовой концентрацией  $\omega_0$ , которые под действием внешнего теплового потока (облучения) мигрируют в объем образца. Нагрев вещества в результате облучения учитывается наличием теплового источника  $W$ , распределенного в приповерхностном слое. Нас будут интересовать распределения примеси, формирующиеся в образце на временах, сравнимых со временем установления в системе локального равновесия. Для простоты все теплофизические характеристики среды принимаем постоянными.

Во многих случаях релаксация теплового потока к своему локально-равновесному значению (тепловая релаксация) происходит значительно быстрее, чем релаксация диффузионного потока, т. е.  $\tau_T \ll \tau_D$  [11; 15]. Другими словами, локальное равновесие устанавливается вначале в температурном поле и лишь затем в диффузионном. Поэтому если рассматривать промежутки времени  $t$ , для которых  $\tau_T \ll t \leq \tau_D$ , то можно считать, что тепловая релаксация уже наступила, тепловой поток определяется своим локально-равновесным значением  $q = -\lambda \nabla T$  (закон Фурье) и температура среды может описываться в приближении локального равновесия. В то же время диффузионная релаксация еще продолжается и диффузионный поток эволюционирует

согласно релаксационному уравнению (2). Именно такой случай рассмотрен далее в статье.

Уравнение (2) может быть записано в более общем виде, чтобы учесть эффекты термодиффузии [21]. Таким образом, мы будем исходить из следующей системы одномерных уравнений для потоков

$$q + \lambda \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad (3)$$

$$J + \tau_D \frac{\partial J}{\partial t} = -\rho D \left( \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{k_T}{T} \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad (4)$$

где  $k_T = QC/k_B T$  – термодиффузионное отношение,  $Q$  – постоянная теплота переноса примеси [22] и  $k_B$  – постоянная Больцмана.

Комбинация выражения (4) с законом сохранения массы

$$\rho \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0 \quad (5)$$

приводит к следующему уравнению для диффузионного потока

$$\tau_D \frac{\partial^2 J}{\partial t^2} + \frac{\partial J}{\partial t} - D \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} = -\rho D \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{QC}{k_B T^2} \frac{\partial T}{\partial x} \right). \quad (6)$$

Следует отметить, что подобным образом можно получить замкнутое уравнение и непосредственно для концентрации. Однако в этом случае возникает проблема с явным использованием граничных условий, выражающих отсутствие потока вещества через поверхность. Как уже отмечалось, в локально-неравновесной среде поток уже не определяется градиентом концентрации и отсутствие потока не выражается равенством  $\partial C / \partial x = 0$ . Поэтому удобно использовать уравнение (6) для самого потока, так как в этом случае определение граничных условий физически более ясно. После нахождения диффузионного потока примесная концентрация может быть определена в результате интегрирования уравнения (5) по времени.

Переходя далее к безразмерным переменным  $t/\tau_D$ ,  $x/(\tau_D V_D)$ ,  $V_D^2 = D/\tau_D$ , запишем уравнение (6) в виде

$$\frac{\partial^2 j}{\partial t^2} + \frac{\partial j}{\partial t} - \frac{\partial^2 j}{\partial x^2} = -\alpha \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{C}{(\Theta + 1)^2} \frac{\partial \Theta}{\partial x} \right], \quad (7)$$

где для новых независимых переменных здесь и далее используются прежние обозначения  $x$ ,  $t$ ;  $j = J/\rho V_D$  – безразмерный

диффузионный поток,  $\Theta = (T - T_0)/T_0$ ,  $T_0$  – равновесная температура среды,  $\alpha = Q/k_B T_0$ .

Наконец, используя закон сохранения (5) в форме

$$C(x, t) = - \int_0^t \frac{\partial j(x, \tau)}{\partial x} d\tau + C_0(x), \quad (8)$$

где  $C_0(x) = C(x, 0)$  – начальная примесная концентрация, получим замкнутое уравнение для диффузионного потока

$$\frac{\partial^2 j}{\partial t^2} + \frac{\partial j}{\partial t} - \frac{\partial^2 j}{\partial x^2} + u \frac{\partial j}{\partial x} = v \int_0^t \frac{\partial j}{\partial x} d\tau + w, \quad (9)$$

где

$$u(x, t) = - \frac{\alpha}{(\Theta + 1)^2} \frac{\partial \Theta}{\partial x},$$

$$v(x, t) = \alpha \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{1}{(\Theta + 1)^2} \frac{\partial \Theta}{\partial x} \right], \quad (10)$$

$$w(x, t) = -\alpha C_0(x) \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{1}{(\Theta + 1)^2} \frac{\partial \Theta}{\partial x} \right].$$

Граничные и начальные условия для уравнения (9) берутся в виде

$$j(0, t) = j(\infty, t) = 0, \quad (11)$$

$$j(x, 0) = 0 \quad (12)$$

и выражают условия отсутствия потока на границах и в начальный момент времени. Записывая далее выражение (2) в безразмерных координатах и используя равенство (12), получим начальное условие для временной производной:

$$\left. \frac{\partial j}{\partial t} \right|_{t=0} = - \frac{\partial C(x, 0)}{\partial x}, \quad \left( \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{t=0} = 0 \right). \quad (13)$$

Уравнение (9) представляет собой интегро-дифференциальное уравнение с переменными коэффициентами (10), зависящими от температуры среды. Для ее определения было использовано уравнение теплопроводности, которое получается в результате комбинации (3) с законом сохранения энергии:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = - \frac{\partial q}{\partial x} + W,$$

где  $c_p$  – теплоемкость, и в безразмерных координатах имеет вид

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \gamma^{-1} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} + \frac{\tau_D}{\rho c_p} W, \quad (14)$$

где  $\gamma = D/a$  и  $a$  – коэффициент температуропроводности. Соответствующие начальные и граничные условия берутся в виде

$$\Theta(x, 0) = 0, \quad \left. \frac{\partial \Theta}{\partial x} \right|_{x=0} = 0. \quad (15)$$

Решение граничной задачи (14)–(15) дается выражением [23]

$$\Theta(x, t) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\gamma}{\pi}} \int_0^t \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \int_0^\infty d\xi W'(\xi, t - \tau) \times$$

$$\times [e^{-\gamma(x-\xi)^2/4\tau} + e^{-\gamma(x+\xi)^2/4\tau}], \quad (16)$$

где  $W' = \tau_D W / \rho c_p$  – безразмерный тепловой источник.

### Численное решение и обсуждение результатов

На основе температурного распределения (16) было получено численное решение неоднородного интегро-дифференциального уравнения (9). Для этого были использованы квадратурная формула трапеций для представления интеграла и конечно-разностные соотношения второго порядка для замены производных, что привело в итоге к пространственно-временной сетке решений для диффузионного потока [1]. Пространственный и временной шаг составили, соответственно,  $5 \cdot 10^{-2}$  и  $10^{-2}$  в выбранных безразмерных переменных. Примесные распределения находились с использованием уравнения (8).

При вычислении использовались следующие значения параметров:  $l = 1$ ,  $c_0 = 1$ ,  $T_0 = 300$  К,  $Q = 5$  эВ [6], ( $\alpha \approx 200$ ),  $\gamma = D/a = 10^{-2}$  [11; 15]. Чтобы избежать расходимости, начальное примесное распределение в виде прямоугольника заменялось гладкой кривой (рис. 1):

$$C_0(x) = \frac{c_0}{2} [1 - \text{th } \delta(x - l)]$$

с  $\delta = 25$ . Тепловой источник брался в виде [14]:

$$W'(x, t) = W_0 e^{-t/t_w} e^{-\mu x},$$

где безразмерные постоянные  $W_0$ ,  $t_w$  и  $\mu$  определяются условиями эксперимента. В данном случае принимались следующие значения:  $t_w = 1$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $W_0 = 1$ . Следует отметить, что в реальных

экспериментах энергосвободное достигает максимума спустя некоторое время. В данной модельной задаче для простоты было принято, что внешнее воздействие мгновенно достигает максимальной величины.

Результаты вычислений представлены на рисунках 1–8 (сплошные линии). Для сравнения на рисунках представлены также примесные распределения (пунктирные линии), полученные в приближении локального равновесия ( $\tau_D = 0$ ) на основе решения диффузионного уравнения с учетом термодиффузии

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \alpha \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{C}{(\Theta + 1)^2} \frac{\partial \Theta}{\partial x} \right],$$

$$C(\infty, t) = 0, C(x, 0) = C_0(x), C_x(0, t) = 0.$$

Как видно из рисунков 1–3, начальное примесное распределение деформируется как в направлении поверхности образца, так и в его глубину: верхний правый край кривой движется в сторону поверхности, в то время как нижний край перемещается в противоположную сторону.

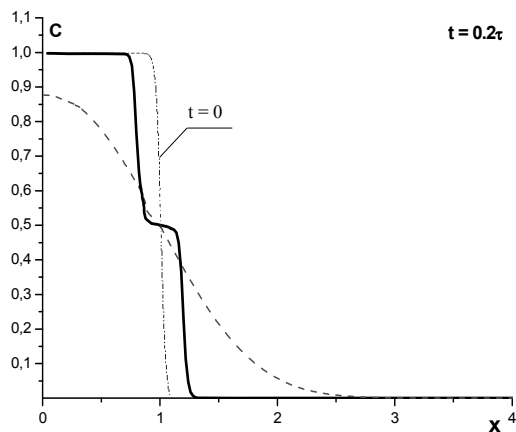


Рис. 1. Концентрационные профили при  $t = 0,2 \square_D$

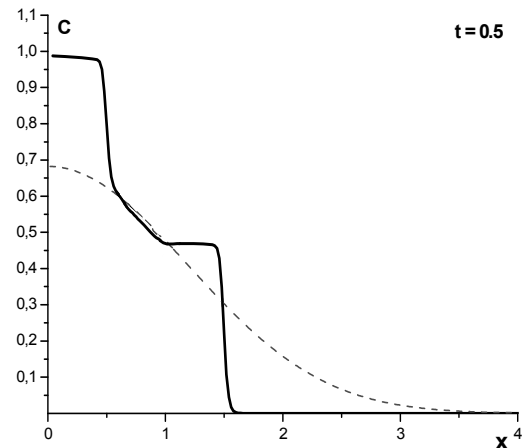


Рис. 2. Концентрационные профили при  $t = 0,5 \square_D$

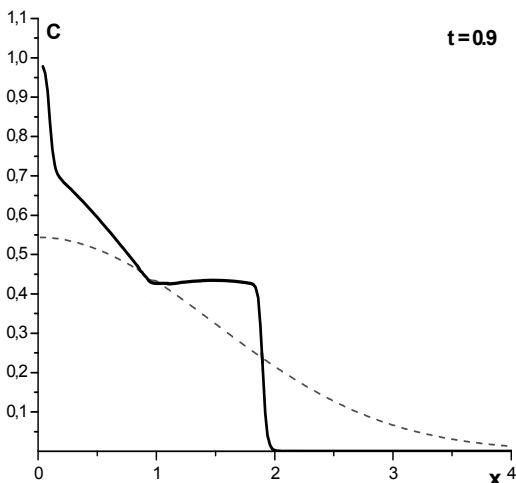


Рис. 3. Концентрационные профили при  $t = 0,9 \square_D$

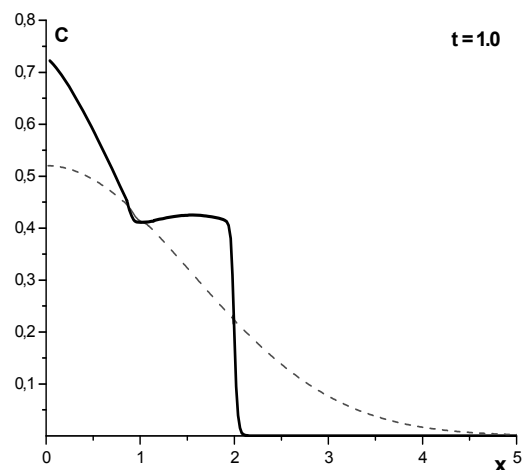


Рис. 4. Концентрационные профили при  $t = 1 \square_D$

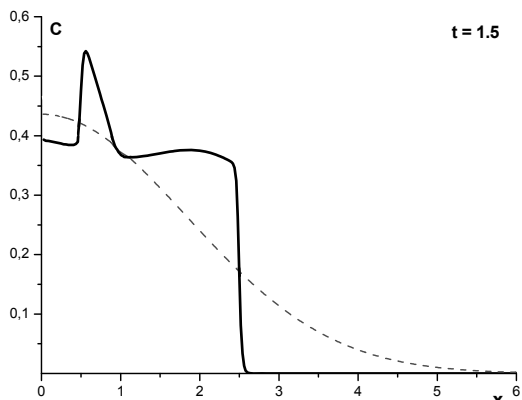


Рис. 5. Концентрационные профили при  $t = 1,5 \tau_D$

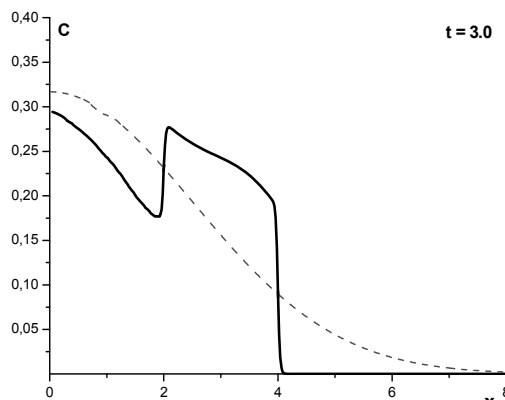


Рис. 6. Концентрационные профили при  $t = 3 \tau_D$

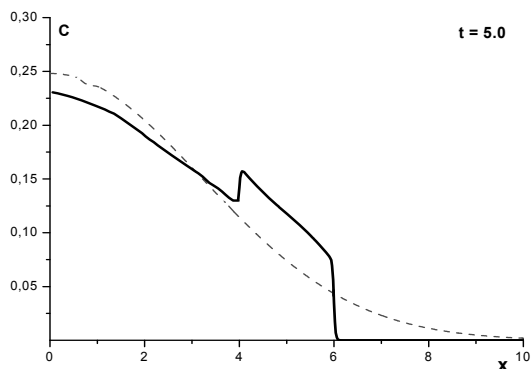


Рис. 7. Концентрационные профили при  $t = 5 \tau_D$

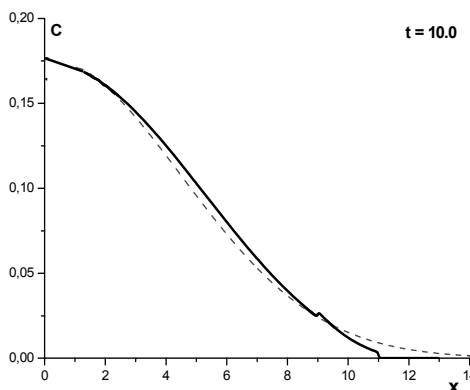


Рис. 8. Концентрационные профили при  $t = 10 \tau_D$

Рисунки 3–5 демонстрируют эффект отражения концентрационного возмущения от границы образца. На всех рисунках хорошо прослеживается фронт волны, распространяющийся с конечной скоростью. Эти особенности отчетливо выявляют волновые свойства уравнения (9). Как видно из рисунков, в приближении локального равновесия начальное примесное распределение практически сразу распространяется на весь объем, что соответствует бесконечной скорости распространения концентрационных возмущений, характерной для диффузионного уравнения. При  $t \sim 10 \tau_D$  оба распределения практически совпадают (рис. 8), что отражает установление в системе локального равновесия и переход к обычному диффузионному механизму массопереноса. Отметим также, что в локально-неравновесном состоянии, на временах  $t \leq \tau_D$ , в образце существует область

повышенной примесной концентрации (по сравнению с локально-равновесным состоянием), перемещающейся вглубь образца (рис. 1–7).

Несмотря на то, что представленная здесь модель касалась достаточно простой системы, она позволяет сделать некоторые предположения относительно реально протекающих процессов и, в частности, результатов эксперимента, проведенного в работе [6] по облучению металлических пленок. В ходе импульсного облучения поверхностный слой образца превращался в расплавленное состояние с последующим быстрым затвердеванием. Результирующее примесное распределение оказывалось подобным сплошным кривым на рисунках 2–4. Такие распределения могли формироваться в расплаве на стадии диффузионной релаксации. При резком остывании расплава процесс затвердевания мог проходить очень быстро,

со скоростью, превышающей скорость распространения диффузионных возмущений [15]. Если процесс затвердевания начинается в момент  $t \sim \tau_D$ , то сформированное в расплаве распределение примеси, типа представленных на рисунках 2–4, практически без искажений было бы захвачено в низкотемпературную твердую фазу [15]. Эти распределения и могли быть зафиксированы в эксперименте.

В заключение отметим, что в данной статье на примере достаточно простой модели были рассмотрены некоторые особенности массопереноса в локально-неравновесной системе, индуцированного высокоинтенсивным внешним воздействием, типа лазерного облучения или облучения потоками заряженных частиц. Было продемонстрировано, что на малых временах, порядка времени релаксации системы к локальному равновесию, преобладает волновой механизм переноса. Рассмотренная модель позволяет сделать и некоторые выводы относительно экспериментальных результатов. В частности, полученные в [6] концентрационные профили могли бы быть сформированы на малых временах, когда массоперенос осуществляется не за счет обычного диффузионного механизма, а преобладает волновой механизм переноса, возникающий при релаксации системы к состоянию локального равновесия.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Бойко В.И., Валяев А.Н., Погребняк А.Д. // УФН. 1999. Т. 169. С. 1243.
- [2] Блейхер Г.А., Кривококов В.П., Пащенко О.В. Теплообмен в твердом теле под действием ионных пучков заряженных частиц. Новосибирск: Наука, 1999. 176 с.
- [3] Диденко А.Н., Шаркеев Ю.П., Козлов Э.В., Рябчиков А.И. Эффекты дальнего действия в ионно-имплантированных металлических материалах. Томск: НТЛ, 2004. 328 с.
- [4] Мартыненко Ю.В. Эффекты дальнего действия при ионной имплантации // Итоги науки и техники. Сер. Пучки заряженных частиц и твердое тело. Т. 7. М.: Наука, 1993. 87 с.
- [5] Баянкин В.Я., Гусева М.И. и др. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2005. № 5. С. 77.
- [6] Кривококов В.П., Пащенко О.В., Сапульская Г.А. // ЖТФ. 1994. Т. 64. С. 37.
- [7] Pogrebnjak A.D. // Phys. Status Solidi. A. 1990. V. 117. P. 17.
- [8] Barbier D., Ghemisky G., Grob J. et al. // J. de Phys. 1983. V. 44. P. 209.
- [9] Bataglin G. et al. // Thin. Sol. Films. 1986. V. 145. P. 147.
- [10] Жоу Д., Касас-Баскес Х., Лебон Дж. Расширенная необратимая термодинамика // Регулярная и хаотическая динамика. Ижевск, 2007. 528 с.
- [11] Соболев С.Л. // УФН. 1997. Т. 167. С. 1095.
- [12] Joseph D., Preziosi L. // Rev. Mod. Phys. 1989. V. 61. P. 41.
- [13] Tang D.W., Araki N. // Heat and Mass Transf. 1996. V. 31. P. 359.
- [14] Lewandowska M. // Heat and Mass Transf. 2001. V. 37. P. 333.
- [15] Galenko P., Sobolev S. // Phys. Rev. E. 1997. V. 55. P. 343.
- [16] Galenko P., Jou D. // Phys. Rev. E. 2005. V. 71. P. 046125.
- [17] Галенко П.К., Херлах Д.М. // ЖЭТФ. 2006. Т. 130. С. 1.
- [18] Galenko P. // Phys. Rev. E. 2007. V. 76. P. 131606.
- [19] Крылов П.Н., Лебедева А.А. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2008. № 5. С. 67.
- [20] Афонькина Е.А., Вершинин Г.А., Геринг Г.И. // ФизХОМ. 2004. № 2. С. 5.
- [21] Buchbinder G.L. // Int. J. Heat Mass Transf. 2003. V. 46. P. 1665.
- [22] Грот С. де, Мазур П. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964. 456 с.
- [23] Полянин А.Д. Справочник по линейным уравнениям математической физики. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. 576 с.

## **ЦЕНТРЫ ПРОСКАЛЬЗЫВАНИЯ ФАЗЫ В СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ НАНОПРОВОЛОКЕ**

В данной статье представлен краткий обзор основных результатов, полученных авторами, исследования процесса проскальзывания фазы в сверхпроводящей нанопроволоке с током. Результаты получены путем численного интегрирования одномерного нестационарного уравнения Гинзбурга-Ландау. Проводится сравнение вольтамперных характеристик (ВАХ) однородной и неоднородной сверхпроводящей нанопроволоки. Исследуется регулярный и хаотический режим в резистивном состоянии.

*Ключевые слова:* сверхпроводимость, уравнения Гинзбурга-Ландау, критический ток, резистивное состояние, центры проскальзывания фазы.

Исследование квазиодномерных сверхпроводников ведется уже на протяжении нескольких десятков лет [1–4]. В последнее время встречается много экспериментальных и теоретических работ, посвященных исследованию сверхпроводящих нанопроволок. Но особое внимание в этих исследованиях всегда уделялось изучению процесса проскальзывания фазы [5–8].

В настоящее время весьма актуальной задачей является объяснение хода вольтамперных кривых сверхпроводящих нанопроволок при токах выше критического. Экспериментально известно, что при увеличении тока на всех ВАХ периодически происходят скачки напряжения (ступеньки) [9]. Причем некоторые из них сопровождаются изменением сопротивления, а некоторые нет. Феноменологические теории могли только объяснить поведение первого случая, когда сопротивление меняется, причем на некоторую кратную величину. Второй случай в рамках таких моделей не описывался.

Авторами настоящей статьи было проведено исследование однородных и неоднородных сверхпроводящих нанопроволок и показано, что однородность нанопроволоки играет ключевую роль для объяснения образования ступенек на ВАХ.

Также авторами были обнаружены области значений управляющих параметров, при которых реализуются регулярный и хаотический режимы образования центров проскальзывания фазы (ЦПФ). Подробно изучен процесс разрушения сверхпроводящего состояния в сверхпроводящей нанопроволоке с током.

Наши исследования основаны на результатах численного интегрирования одномерного нестационарного уравнения Гинзбурга-Ландау. В отличие от [2], мы вводим новый параметр  $u$  и определяем его как параметр, характеризующий «чистоту» сверхпроводящего материала.

Было обнаружено, что в случае длинной сверхпроводящей нанопроволоки с длиной, гораздо большей длины когерентности, и при  $u > 0.875$  («чистый» предел) существуют два значения критического тока  $j_{c1}$  и  $j_{c2}$ . При  $j < j_{c1}$  полный ток является только сверхпроводящим, а при  $j > j_{c2}$  нормальным. В области значений плотности тока  $j_{c1} < j < j_{c2}$  полный ток состоит из сверхпроводящей и нормальной компоненты, что приводит к появлению разности потенциалов на нанопроволоке. При  $u < 0.875$  («грязный» предел) существует только одно значение критического тока, равное критическому току теории Гинзбурга-Ландау.

Эволюцию параметра порядка в сверхпроводящей нанопроволоке можно описать нестационарным одномерным уравнением Гинзбурга-Ландау в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Psi + i\mu\Psi &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + \Psi - |\Psi|^2 \Psi, \\ j &= \text{Im} \left( \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right) - u \frac{\partial}{\partial x} \mu, \end{aligned} \quad (1)$$

где использованы следующие нормировки:

$$\begin{aligned} x &\rightarrow \frac{x}{\xi}, \quad \Psi \rightarrow \frac{\Delta}{\Delta_0}, \quad t \rightarrow \frac{t}{t_0}, \\ t_0 &= \frac{\pi\hbar}{8k(T_c - T)}, \quad \mu \rightarrow \frac{\mu}{\mu_0}, \\ \mu_0 &= \frac{8k(T_c - T)}{\pi}, \quad j \rightarrow \frac{j}{j_0}, \quad j_0 = \frac{eN\hbar}{2m\xi}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $\xi$  – длина когерентности,  $\Delta_0$  – равновесное значение энергетической щели,  $t_0$  – время релаксации параметра порядка,  $\mu$  – электрохимический потенциал,  $j$  – плотность полного тока,  $m$  – масса электрона,  $N$  – плотность электронов проводимости.

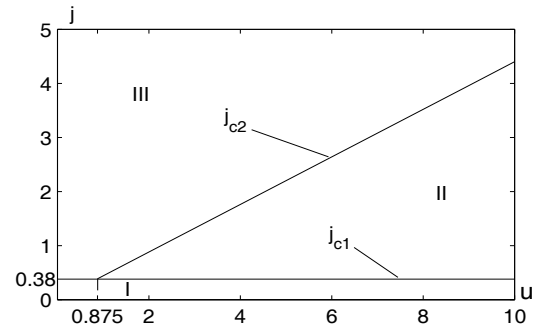
В уравнения (1) введен параметр  $u$ , который определяется следующим образом:

$$u = 0.46 \frac{1}{\xi_0} \left( 1 - \frac{T}{T_c} \right). \quad (3)$$

В такой записи уже вырисовывается физический смысл этого параметра. Особо четко приходит понимание при экстраполяции выражения (3) к нулю температур. В этом случае получаем, что  $u < 1$  ( $l \ll \xi_0$ ) соответствует «грязному»

сверхпроводнику, а  $u > 1$  ( $l \gg \xi_0$ ) соответствует «чистому» сверхпроводнику.

В ходе численного интегрирования системы уравнений (1) была обнаружена область значений параметров  $j$  и  $u$  (см. рис. 1), в которой функция модуля параметра порядка  $|\psi|$  имеет неоднородные нестационарные решения.



**Рис. 1.** Параметрическая диаграмма  $j$ - $u$ . I – область стационарного однородного распределения  $|\Psi| \neq 0$ , II – область нестационарного неоднородного распределения  $|\Psi|$  (резистивная область), III – область однородного стационарного распределения  $|\Psi| = 0$ ,  $j_{c1}$  и  $j_{c2}$  – критические значения управляющего параметра  $j$

Центр проскальзывания фазы вводится как локальная область сверхпроводника, в которой происходит подавление параметра порядка до нуля, в результате чего становится возможен скачок фазы волновой функции  $\psi$  на  $2\pi$ . В наших расчетах подобный характер поведения волновой функции непосредственно наблюдается на пространственно-временных распределениях модуля параметра порядка.

Численные расчеты показали, что с увеличением параметра  $j$  происходит рост числа ЦПФ в сверхпроводящей нанопроволоке. При достижении параметром  $j$  некоторого значения происходит «насыщение» сверхпроводящей нанопроволоки центрами проскальзывания фазы. После чего, при дальнейшем увеличении параметра  $j$ , начинается процесс разрушения сверхпроводящего состояния в нанопроволоке [10].

Можно ввести понятие плотности ЦПФ следующим образом:

$$\rho = \frac{n}{L}, \quad (4)$$

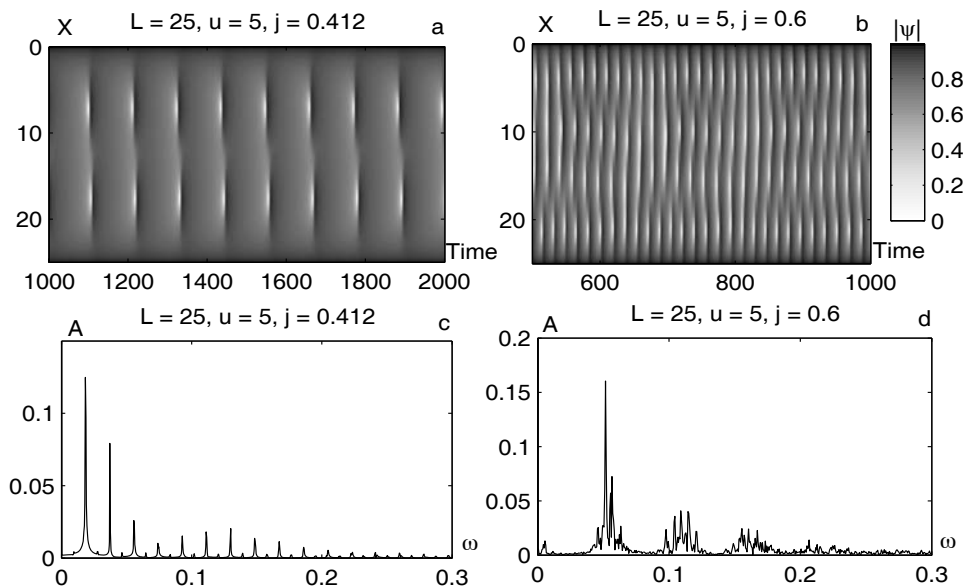
где  $n$  – число ЦПФ,  $L$  – длина сверхпроводящей нанопроволоки в единицах  $\xi$ . Оказалось, что при определенном значе-



нии параметра  $j$  плотность ЦПФ достигает своего критического значения  $\rho_c$ . Зная  $\rho_c$  (в нашем случае  $\sim 1/5$ ), можно определить характерный размер одиночного ЦПФ, который составил  $\sim 5\xi$ .

Для исследования регулярных и хаотических режимов в резистивной области совместно с пространственно-временными распределениями изучался характер спектра функции напряжения. На рисунке 2 представлены спектры напряжения и пространственно-временные распределения при определенных значениях параметра  $j$ . Численные расчеты показали, что при фиксированном значении параметра  $u = 5$  в области значений параметра  $j$  от 0.385 до 0.42 и от 0.5 до 0.535 наблюдается регулярный режим (см. рис. 2 а, с). В области значений от 0.42 до 0.5 и от 0.535 до значения, соответствующего критической плотности ЦПФ наблюдается хаотический режим (см. рис. 2 b, d).

Необходимо отметить, что регулярный и хаотический режимы мы определяем по характеру спектра функции напряжения. Если проанализировать пространственно-временные распределения, то можно увидеть, что в регулярной области возникает строгая периодическая структура одиночных ЦПФ. В хаотической области подобной одиночной периодичности не возникает, но проявляется периодичность некоторых пространственно-временных групп ЦПФ. Причем с увеличением параметра  $j$  эти группы видоизменяются. При дальнейшем увеличении параметра  $j$  (выше значения, соответствующего критической плотности ЦПФ) возникает обратный механизм уменьшения числа ЦПФ за счет разрушения сверхпроводящего состояния в нанопроволоке, что приводит к регуляризации спектра напряжения и пространственно-временных распределений.



**Рис. 2.** Пространственно-временные распределения  $|\psi|$  и соответствующие спектральные разложения функции напряжения  $V$   
 $L = 25, u = 5, j = 0.412$  – регулярная область (а, с),  $j = 0.6$  – область хаотического режима (b, d)

Разрушение сверхпроводящего состояния при симметричных граничных условиях ( $|\psi(0, t)| = |\psi(L, t)|$ ) происходит с середины нанопроволоки. Центральные ЦПФ, соединяясь вместе, образуют единую нормальную область, к которой при увеличении параметра  $j$  (т. е. плотности тока) присоединяются соседние ЦПФ. Это продолжается, пока вся нанопроволока не становится нормальной, при этом вольт-

амперная кривая выходит на омическую зависимость [11].

Для исследования влияния неоднородности на процессы, протекающие в сверхпроводящей нанопроволоке с током, удобно определить локальное тепловое возмущение. Его можно ввести, используя еще один параметр, входящий в уравнение Гинзбурга-Ландау, – температуру [12]. Первое уравнение в (1) можно записать в виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi + i\mu\psi = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + (1 - \Delta\tau)\psi - |\psi|^2 \psi, \quad (5)$$

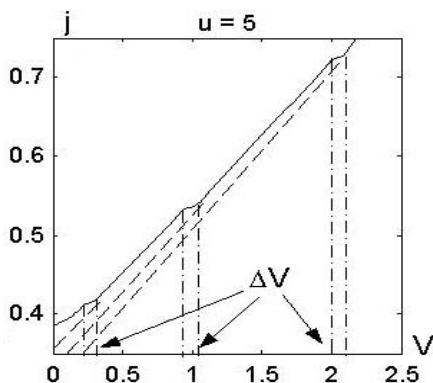
где

$$\Delta\tau \equiv \frac{\Delta T}{T_c - T_0} - \quad (6)$$

относительная величина локального теплового возмущения. В этом случае функция температуры имеет следующий вид (от времени не зависит):

$$T = \begin{cases} T_0, & x < a, x > b, \\ T_0 + \Delta T, & a < x < b. \end{cases} \quad (7)$$

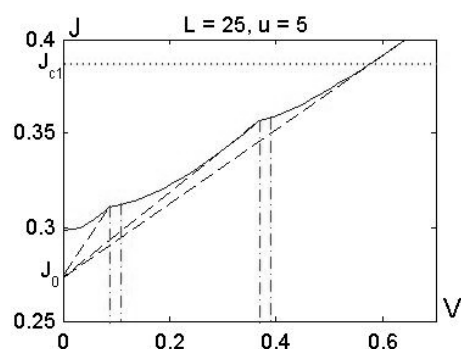
Численные расчеты показали, что изменения сопротивления при очередном скачке напряжения в однородных образцах не происходит (см. рис. 3). Анализ распределения сверхпроводящего тока по нанопроволоке и хода вольтамперных характеристик после каждого скачка напряжения позволяет нам описать это явление следующим образом.



**Рис. 3.** Вольтамперная характеристика вблизи критической плотности тока  $j_{c1}$  при значениях параметра  $u = 5$  (однородный образец). Штриховыми линиями показан ход ВАХ при появлении очередного ЦПФ. Штрихпунктирные линии отмечают точки напряжения до появления ЦПФ и после.  $\Delta V$  – величина скачка напряжения при увеличении числа ЦПФ на единицу

Обычно предполагалось, что появление нового ЦПФ приводит не только к появлению скачка напряжения, но и к прибавке некоторого кванта сопротивления  $R_0$  к сопротивлению нанопроволоки до скачка. Такая ситуация реализуется только в случае неоднородного сверхпроводника и начинается при плотностях тока ниже критического, когда постепенно включаются области с подавленным критическим значением плотности тока (см. рис. 4). В случае  $j > j_{c1}$  (однородный образец) такая ситуация не имеет места. Чис-

ленные расчеты показывают, что в областях между ЦПФ в нанопроволоке сохраняется сверхпроводящее состояние и сверхпроводящая плотность тока не превышает критического значения  $j_{c1}$ , а так как полная плотность тока  $j$  выше этого значения, то разность этих значений и определяет величину плотности тока  $j_n$ , переносимую нормальной компонентой. При этом в области самого ЦПФ сверхпроводящий ток является периодической функцией времени и изменяется от нуля до  $j_{c1}$ . Перейдем к математическому описанию этого процесса.



**Рис. 4.** Вольтамперная характеристика неоднородной сверхпроводящей нанопроволоки вблизи критической плотности тока  $j_{c1}$ . Длина нанопроволоки  $L = 25$ , параметр  $u = 5$ , ширина областей неоднородности  $\Delta L = 1$ . Величины неоднородных областей  $\Delta\tau = 0.6, 0.45, 0.7$

Разложим напряжение на нанопроволоке на две компоненты

$$V = V_1 + V_2, \quad (8)$$

где  $V_1$  – напряжение, даваемое от участков между ЦПФ,  $V_2$  – падение напряжения на всех ЦПФ. Используя вышеизложенные рассуждения, можно записать

$$\bar{V} = \rho L(j - j_{c1}) + \rho \delta L j_{c1} (1 - \eta). \quad (9)$$

Здесь предполагается, что среднее значение плотности сверхпроводящего тока

$$\langle j_s \rangle = \eta j_{c1}, \quad (10)$$

где  $0 < \eta < 1$  (в феноменологической теории предполагают  $\eta \sim 0.5$ ).  $\delta L$  является ступенчатой функцией плотности полного тока, так как она пропорциональна числу ЦПФ в нанопроволоке. Следовательно, второе слагаемое в (9) не зависит от  $j$  (кроме особых точек, связанных с появлением ново-

го ЦПФ). Тогда вся зависимость от полного тока лежит в первом слагаемом, которое пропорционально ему. Если взять производную по току, то мы получим дифференциальное сопротивление, равное полному сопротивлению нанопроволоки в нормальном состоянии. Но так как с увеличением тока при новом появлении ЦПФ будет происходить добавка в среднее напряжение от второго слагаемого в (9), то на ВАХ при этих значениях плотности полного тока будет наблюдаться скачок по напряжению (см. рис. 3).

Рассмотрим, как меняется картина в неоднородном случае. Если предположить случайный разброс тепловых неоднородностей по нанопроволоке и учесть, что параметры этих неоднородностей отличаются в широком пределе, то увеличение тока будет постепенно «включать» все неоднородные области, а это будет сопровождаться скачками напряжения на ВАХ (см. рис. 4). Но при этом будут также наблюдаться и скачки сопротивления после «включения» новой неоднородности. Под «включением» мы понимаем возбуждение процесса проскальзывания фазы. Но этот процесс происходит при токах ниже критического, т. е. когда нет собственных ЦПФ. Подобный характер поведения тепловых неоднородностей хорошо согласуется с прежними феноменологическими представлениями о резистивном состоянии, но не имеет никакого отношения к резистивному состоянию в однородной сверхпроводящей нанопроволоке (см. рис. 3).

В заключение хотелось бы отметить, что хотя представленные результаты и углубляют наше понимание процесса проскальзывания фазы, но существует еще много вопросов, которые в ближайшее время будут привлекать к этой области сверхпроводимости как экспериментаторов, так и теоретиков. В частности, обращает на себя внимание следующее обстоятельство. Уравнения Гинзбурга-Ландау, используемые для описания процесса проскальзывания фазы, являются одномерными. Однако известно, что в строго одномерной системе сверхпроводимость отсутствует [13; 14]. В этой связи мы вынуждены ссылаться на то, что используемые одномерные уравнения Гинзбурга-Ландау относятся к квазиодномерной системе. Это противоречие может быть снято только постановкой микроскопической задачи, в которой есть геометриче-

ское ограничение в двух направлениях и явно учитываются поверхностные состояния. Безусловно, решение этой задачи связано с выяснением фундаментальной роли связанных состояний в сверхпроводимости.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Галайко В.П.* Критические токи для резистивных состояний в сверхпроводящих каналах // ЖЭТФ. 1974. Т. 66. № 1. С. 379–390.
- [2] *Ивлев Б.И., Копнин Н.Б.* Теория токовых состояний в узких сверхпроводящих каналах // УФН. 1984. Т. 142. № 3. С. 435–471.
- [3] *Kramer L., Watts-Tobin R.J.* Theory of dissipative current-carrying state in superconducting filaments // Physical Review Letters. 1978. V. 40. № 15. P. 1041–1044.
- [4] *Vodolazov D.Y., Peeters F.M., Piraux L., Matefi-Tempfi S. and Michotte S.* Current-voltage characteristics of quasi-one-dimensional superconductors: an S-shaped curve in the constant voltage regime // Physical Review Letters. 2003. V. 91. № 15. P. 7001 (4).
- [5] *Акопян Р.Б., Геворгян С.Г.* О наблюдении центров проскальзывания фазы в ВТСП-мостиках // Письма в ЖЭТФ. 1990. Т. 52. № 12. С. 1255–1258.
- [6] *Lau C. N., Marcovic N., Bockrath N., Bezryadin A. and Tinkham M.* Quantum phase slips in superconducting nanowires // Physical Review Letters. 2001. V. 87. № 21. P. 7003(3).
- [7] *Sivakov A.G., Glukhov A.M., Omelyanchouk A.N., Koval Y., Muller P. and Ustinov A.V.* Josephson behavior of phase-slip lines in wide superconducting stripe // Physical Review Letters. 2003. V. 91. № 26. P. 7001(3).
- [8] *Altomare F., Chang A.M., Melloch M.R., Hong Y. and Tu C.W.* Evidence for macroscopic quantum tunneling of phase slips in long one-dimensional superconducting Al wires // Physical Review Letters. 2006. V. 97. № 1. P. 7001(4).
- [9] *Kuznetsov V.I., Tulin V.A.* Synchronization of high-frequency oscillation of phase-slip centers in a tin whisker under microwave radiation // arXiv:cond-mat/0407464. 2004.
- [10] *Nikolaev S.V., Yugay K.N., Kim J.U. and Huh Y.* Dynamical phase slipping in superconducting nanowires // Journal of superconductivity: incorporating novel magnetism. 2005. V. 18. № 2. P. 261–268.
- [11] *Николаев С.В., Югай К.Н.* Динамические свойства сверхпроводящей нанопроволоки // ЖЭТФ. 2006. Т. 129. № 2. С. 371–377.
- [12] *Николаев С.В., Югай К.Н.* Динамика фазового перехода в сверхпроводящей нанопроволоке // Вестник НГУ. Серия: Физика. 2007. Т. 2. № 1. С. 104–107.
- [13] *Rice T.M.* Superconductivity in one and two dimensions // Physical Review. 1965. V. 140. № 6A. P. A1889–A1891.
- [14] *Ferrell R.A.* Possibility of one-dimensional superconductivity // Physical Review Letters. 1964. V. 13. № 10. P. 330–332.

## **НЕКОТОРЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ НАНОЧАСТИЦ**

В данной статье кратко рассматриваются некоторые проблемы физики наночастиц, а также методы их теоретического и численного исследования.

*Ключевые слова:* нанокластер, физика наночастиц, локальная плотность состояний, методы исследования свойств наночастиц, проблемы нанопизики.

### **1. Введение**

В настоящее время нанотехнологии являются, пожалуй, одним из самых приоритетных направлений исследований. И это неудивительно. К XXI столетию человечество достигло вершины технологического развития в области микроэлектроники, однако растущие потребности индустриального общества требуют дальнейшего усовершенствования приборов и материалов, вплоть до создания веществ с принципиально новыми свойствами, что требует от науки принципиально новых решений.

Решением подобной научно-технологической проблемы XX в. явилось создание полупроводникового транзистора, что ознаменовало собой бурное развитие микроэлектронных технологий и создание ЭВМ. Это позволило значительно увеличить скорость обработки информации и сделало возможным численное решение множества научных задач, не имеющих точного аналитического решения. Сегодня объём обрабатываемой информации, необходимый для решения фундаментальных и прикладных задач, настолько велик, что расчёты на лучших современных вычислительных машинах могут занимать достаточно продолжительное время.

Решением указанной проблемы может являться, например, одноэлектронный транзистор – прибор, с помощью которого можно управлять движением одного электрона. Простейшей реализацией одноэлектронного транзистора является двухпереходная система из трёх квантовых точек [1–3]. Однако, несмотря на множество исследований (как экспериментальных, так и теоретических), реализация одноэлектронных приборов сталкивается с рядом проблем. Само изобретение одноэлектронного транзистора не является достижением технологий XXI в.: теория одноэлектронного туннелирования была впервые представлена К.К. Лихаревым в 1987 г. [4; 5] Тогда же К.К. Лихаревым и Л.С. Кузьминым впервые при гелиевых температурах непосредственно наблюдалось коррелированное туннелирование отдельных электронов в двухпереходной системе с металлической гранулой [6]. Проблема функционирования одноэлектронных приборов при сверхнизких температурах не решена до сих пор (единственной реализацией таких приборов при комнатной температуре на сегодняшний день являются

приборы, реализованные с помощью сканирующего туннельного микроскопа [3]). Другой проблемой нанозлектроники является выбор материалов для реализации одноэлектронных приборов, связанный с устойчивостью как самих образуемых структур, так и их параметров [3].

## 2. Особенности описания свойств наночастиц

Перечисленные выше и другие трудности нанозлектронной техники, ставшей на сегодняшний день технологической необходимостью, связаны с резким изменением свойств материалов при уменьшении их размеров до нанометрового масштаба. Изучение свойств низкоразмерных систем сегодня связано с использованием множества различных методов, в частности, туннельной и сканирующей микроскопии, рентгеновских и оптических методов с использованием синхротронного излучения, оптической лазерной спектроскопии, радиочастотной спектроскопии, мёссбауэровской спектроскопии и т. д. Синтезирование различного рода наноразмерных систем сегодня также является вполне осуществимым [7–9]. Однако до сих пор не существует единого подхода к описанию малоразмерных систем и их свойств. Это связано, в частности, с тем, что уменьшение размера частицы даже до сотен нанометров приводит к тому, что пренебречь индивидуальностью каждого атома в ней, строго говоря, нельзя.

Так как наноструктуры обнаруживают существенно иные свойства, чем объёмный материал, то их электронные состояния значительно отличаются от электронных состояний объёмного материала. Это связано с эффектами квантования, вызываемыми пространственным ограничением. С другой стороны, электронная структура ответственна за такие свойства материала, как электронная проводимость, оптическое поглощение, химическая реакционная способность, и механические характеристики. Поэтому наноструктуры выглядят как частицы с иными физическими свойствами [10].

Для рассмотрения свойств нанообъектов целесообразны два подхода: микроскопический и термодинамический [11].

При *микроскопическом* подходе возможен переход от единичных атомов и молекул, обладающих единичными атомными и молекулярными уровнями, к мас-

сивным телам, для которых применимы все приближения твёрдого тела и переход от макроскопических объектов к нанокластерам и наноструктурам за счёт дробления или наноструктурирования вещества. Использование молекулярных свойств влечёт за собой применение методов квантовой химии, позволяющей проводить расчёты атомных и молекулярных орбиталей, характеризовать структуру молекулярных уровней в нанокластерах и тем самым определять их многие тепловые, электронные, оптические, магнитные и другие свойства.

*Термодинамический* подход состоит в рассмотрении перехода от зонной структуры массивного тела к группам или отдельным атомно-молекулярным уровням при его измельчении или наноконструировании.

И при молекулярном, и при твёрдом подходе выделяются две основные характеристические черты нанокластеров, отличающие их как от атомов, так и от массивных твёрдых тел, – это *наличие поверхности* и *квантовые ограничения* коллективных процессов, связанных с фононами, электронами, плазмонами, магнонами и т. д.

Появление реальной поверхности для кластера не имеет чёткой границы, зависит от применяемого метода и соответствует минимальному размеру кластера около 1 нм. Максимальный размер нанокластера или наночастицы, при котором с помощью современных методов различимо влияние поверхности на их свойства, составляет около 100 нм. Для наблюдения квантовых ограничений минимальный размер не лимитирован, а максимальный связан с длиной волны носителей и также должен быть менее 100 нм.

*Термодинамический* подход к свойствам нанокластеров позволяет определить закономерности их образования, роста, свойств и их изменений в процессе фазовых переходов [11].

В [11] рассмотрены семь типов кластерных моделей для описания свойств нанокластеров: микроскопическая модель внутрикластерной атомной динамики, термодинамическая модель кластера, квантово-статистическая модель, компьютерная, фрактальная, оболочечная и структурная модели кластеров. К сожалению, ни одна из них не является универ-

сальной. С другой стороны, строгий учёт каждого атома в исследуемой системе (например, с помощью расчётов из первых принципов) приводит к тому, что время, необходимое для расчёта такой задачи, растёт экспоненциально с увеличением числа учитываемых атомов такой системы. Таким образом, налицо проблема теоретического моделирования наноразмерных систем с заданными физическими свойствами.

### **3. Численное моделирование свойств наночастиц**

Если обозначить основные численные методы для многочастичных систем, то они сводятся к следующим: квантово-теоретические расчёты из первых принципов (*ab initio*), метод Монте-Карло, молекулярная механика и метод молекулярной динамики [12].

Поскольку решить уравнение Шрёдингера для системы многих частиц невозможно (при увеличении числа частиц необходимо время расчёта растёт экспоненциально), квантово-теоретический подход состоит в нахождении приближений и возможностей разделения переменных, позволяющих упростить схему вычислений. Из наиболее распространённых методов расчёта из первых принципов можно назвать методы самосогласованного поля, линейной комбинации атомных орбиталей и функционала плотности [13].

В отличие от методов расчёта из первых принципов, методы молекулярной механики и молекулярной динамики основаны на классической механике. Частицы рассматриваются как материальные точки, взаимодействующие через силовые поля, которые, в свою очередь, определяются потенциалами взаимодействия. Целью молекулярной механики (как и расчётов из первых принципов) является нахождение устойчивых конфигураций для систем многих частиц, т. е. определение седловых точек (локальных минимумов) на поверхности потенциальной энергии. В то время как в квантово-механических расчётах понятие химических связей априори отсутствует, методы молекулярной механики используют подход традиционной органической химии, при котором молекулы изображаются как набор шариков и стержней, при этом каждый шарик обозначает атом, а каждый стержень – связь между ними. В зависимости от вида

связей выбираются потенциалы взаимодействия, а, следовательно, также энергии и параметры, соответствующие определённым локальным конфигурациям атомов. При таком подходе молекулярная механика трактует потенциальную энергию как сумму членов, описывающих растяжение, изгиб и кручение связей, а также, в случае ван-дер-ваальсова взаимодействия, перекрытие и электростатическое взаимодействие между несвязанными атомами. Однако методы молекулярной механики могут успешно применяться лишь для сравнительно узкого класса молекулярных структур в конфигурациях, не слишком далёких от равновесия [14].

Аналогично обстоит дело и с расчётами методом молекулярной динамики. Однако, в отличие от метода Монте-Карло, где новые конфигурации частиц формируются шаг за шагом случайным образом, молекулярная динамика занимается решением ньютоновских уравнений движения. Поэтому может быть рассчитана эволюция системы многих частиц в течение определённого числа временных шагов, причём на каждом шаге доступна полная информация о системе (положения частиц, скорости, кинетическая и потенциальная энергия и т. п.). Все остальные характеристики системы (например, температура) могут быть определены без использования каких-либо дополнительных параметров.

Иначе обстоит дело в случае метода Монте-Карло. Здесь генерируются варианты конфигурации системы, образующие статистический ансамбль, описываемый распределением Больцмана с температурой в качестве внешнего параметра. Поэтому подобные расчёты применимы лишь к конфигурациям, близким к равновесным. Дополнительные проблемы возникают при попытках проследить временные шаги к иным конфигурациям [15].

Каждый из представленных методов расчёта имеет свои преимущества и ограничения. Результаты вычислений должны как можно ближе отражать реальность. Расчёты из первых принципов без дополнительных априорных предположений относительно потенциалов взаимодействия учитывают в зависимости от степени упрощения, используемого дан-

ным методом, различные квантовые эффекты. Однако из-за огромных вычислительных трудностей возможно рассмотрение лишь систем, содержащих не более чем несколько сотен атомов. Тем не менее, такие методы революционизировали химию, позволив, в числе других приложений, производить компьютерный расчёт молекул.

Методы молекулярной механики и молекулярной динамики основаны на классической физике систем многих частиц и не могут описывать квантовые эффекты. Более того, эти методы для получения численных результатов требуют детального знания взаимодействия между частицами, так что в каждом отдельном случае приходится использовать разные модели. Квантовая механика вводится здесь неявным образом, через использование потенциалов взаимодействия, получаемых, например, путем расчёта из первых принципов. Для получения реалистических результатов в большинстве случаев необходима дополнительная подгонка таких потенциалов к экспериментальным данным.

Однако точность и адекватность потенциалов взаимодействия, используемых в молекулярной механике и молекулярной динамике, ограничивают применимость этих методов. С другой стороны, они позволяют рассматривать большие системы, содержащие в зависимости от проводимого исследования  $10^5$ – $10^7$  атомов.

Самые современные коммерческие программы в области молекулярной механики используют библиотеки феноменологических потенциалов для описания взаимодействий различного типа, встречающихся в органической химии. Это позволяет изучать конфигурации с минимальной энергией, жёсткость и другие свойства наноструктур, построенных из атомов углерода, соединённых сильными направленными ковалентными связями, которые, в свою очередь, соединяются с другими элементами.

#### 4. Зависимость свойств наночастиц от числа атомов

Несмотря на перечисленные трудности, результаты многолетних исследований низкоразмерных систем [11; 12; 16] позволяют выделить некоторые их общие свойства, такие как магические числа, изменение геометрической структуры по

сравнению с объёмным материалом и другие. Но, пожалуй, одним из самых захватывающих свойств наночастиц является скачкообразное изменение их физических параметров при непрерывном изменении числа составляющих их атомов. Однако, несмотря на это обстоятельство, данный вопрос не получил достаточно широкого освещения в научной литературе [17–22]. В связи с этим установление зависимости свойств наночастиц от числа атомов представляется весьма актуальным. Например, в работе [17] в приближении модели сильной связи с гамильтонианом

$$H = \sum_{i=1}^n E_i c_i^+ c_i + \sum_{j>i}^n \sum_{i=1}^n (V_{ji} c_j^+ c_i + V_{ij} c_i^+ c_j), \quad (1)$$

(где  $E_i$  – энергия  $s$ -состояния электрона на  $i$ -том узле кубической решётки,  $c_i^+$ ,  $c_i$  – операторы рождения и уничтожения электрона на  $i$ -том узле соответственно,  $V_{ij}$  – энергия перескока электрона с узла  $i$  на узел  $j$ ) показано, что в металлических наночастицах сдвиг энергии ионизации для поверхностных атомов относительно атомов в объёме приводит к образованию поверхностной зоны состояний. Кроме этого, авторами с помощью простой модели сильной связи показано, что в структуре электронной плотности состояний в данном случае образуются две перекрывающиеся структуры, соответствующие поверхностной и объёмной зонам состояний. Для очень маленьких частиц этот эффект проявляется в уширении линий ЯМР-спектра, определяемом сдвигом Найта. Сравнение полученных результатов с экспериментальным определением сдвига Найта для алюминиевых наночастиц показало, что с помощью выделения поверхностных состояний можно объяснить изменение закона подобия в зависимости от размера наночастиц и температуры.

В работе [18] авторами в спектрах неупругого рассеяния медленных ионов, взаимодействующих с нанокластерами  $d$ -металлов, обнаружена асимметрия линий, объяснить которую удалось в рамках механизма возбуждения  $e$ - $h$ -пар малых энергий и больших импульсов («инфракрасная катастрофа»). В результате исследования асимметрии в спектрах рент-

геновской фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии рассеяния медленных ионов авторами [18] установлено, что индексы сингулярности Андерсона  $\alpha$ , обусловленные электронными состояниями на поверхности и в объёме, проявляют различный характер поведения в зависимости от размера нанокластеров.

В работе [19] с помощью фотоионизационной спектроскопии получены ионизационные потенциалы кластеров  $Al_n$  и  $In_n$  ( $n < 80$ ). Полученные авторами экспериментальные результаты показали, что если число частиц в кластере меньше 5, то энергия ионизации возрастает линейно и соответствует классической модели металлической сферы. При больших  $n$  данная зависимость соответствует предсказаниям оболочечной модели.

В работах [20–22] по исследованию локальной плотности состояний (ЛПС) квадратных нанокластеров алюминия авторами, как и в работе [17], использовано приближение сильной связи, однако гамильтониан учитывает также и влияние ионов решётки на энергию электрона и имеет вид:

$$H = \sum_{l=1}^n E_l c_l^+ c_l + t \sum_{j>l} \sum_{l=1}^n (c_j^+ c_l + c_l^+ c_j), \quad (2)$$

где  $E_l = \varepsilon_l(k) + \Delta\varepsilon_l$ ,  $\Delta\varepsilon_l = \sum_j V_{l,j} \langle n_j \rangle$ ,  $V_{l,j}$  – потенциал учитывает влияние соседних атомов на энергию электрона,  $n_l = c_l^+ c_l$ ,  $t \equiv t_{ij} = t_{ji}$  – энергия перескока между соседними узлами решётки  $l$  и  $j$ .

В работах рассмотрено два случая:

- 1)  $t = 0.0$  эВ, что соответствует случаю, когда электрон локализован на узле;
- 2)  $t = 0.9$  эВ, что соответствует металлическому состоянию объёмного образца.

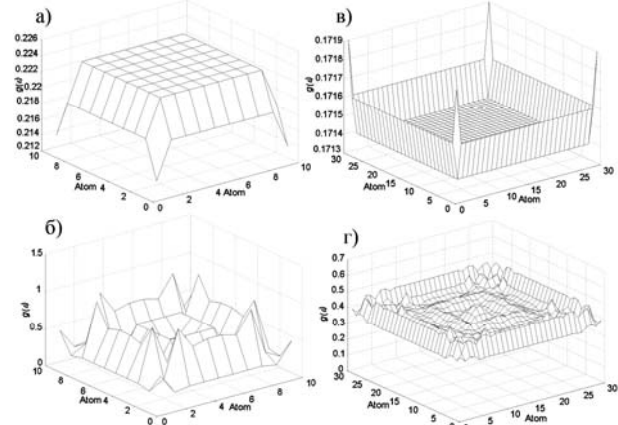
Для учёта индивидуальности каждого атома, связанной с его положением в кластере, в работе [20] предложена следующая терминология: *поверхностными* названы крайние атомы квадрата, остальные атомы названы *объёмными* (Bulk). Кроме того, среди поверхностных атомов выделены отдельно *вершинные* (Vertex) и *рёберные* (Edge) атомы. При этом энергия связи электрона с атомом каждой группы будет различной, что обусловлено разным числом ближайших соседей атомов, расположенных на вершине, ребре или в объёме кластера: два, три и четыре соседа соответственно:

$$\begin{aligned} E_{vertex} &= E_0 - E_{bond}(z = 2) \\ E_{edge} &= E_0 - E_{bond}(z = 3), \\ E_{bulk} &= E_0 - E_{bond}(z = 4) \end{aligned} \quad (3)$$

где  $E_{vertex}$  – энергия связи электрона с кластером относительно атома вершины,  $E_{edge}$  – энергия связи электрона с кластером относительно атома ребра,  $E_{bulk}$  – энергия связи электрона с кластером относительно атома в объёме,  $E_0$  – энергия ионизации атома,  $E_{bond}$  – энергия связи электрона с атомом, которая зависит от числа частиц в кластере и описывается формулой:

$$E_{bond} = \frac{(n-1)(n+z)}{n^2} \xi E_i, \quad (5)$$

где  $\xi = \frac{E_0 - A}{A}$ ,  $E_i$  – значения энергии ионизации кластера,  $A$  – работа выхода.



**Рис. 1.** Зависимость  $g(\varepsilon)$  при  $N = 10$  (а, б) и  $N = 30$  (в, г),  $t = 0.0$  эВ (а, в),  $t = 0.9$  эВ (б, г),  $\varepsilon = 4.185$  эВ для кластеров алюминия

С помощью метода расчёта ЛПС, предложенного в работе [17], авторами [20–22] показано, что с изменением числа атомов в кластере его ЛПС существенно изменяется. Кроме того, показано, что ЛПС также зависит от местоположения атома в кластере, а значит, и от его геометрической структуры. Согласно расчётам для квадратных кластеров алюминия размером  $N \times N$  атомов ( $N = 3 \div 30$ ) ЛПС  $g(\varepsilon)$  зависит от общего числа атомов и положения атома в кластере. Так, на рисунке 1 приведена поверхность ЛПС для  $N = 10$  и  $N = 30$  при одной и той же энергии электрона  $\varepsilon = 4.185$  эВ, но разной энергии

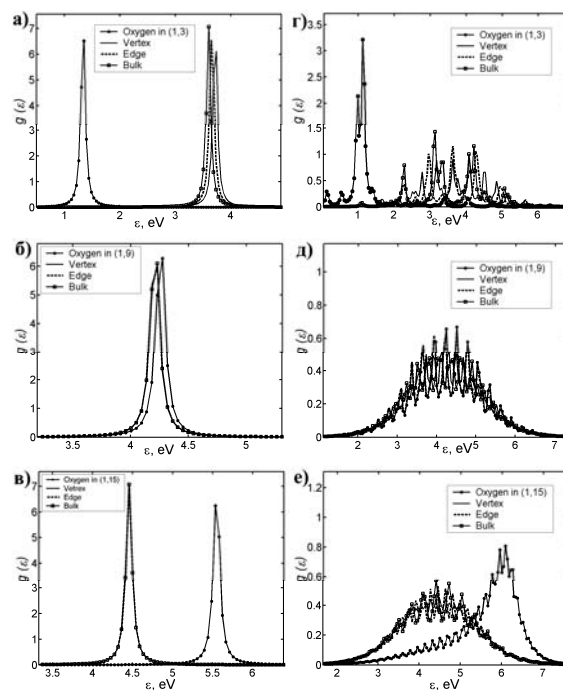


перескока  $t$ :  $t = 0.0$  эВ (рис. 1 а, в) и  $t = 0.9$  эВ (рис. 1 б, г), откуда видно, что при  $t = 0.0$  эВ можно чётко выделить вершинные, рёберные и объёмные атомы. Это связано с тем, что на ЛПС в каждом узле существенное влияние оказывают только ближайшие соседи, а так как их число зависит от того, к какой группе атомов относится выбранный узел, то и значения ЛПС в кластере становятся чётко выделенными (см. рис. 1 а, в).

Когда энергия перескока отлична от нуля ( $t = 0.9$  эВ), на ЛПС в узле начинают влиять также и атомы следующих слоёв, поэтому поверхность ЛПС становится более сложной (см. рис. 1 б, г). Отметим, что во всех случаях ЛПС зависит от того, в какой части кластера находится выбранный атом и сколько атомов содержит кластер. Например, при  $t = 0.0$  эВ для  $N = 10$  для атома вершины наблюдается минимум (см. рис. 1 а), а для  $N = 30$  для этого же атома – максимум (см. рис. 1 в). Такая же ситуация и при  $t = 0.9$  эВ, только уже для центрального объёмного атома. Однако при  $t = 0.9$  эВ зависимость ЛПС на краю кластера для  $N = 10$  и для  $N = 30$  имеет одинаковый вид (см. рис. 1 б, г).

Такое поведение ЛПС в зависимости от числа атомов в системе, конечно же, не может не сказываться на свойствах системы.

В работе [21] авторами исследовано влияние замены одного из атомов кластера атомом примеси и показано, что соответствующая ЛПС существенно изменяет своё значение. Так, расчёты показали, что при  $t = 0.0$  эВ всегда наблюдается только один максимум ЛПС для каждого  $N$  как для атома примеси, так и для атомов алюминия, что говорит о локализации электрона в этом состоянии. При  $t = 0.9$  эВ всегда наблюдается множество различных по величине максимумов (см. рис. 2 г, д, е), интенсивность которых уменьшается по обе стороны от максимального из них. При этом с увеличением числа частиц в кластере максимумы становятся менее выраженными, а их интенсивность заметно уменьшается. Отметим, что положение максимума ЛПС на атоме кислорода в обоих случаях зависит от числа частиц в кластере: при  $N < 16$  он находится при меньшей, а при  $N > 16$  – при большей энергии относительно максимумов на атомах алюминия (см. рис.2).



**Рис. 2.** Зависимость  $g(\epsilon)$  при  $N = 6$  (а, г),  $N = 17$  (б, д) и  $N = 29$  (в, е):  $t = 0.0$  эВ (а–в);  $t = 0.9$  эВ (г–е); атом кислорода находится в центре ребра

Таким образом, замена одного атома алюминия на атом кислорода приводит к изменению ЛПС нанокластера алюминия, но не изменяет её поведения в целом: как в зависимости от энергии, так и в зависимости от числа частиц.

Таким образом, в работах [20–22] на простой модели продемонстрирована степень влияния числа и рода атомов в нанокластере на его ЛПС.

### 5. Заключение

Несмотря на то, что в последние годы в науке и технике произошли качественные изменения, основанные на возможности измерять, манипулировать и организовывать материю на новом уровне, в настоящее время нанотехнологии находятся в самом начале пути, и лишь отдельные простейшие наноструктуры могут создаваться контролируемым образом. Однако с развитием технических средств и нанотехнологий появляются новые возможности синтеза наноструктур. В частности, уже сегодня возможно получение собственно наночастиц и нанокластеров как на подложках, так и в свободном состоянии, а также получение всё более и более тонких плёнок толщиной до нескольких монослоёв. Кроме того, стано-

вится возможным получать нанокластеры заданных размеров и формы, а также исследовать транспортные и механические свойства отдельных наночастиц и молекул. Не стоит на месте и развитие теоретических и численных методов исследования и моделирования низкоразмерных систем и их свойств. Всё это делает возможным создание принципиально новых приборов, работающих на квантовых принципах и управляющих движением счётного числа носителей заряда. Технологическая революция, знаменуемая созданием одноэлектронных транзисторов при комнатной температуре и последующим их объединением в вычислительные схемы, приведёт к созданию квантового компьютера, что, несомненно, обеспечит научный прорыв во многих областях естественнонаучного знания.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Пул Ч., Оуэнс Ф. Нанотехнологии. М., 2005. 336 с.
- [2] Goldhaber-Gordon D., Montemero M.S., Love J.C., Opiteck G.J., Ellenbogen J.C. Overview of Nanoelectronic Devices. Proc. IEEE, 1997.
- [3] Погосов В.В. Введение в физику зарядовых и размерных эффектов. М., 2006. 328 с.
- [4] Лихарев К.К. О возможности создания аналоговых и цифровых интегральных схем на основе дискретного одноэлектронного туннелирования // Микроэлектроника. 1987. Т. 16. С. 195–209.
- [5] Likharev K.K. Correlated discrete transfer of single electrons in ultrasmall tunnel junctions // IBM J. Res. Develop. 1988. № 1. P. 144–158.
- [6] Кузьмин Л.С., Лихарев К.К. Непосредственное экспериментальное наблюдение дискретного коррелированного одноэлектронного туннелирования // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 45. С. 389–390.
- [7] Jia J.-F., Liu X., Wang J.-Z. et al. Fabrication and structural analysis of Al, Ga, and In nanocluster crystals // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. P. 165412.
- [8] White A.E., Dynes R.C., Gamo J.P. Corrections to the One-Dimensional Density of States: Observation of a Coulomb Gap? // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 532.
- [9] Райх М.Э., Эфрос А.Л. Плотность состояний в окрестности уровня Ферми в одномерной системе с локализованными электронами // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 45. Вып. 5. С. 225–227.
- [10] Physics and Chemistry of Small Clusters, NATO ASI / eds. P. Jena, B. K. Rao, S.N. Khanna. Ser. B: Phys. N.Y.: Plenum Press, 1987. V. 158.
- [11] Суздаев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М., 2006. 592 с.
- [12] Pum M. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета. М.; Ижевск, 2005. 160 с.
- [13] Sauer J. Chemie aus dem Computer // Spectrum der Wissenschaft – Digest: Moderne Chemie II, 2000.
- [14] Drexler K.E. Nanosystems: Molecular Machinery Manufacturing and Computation. John Wiley, 1992.
- [15] Molecular-Dynamics Simulation of Statistical-Mechanical Systems / eds. G. Ciccotti, W.G. Hoover; International School of Physics “Enrico Fermi” (Varenna, Italy, 1985) Amsterdam: North-Holland Physics Publishing, 1986.
- [16] Петинев В.И., Петрунин В.Ф., Морохов И.Д., Трусев Л.П. Структура и свойства малых металлических частиц // УФН. 1981. Т. 133. С. 653–692.
- [17] Gascon J.A., Pastawski H.M. Surface effects on the statistics of the local density of states in metallic nanoparticles: manifestation on the NMR spectra // Modern Physics Letters B. 2005. V. 19. P. 1285.
- [18] Борман В.Д., Лебидько В.В., Пушкин М.А. и др. Сингулярность в спектре рассеяния медленных ионов на нанокластерах металлов // Письма в ЖЭТФ. 2004. Т. 80. С. 633–638.
- [19] Schriver K.E., Persson J.L., Honea E.C., Whetten R.L. Electronic shell structure of Group-IIIa metal atomic clusters // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. P. 2539.
- [20] Тиховская Н.В., Югай К.Н. Плотность состояний двумерных нанокластеров алюминия в модели Хаббарда // ФТТ. 2008. Т. 50. С. 726–733.
- [21] Их же. Влияние примеси кислорода на плотность состояний нанокластера алюминия // Вестник Омского университета. 2008. № 1. С. 26–33.
- [22] Их же. Влияние числа частиц на плотность состояний нанокластера алюминия // Вестник Новосибирского госуниверситета. 2008. Т. 3. Вып. 2. С. 88–94.

## **ЗАМКНУТЫЕ ВИХРИ АБРИКОСОВА В СВЕРХПРОВОДНИКАХ ВТОРОГО РОДА**

В настоящей работе исследуются статические и динамические свойства замкнутого вихря Абрикосова. Рассматривается взаимодействие замкнутых вихрей с линейными вихрями. Исследуется состояние сверхпроводника второго рода, содержащего в себе замкнутые вихри в области температур близких к  $T_c$ .

*Ключевые слова:* линейные вихри Абрикосова, замкнутые вихри Абрикосова, сверхпроводимость, сверхпроводник второго рода, магнитная фазовая диаграмма сверхпроводника второго рода.

В последние годы область применимости сверхпроводников второго рода существенно расширилась, что связано с возможностью их применения в современной электронике и энергетике. В связи с этим усилились и исследования смешанного состояния сверхпроводников второго рода. Токонесущие и магнитные характеристики таких сверхпроводников, определяющие перспективы их практического использования, в значительной степени зависят от наличия в образцах вихрей и их взаимодействия с пространственными неоднородностями материала.

Открытие новых высокотемпературных сверхпроводников показало, что они относятся к сверхпроводникам второго рода. Известно, что высокотемпературные сверхпроводящие (ВТСП) материалы обладают высокой степенью анизотропии. В отличие от большинства сверхпроводников, в ВТСП тепловыми флуктуациями вблизи фазового перехода пренебрегать нельзя. До сих пор не создано последовательной теории фазового перехода в магнитном поле, которая бы учитывала все флуктуационные эффекты, возникающие в этой области. Образование замкнутых вихрей Абрикосова относится к эффектам такого рода.

Замкнутые вихри начинают влиять на сверхпроводящие свойства при значительно меньшей температуре, чем температура, при которой сверхпроводимость разрушается чисто флуктуационным образом. Немаловажно изучение взаимодействия замкнутых вихрей с линейными вихрями, изучение процессов рождения и уничтожения замкнутых вихрей. В совокупности с линейными вихрями замкнутые вихри активно участвуют в процессе разрушения сверхпроводимости, а также влияют на магнитные свойства сверхпроводника. Всё это позволяет утверждать, что замкнутый вихрь Абрикосова является не менее важным объектом исследования, чем линейный вихрь, описание которого широко распространено в литературе.

Замкнутый вихрь представляет собой вихревую нить, в которой силовые линии магнитного поля замкнуты. Подобные одиночные вихревые структуры рассматривались ранее в работах [1–4]. Для упрощения расчетов предполагается, что магнитное поле имеет форму кольца – кольцевой вихрь. С магнитным полем одиночного замкнутого вихря взаимнооднозначно связаны круговые сверхпроводящие токи (рис. 1).

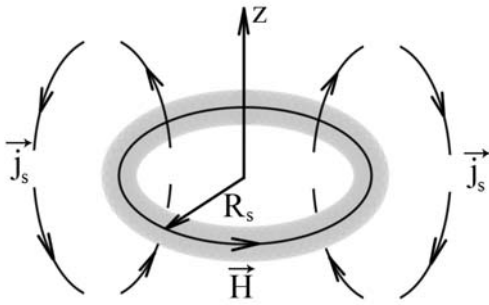


Рис. 1. Магнитное поле  $\vec{H}$ , плотность тока  $\vec{j}_s$  и радиус замкнутого вихря  $R_s$

Радиус нормальной сердцевинки замкнутого вихря, как и в случае линейных вихрей, порядка  $\xi$  – длины когерентности теории Гинзбурга-Ландау. Магнитное поле и сверхпроводящие токи охватывают область вокруг нормальной сердцевинки порядка  $\lambda$  – глубины проникновения магнитного поля. Распределение магнитного поля замкнутого вихря определяется из решения стационарного уравнения Гинзбурга-Ландау, записанного в лондонском приближении

$$\vec{H} + \lambda^2 \text{rot rot } \vec{H} = \frac{\Phi_0}{2\pi} \text{rot } \nabla \theta. \quad (1)$$

Распределение магнитного поля одиночного замкнутого вихря в общей форме может быть записано в виде

$$H_V(\rho, \zeta) = \frac{\Phi_0 \rho_s}{2\lambda^2} \int_0^\infty \frac{q J_1(\rho q) J_1(\rho_s q) \exp(-|\zeta| \sqrt{1+q^2})}{\sqrt{1+q^2}} dq. \quad (2)$$

Здесь  $\rho = r/\lambda$ ,  $\zeta = z/\lambda$ ,  $\rho_s = R_s/\lambda$ , где  $r$ ,  $z$  – цилиндрические координаты, плоскость  $z = 0$  совпадает с плоскостью кольца, магнитное поле имеет только азимутальную компоненту,  $J_1(\rho q)$  – функция Бесселя первого рода. Таким образом, магнитное поле вихря обладает симметри-

ей относительно оси  $Z$  и для произвольного азимутального угла  $\varphi$  выполняется соотношение  $\vec{H}_V(\varphi + 2\pi) = \vec{H}_V(\varphi)$ . Магнитный поток, содержащийся в замкнутом вихре, определяется выражением

$$\Phi_V = \Phi_0 (1 - \rho_s K_1(\rho_s)), \quad (3)$$

где  $K_1$  – модифицированная функция Ганкеля.

Замкнутый вихрь содержит в себе квант потока только при достаточно больших радиусах. Это связано с тем, что структура замкнутого вихря с большим радиусом близка к структуре линейного вихря. Магнитный поток вихря при малых радиусах гораздо меньше кванта потока  $\Phi_0$ . Энергия замкнутого вихря равна

$$W_V = \varepsilon L = \frac{\Phi_0 H_V(\rho_s, 0)}{8\pi} L, \quad (4)$$

где  $L = 2\pi R_s$ ,  $H_V(\rho_s, 0)$  – поле в сердцевине вихря. Время жизни одиночного замкнутого вихря будет определяться начальным радиусом вихря.

Тепловой механизм образования замкнутых вихрей, а именно образование замкнутого вихря в результате действия сильной токовой флуктуации, представлен на рисунке 2.

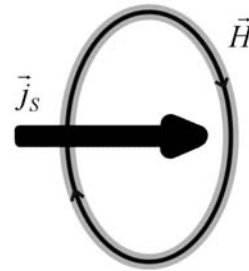


Рис. 2. Образование замкнутого вихря из токовой флуктуации

Полный ток, соответствующий замкнутому вихрю, будет равен току, проходящему через внутреннее отверстие кольца

$$I_V = \frac{c R_s}{2} H_V(\rho_s, 0). \quad (5)$$

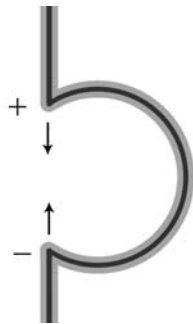
Сравнивая полный ток замкнутого вихря с током флуктуации, можно получить условие образования замкнутого вихря и тем самым рассчитать темпера-

туру, соответствующую началу генерации замкнутых вихрей:

$$T = \frac{T_C}{C\rho_s^2 + 1}, \quad (6)$$

где  $C$  – безразмерная константа, определяемая свойствами сверхпроводника. Полученное значение температуры лежит вблизи  $T_C$ .

Кроме этого, в сверхпроводнике существует механизм образования замкнутых вихрей из линейных вихрей. При достаточно сильном внешнем магнитном поле в сверхпроводнике одновременно могут присутствовать и замкнутые, и линейные вихри. Линейные вихри поддерживаются внешним магнитным полем, а замкнутые вихри разрушаются и появляются снова, так что их среднее число остается постоянным при заданной температуре [5]. Тепловые флуктуации приводят к искажению формы линейного вихря. Увеличение длины вихря энергетически не выгодно, поэтому вихрь стремится сжаться до первоначального размера, определяемого толщиной образца. Однако если изгиб будет достаточно большим, кольцевые токи противоположных сторон изгиба будут взаимодействовать, что приведет к появлению дополнительной энергии. Конкуренция этих энергий приведет к тому, что изгиб не «разгладится», а замкнется в кольцо, радиус которого определится радиусом закругления изгиба (рис. 3).



**Рис. 3.** Образование замкнутого вихря из линейного вихря

Замкнутый вихрь, образованный таким образом, будет абсолютно идентичен замкнутому вихрю, образовавшемуся в результате сильной токовой флуктуации. Но при этом вероятность рождения замкнутого вихря из линейного будет зависеть

от числа линейных вихрей в сверхпроводнике, а значит, и от величины внешнего магнитного поля.

С повышением температуры энергетический вклад замкнутых вихрей в полную энергию сверхпроводника растет, пока не достигнет своего максимума. Дальнейшее увеличение температуры сверхпроводника приводит к тому, что число замкнутых вихрей сокращается, это связано с флуктуационным разрушением сверхпроводимости в области температур, лежащей вблизи  $T_C$ . В данной области замкнутые вихри как явление, присущее только сверхпроводимости, существовать не могут.

Для исследования основных динамических свойств замкнутых вихрей рассмотрим нестационарное уравнение Гинзбурга-Ландау, полученное обобщением уравнения Гинзбурга-Ландау для слабонервновесной ситуации, когда параметр порядка не совпадает со своим равновесным значением. В этом случае вариация функционала Гинзбурга-Ландау (далее – ГЛ) не равна нулю и определяет скорость возвращения величины параметра порядка к равновесному значению

$$-\gamma \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \alpha \Psi + \beta |\Psi|^2 \Psi + \frac{1}{4m} \left( -i\hbar \nabla - \frac{2e}{c} \vec{A} \right)^2 \Psi, \quad (7)$$

где  $\gamma$  имеет смысл кинетического коэффициента,  $\Psi$  – комплексная функция трех координат и времени. Далее, для упрощения расчётов нормируется параметр порядка и векторный потенциал:

$$\psi \rightarrow \frac{\Psi}{\Psi_0}, \quad |\Psi_0|^2 = \frac{|\alpha|}{\beta}, \quad \vec{A} \rightarrow \frac{\vec{A}}{A_0}, \quad A_0 = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi}.$$

Также вводятся безразмерные координаты и время:

$$x \rightarrow \frac{X}{\xi}, \quad \xi = \frac{\hbar^2}{4m|\alpha|}, \quad t \rightarrow \frac{t}{t_0}, \quad t_0 = \frac{|\alpha|}{\gamma}.$$

Параметр порядка представляется в виде  $\psi = F e^{i\Phi}$ , а также вводятся обозначения  $\vec{V} = \nabla \Phi - \vec{A}$  и  $n = F^2$ . В итоге нестационарное уравнение ГЛ примет вид

$$\begin{cases} \frac{\partial n}{\partial t} = \Delta n - \frac{(\nabla n)^2}{2n} + 2n - 2n^2 - 2n\vec{V}^2 \\ \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = \nabla \left( \frac{\text{div}(n\vec{V})}{n} \right) \end{cases}, \quad (8)$$

где  $n$  имеет смысл концентрации сверхпроводящих носителей тока, а  $\vec{V}$  – их скорости.

Эта система представляет собой четыре нелинейных дифференциальных уравнения и должна быть дополнена начальными и граничными условиями, которые определяются характеристиками конкретной задачи. В общем случае данное уравнение не поддается аналитическому решению, поэтому решение находилось численным интегрированием. Задавая цикл по времени, мы наблюдали распределение концентрации сверхпроводящих носителей тока в пространстве и времени. С течением времени концентрация стала уменьшаться на оси кольца, т. е. в сверхпроводнике появилась область в форме тора с пониженным содержанием сверхпроводящих носителей. Подобные вихревые решения наблюдались при решении нелинейного уравнения Шрёдингера, описывающего сверхтекучую жидкость [6; 7].

В сверхпроводнике между линейными и замкнутыми вихрями существует взаимодействие. Оно проявляется, когда вихри сближаются на расстояние, достаточное для перекрывания их сверхпроводящих токов, т. е. до величины глубины проникновения магнитного поля  $\lambda$ . При этом между вихрями появляются взаимные силы, которые изменяют их положение друг относительно друга. Энергия их взаимодействия определяется следующим выражением:

$$F_{\text{int}} = \frac{\Phi_0}{8\pi} \left( \int_0^h \vec{H}_1(\vec{r}_2) \vec{e}_2 dz_2 + R_s \int_0^{2\pi} \vec{H}_2(\vec{r}_1) \vec{e}_1 d\varphi_1 \right), \quad (9)$$

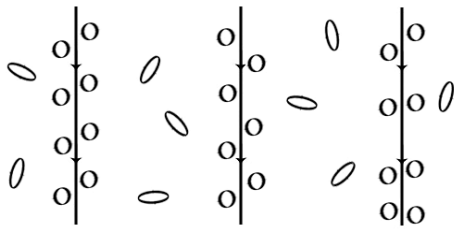
где индексы 1 и 2 принадлежат замкнутому и линейному вихрю соответственно. В первом интеграле интегрирование производится по координате  $z_2$ , направленной вдоль линейного вихря, во втором интеграле интегрирование производится по координате  $\varphi_1$ , направленной вдоль ядра замкнутого вихря. Это выражение можно использовать для нахождения энергии взаимодействия между замкнутым и линейным вихрями при любом их взаимном расположении. Поскольку линейный вихрь связан с внешним магнитным полем, то его положение фиксировано относительно решётки вихрей, т. е. и относительно сверхпроводника в целом. Расположение

замкнутого вихря относительно линейного можно задать тремя геометрическими параметрами: расстоянием до линейного вихря и двумя углами, характеризующими вращение замкнутого вихря в пространстве относительно осей, перпендикулярной и параллельной линейному вихрю. Вариация энергии взаимодействия по углам вращения показывает, что вихрь будет стремиться развернуться в одно определённое положение, которое будет являться устойчивым. При этом магнитное поле ближнего плеча замкнутого вихря и магнитное поле линейного вихря будут параллельны и противоположно направлены. Противоположное положение, когда магнитное поле ближнего плеча замкнутого вихря и магнитное поле линейного вихря параллельны и сонаправлены, является неустойчивым.

Варьирование по параметру, характеризующему расстояние между вихрями, показывает, что замкнутый вихрь, развернувшись в положение, определяемое его вращением, будет притягиваться к линейному вихрю. Энергия взаимодействия отрицательна, и поглощение замкнутого вихря линейным вихрем термодинамически менее выгодно, чем состояние, в котором замкнутый вихрь находится вблизи линейного, но не поглощается им. Между этими состояниями находится энергетический барьер, по величине равный максимуму энергии взаимодействия между вихрями. В результате замкнутые вихри, появляясь в сверхпроводнике, будут сближаться с линейными, прилипая к ним и образуя «гроздь» (рис. 4).

Общая картина сверхпроводника, находящегося во внешнем магнитном поле выше  $H_{C1}$  и имеющего температуру близкую к  $T_C$ , выглядит следующим образом: в сверхпроводнике помимо решётки линейных вихрей присутствуют замкнутые вихри, которые под действием флуктуаций появляются в сверхпроводнике. За время своего существования замкнутый вихрь разворачивается определённым образом относительно решётки линейных вихрей так, чтобы направление магнитного поля ближнего плеча замкнутого вихря было параллельно и направлено против направления магнитного поля линейных вихрей. Развернувшись подобным образом, замкнутый вихрь притягивается к одному из

линейных вихрей, находящихся поблизости. Прилипая к линейным вихрям, замкнутые вихри колеблются под действием тепловых флуктуаций, при этом их энергетическая неустойчивость приводит к постепенному уменьшению их радиуса вплоть до полного уничтожения (коллапса). Но в то же время под действием тепловых флуктуаций появляются новые вихри, так что среднее число замкнутых вихрей в сверхпроводнике остается постоянным.



**Рис. 4.** Общая картина взаимодействия замкнутых и линейных вихрей

При приближении к критической температуре сверхпроводника число замкнутых вихрей увеличивается, а значит, увеличивается вклад замкнутых вихрей в термодинамические величины, описывающие сверхпроводник. Вероятность образования замкнутого вихря определяется вероятностью флуктуационного появления разрыва длины  $\xi$  на линейном вихре. То есть для образования замкнутого вихря необходимо затратить энергию, по крайней мере, превышающую величину энергии  $\varepsilon_0 \xi$ . Увеличение внешнего магнитного поля  $H_0$  приводит к возрастанию числа линейных вихрей, а значит, и к увеличению общей длины, на которой могут образовываться замкнутые вихри, т. е. общее число замкнутых вихрей будет зависеть от внешнего магнитного поля. Механизм генерации замкнутых вихрей «включается» при определённой температуре  $T_b$ , когда теплоемкость, обусловленная замкнутыми вихрями, обращается в ноль, и имеет положительные (физичные) значения при  $T > T_b$  и расходится при  $T \rightarrow T_c$  (рис. 5).

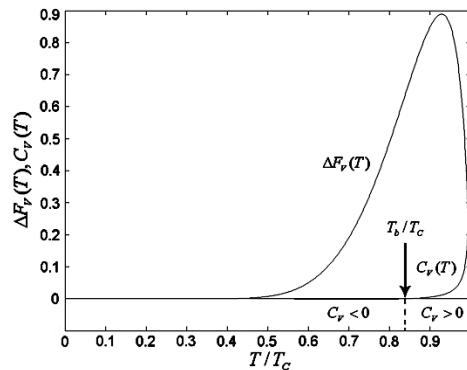
Температура  $T_b$  зависит от внешнего магнитного поля, причем увеличение поля приводит к уменьшению  $T_b$  и, следова-

тельно, к расширению области существования замкнутых вихрей.

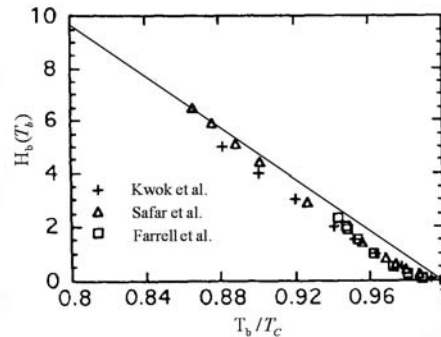
Для сверхпроводящих параметров ВТСП фазовая кривая, определяющая область существования замкнутых вихрей на магнитной фазовой диаграмме, определяется следующим выражением:

$$H_b(T) = H_b(0)(1 - T_b/T_c)^\nu, \quad (10)$$

где показатель степени  $\nu \approx 1$ . В экспериментальных работах [8–10] исследовались зависимости сопротивления слоистого ВТСП соединения от температуры и внешнего магнитного поля, при этом наблюдался фазовый переход, происходящий при температуре, лежащей вблизи  $T_c$ , соответствующей данному слоистому соединению. Зависимость (10) и данные экспериментальных работ оказались близкими друг к другу (рис. 6). Это позволяет нам сделать вывод о том, что фазовый переход, полученный в эксперименте, связан с генерацией в системе замкнутых вихрей Абрикосова.



**Рис. 5.** Температурные зависимости свободной энергии и теплоемкости сверхпроводника, содержащего замкнутые вихри



**Рис. 6.** Зависимость магнитного поля от температуры фазового перехода. Сравнение зависимости (10) (сплошная линия) с экспериментальными данными [8–10] (кресты, треугольники, квадраты)

В итоге можно заключить, что при температурах, близких к критической, замкнутые вихри вносят вклад в свободную энергию и теплоемкость сверхпроводника, участвуя в процессе разрушения сверхпроводимости. Само появление замкнутых вихрей можно рассматривать как появление новой степени свободы и новой фазы сверхпроводимости, которая характеризуется наличием замкнутых вихрей. При этом температура, соответствующая фазовому переходу, наблюдаемому экспериментально, совпадает с температурой, при которой начинается процесс генерации замкнутых вихрей. Таким образом, замкнутые вихри участвуют практически во всех основных процессах, происходящих в сверхпроводниках второго рода [11]. Поэтому они являются не менее важным объектом исследования, чем линейные вихри, широко рассматриваемые в литературе.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Козлов В.А., Самохвалов А.В. Замкнутые вихри Абрикосова в сверхпроводниках второго рода // Письма в ЖЭТФ. 1991. Т. 53. С. 150–153.
- [2] Kozlov V.A., Samokhvalov A.V. Closed Abrikosov vortices in a superconducting cylinder // Physica C. 1993. V. 213. P. 103.
- [3] Kozlov V.A., Samokhvalov A.V. Stabilization of Toroidal Abrikosov Vortex in a Nonuniform Superconductor // Journal of Superconductivity. 1993. V. 6. № 2. P. 63.
- [4] Samokhvalov A.V. Expanding vortex rings in a current-carrying superconducting cylinder // Physica C. 1998. V. 308. P. 74.
- [5] Tesanović Z. Extreme type-II superconductors in a magnetic field: A theory of critical fluctuations // Physical Review B. 1999. V. 59. № 9. P. 6449.
- [6] Koplik J., Levine H. Vortex reconnection in superfluid helium // Physical Review Letters. 1993. V. 71. № 9. P. 1375.
- [7] Koplik J., Levine H. Scattering of Superfluid Vortex Rings // Physical Review Letters. 1996. V. 76. № 25. P. 4745.
- [8] Kwok W.K., Fleshler S., Welp U., Vinokur V. M. et al. Vortex lattice melting in untwinned and twinned single crystals of  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  // Physical Review Letters. 1992. V. 69. № 23. P. 3370.
- [9] Safar H., Gammel P.L., Huse D.A., Bishop D. J. Experimental evidence for a first-order vortex-lattice-melting transition in untwinned, single crystal  $YBa_2Cu_3O_7$  // Physical Review Letters. 1992. V. 69. № 5. P. 824.
- [10] Farrell D.E., Rice J.P., Ginsberg D.M. Experimental evidence for flux-lattice melting // Physical Review Letters. 1991. V. 67. № 9. P. 1165.
- [11] Тихомиров И.В., Югай К.Н. Динамика замкнутых вихрей Абрикосова в сверхпроводниках II рода // Вестник НГУ. Серия: Физика. 2008. Т. 3. Вып. 1. С. 105.



УДК 538.9

**К.Н. Югай**

*Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского*

## **СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ И СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ**

Рассмотрена роль связанных состояний электронов в возникновении сверхпроводимости. Найдены условия, при которых возможно образование связанного состояния в эффективном потенциале. Анализируется основное состояние системы при наличии связанных состояний.

*Ключевые слова:* сверхпроводимость, эффективный потенциал, связанное состояние.

### **1. Введение**

Открытие Беднорзом и Мюллером [1] сверхпроводящего купрата с температурой перехода 30 К и последовавший почти сразу же синтез сверхпроводников с критической температурой порядка 100 К вызвал шквал работ по построению теории высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) (см. [2–22], а также обзоры [23–29]). Но, несмотря на интенсивную работу в течение 20 с лишним лет, приемлемая теория ВТСП так и не создана. Возможно, потому, что все так или иначе находились под грузом фундаментальной идеи теории Бардина-Купера-Шриффера (БКШ), согласно которой сверхпроводимость обусловлена образованием куперовских пар. И поскольку температура сверхпроводящего перехода в ВТСП оказалась гораздо выше энергии фонона – переносчика взаимодействия между электронами в куперовской паре, то представлялось естественным найти им достойную замену. Предлагались разные кандидаты на эту роль – экситоны, плазмоны, магноны, спиновые флуктуации, «спиновые мешки» и так далее, однако ни один из них не оправдал возлагавшихся надежд.

Среди множества предлагавшихся моделей ВТСП наибольшей популярностью пользовалась модель Хаббарда и ее расширенные модификации, описывающие сильные электронные корреляции на узлах кристаллической решетки ([2–15], см. также обзоры [16–22]). В них спаривание электронов, предполагается, происходит из-за антиферромагнитных спиновых флуктуаций. Однако тщательные исследования, проведенные в последнее время [23], показали, что модель Хаббарда не может служить моделью сверхпроводящих купратов.

Следует упомянуть также попытки использования модели латтинджерской жидкости [22, 24–28], модели с отталкиванием [29–31].

В настоящей статье сделана попытка построения теории сверхпроводимости исходя только из двух фундаментальных фактов: двумерности системы и сильных взаимодействий между частицами.

Что же является необходимым условием перехода в сверхпроводящее состояние?

На этот фундаментальный вопрос в теории БКШ дан однозначный ответ: это образование куперовских пар в результате электрон-фононного взаимодействия. В металлах сверхпроводящее состояние исчерпывающе объясняется наличием куперовских пар. Но все попытки объяснить высокотемпературную сверхпроводимость, основываясь на фундаменте теории БКШ – куперовских парах, оказались неудачными. Поэтому правомерно задаться вопросом: а так ли необходимы куперовские пары для обеспечения сверхпроводящего состояния? Заметим также, что прямого экспериментального наблюдения куперовских пар нет.

Известно, что электрон, находящийся в связанном состоянии в атоме, не излучает, если это состояние является стационарным. На это основополагающее свойство квантовой системы было впервые указано Нильсом Бором в его удивительной по силе интуиции и красоте работе 1913 г., посвященной атому водорода [32]. Важно подчеркнуть здесь весьма важное обстоятельство: движение электрона в атоме в стационарном состоянии – это бездиссипативное движение. В данном случае бездиссипативность означает отсутствие излучения, т. е. потери энергии при движении электрона в атоме. Можно предположить, что с этой точки зрения любая теория сверхпроводимости должна опираться именно на этот факт, т. е. для бездиссипативного, сверхпроводящего движения электрон должен находиться в связанном состоянии. Но это связанное состояние, безусловно, должно принципиально отличаться от связанного состояния, возникающего при мотовской или андерсоновской локализации, приводящей к потере подвижности электронов и переходу в диэлектрическое состояние [33; 34]. То есть это должен быть особый вид связанного состояния, при котором, однако, подвижность сохраняется. Мы будем полагать, что такое состояние может существовать, и назовем его «мобильной локализацией». Очевидно, что подобная локализация не должна происходить на отдельном атоме или ионе. «Мобильная локализация» может иметь место только на некотором эффективном потенциале, обусловленном взаимодействием

электрона с большим числом окружающих частиц.

Постановка вопроса, когда в качестве основы сверхпроводящего состояния рассматривается связанное состояние – «мобильная локализация», существенно смещает акценты при поиске теории сверхпроводимости, способной описать круг явлений, касающийся, в частности, купратов. Задача состоит в том, чтобы определить условия, при которых возможна «мобильная локализация». Заметим, что куперовские пары в теории БКШ, справедливой для сверхпроводящих металлов, являют собой, очевидно, пример «мобильной локализации».

## **2. Неустойчивость четырёх электронов в нормальном состоянии относительно притяжения между ними**

Известно, что два электрона, введённые в ферми-систему в основном состоянии, неустойчивы относительно образования связанного состояния, если между ними существует притяжение. Эти электроны, находящиеся в связанном состоянии друг с другом, представляют собой куперовскую пару. Отсюда делается вывод, что все электроны в основном состоянии распадаются на куперовские пары, если между электронами допустить притягивательное взаимодействие. Если обозначить энергию связи куперовской пары через  $E_{cp}$ ,  $E_{cp} < 0$ , то в случае, например, четырёх электронов они должны распасться на две куперовские пары с минимальной энергией, равной  $2E_{cp}$ . Однако если допустить притягивательное взаимодействие между всеми парами электронов, то, как будет показано ниже, минимальная энергия этих четырёх электронов будет меньше  $2E_{cp}$ , т. е. выгоднее распасться не на две отдельные куперовские пары, а образовать единую систему из четырёх связанных друг с другом электронов.

Рассмотрим систему электронов, находящуюся в основном состоянии. Введём в эту систему четыре электрона над уровнем Ферми. Будем полагать для простоты, что эти электроны вытянуты в линию и расположены на одинаковом расстоянии друг от друга, и учитывать взаимодействие между ближайшими соседями. Тогда можно записать уравнение Шрёдингера в виде:

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^4 \nabla_i^2 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^4 V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) = \quad (1) \\
& = E_4 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4),
\end{aligned}$$

где  $V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$  – потенциал взаимодействия между ближайшими  $i$  и  $j$  электронами,  $E_4$  – энергия системы четырёх электронов, отсчитанная от уровня Ферми. Вследствие взаимодействия волновая функция четырёх электронов не может быть факторизована.

Введём функцию

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) &= a_1 \psi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \\
& + a_2 \psi(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) + a_3 \psi(\vec{r}_3 - \vec{r}_4). \quad (2)
\end{aligned}$$

Полагая, что  $\psi(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \psi(\vec{r}_i - \vec{r}_{j'})$  и  $a_i = a_j \equiv a$ , находим из условия нормировки  $a = (3L^3)^{-1}$ ,  $L^3$  – объём системы. Волновая функция (2) будет иметь вид

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) = L^{-3} \psi(\vec{r}_i - \vec{r}_j), \quad (3)$$

где  $i$  и  $j$  принимают любое из значений от 1 до 4, но так, чтобы  $i > j$ ,  $j = i + 1$ .

Разложим функцию  $\psi(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$  в ряд:

$$\psi(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \sum_{\vec{k}} g(\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}. \quad (4)$$

Подставим выражения (3) и (4) в уравнение Шрёдингера (1) и после несложных преобразований получим

$$\frac{\hbar^2}{m} k^2 g(\vec{k}) + 3 \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} g(\vec{k}') = E_4 g(\vec{k}), \quad (5)$$

Предположим, что взаимодействие между электронами является притягивательным, справедливым в узком слое  $\vec{k}$ -пространства толщиной  $\hbar\omega_D$ , где  $\omega_D$  – дебаевская частота:

$$V_{\vec{k}\vec{k}'} = -\frac{V_0}{L^3}, \text{ при } \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} < \hbar\omega_D, \quad (6)$$

где  $V_0$  – некоторая постоянная взаимодействия. Подставим выражение (6) в уравнение (5) и перейдём от суммирования по  $\vec{k}$  к интегрированию по энергии  $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Заменяя в интеграле плот-

ность состояний на её значение на уровне Ферми  $N(0)$ , получаем

$$1 \approx 3V_0 N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon - E_4}. \quad (7)$$

При  $V_0 N(0) \ll 1$  из (7) получаем выражение для энергии четырёх взаимодействующих электронов  $E_4$ :

$$E_4 = -2\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{3V_0 N(0)}}. \quad (8)$$

Энергия двух куперовских пар, как известно, равна:

$$E_{2cp} = -4\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{V_0 N(0)}}. \quad (9)$$

Сравнивая (8) и (9), видим, что  $E_4 < E_{2cp}$ . Очевидно, что учёт взаимодействий  $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_3)$  и  $V(\vec{r}_2 - \vec{r}_4)$  приведёт к ещё большему уменьшению  $E_4$  по сравнению с выражением (8). Таким образом, связанное состояние всех четырёх электронов термодинамически выгоднее образования двух свободных куперовских пар.

### 3. Связанные состояния в 2D системе

Отличительной особенностью двумерных систем является то, что в них в любой мелкой потенциальной яме возможно образование связанного состояния [34]. Двумерность системы при определенных условиях, а именно при низких плотностях электронов, способствует локализации электронов по моттовскому или андерсоновскому сценарию и переходу в диэлектрическое состояние. Однако, как показано в настоящей статье, в двумерной системе возможна и «мобильная» локализация, не приводящая к потере подвижности при плотностях электронов выше некоторого критического значения. Более того, именно она является необходимым и достаточным условием перехода в сверхпроводящее состояние. Сверхпроводящие свойства системы, такие как температура перехода в сверхпроводящее состояние, величина сверхпроводящей щели, критический ток, определяются главным образом свойствами «мобильно» локализованных электронов.

Очевидно, что в системе сильно взаимодействующих частиц каждая частица будет находиться в некотором эффективном потенциале, определяемом, строго

говоря, всеми остальными частицами. Этот потенциал может быть определен с помощью поляризационного оператора:

$$V_{eff}(\vec{k}, \omega) = V(\vec{k}) [1 - V(\vec{k}) \Pi(\vec{k}, \omega)]^{-1}, \quad (10)$$

где  $\Pi(\vec{k}, \omega)$  – поляризационный оператор. Отсюда вытекает условие, при выполнении которого эффективный потенциал будет иметь притягивательный характер:

$$V(\vec{k}) \Pi(\vec{k}, \omega) > 1. \quad (11)$$

Условие (2) будет заведомо выполнено, если поляризационный оператор обладает полюсами. Действительно, запишем поляризационный оператор в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Pi(\vec{k}, \omega) = \\ = -2i \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G(\varepsilon - \omega, \vec{k} + \vec{p}) G(\varepsilon - \omega, \vec{k}), \end{aligned} \quad (12)$$

где одночастичные функции Грина определяются обычным образом:

$$G^{-1}(\varepsilon, \vec{k} + \vec{p}) = (\varepsilon - \omega - \Sigma(\vec{k} + \vec{p}, \varepsilon) + i\delta), \quad (13)$$

$\Sigma(\vec{k}, \varepsilon)$  – собственно энергетическая часть. Таким образом, полюса поляризационного оператора совпадают с полюсами функции Грина. В полюсах поляризационного оператора условие (11) заведомо выполняется. Поскольку полюса функции Грина (13) могут принадлежать квазичастице типа, например, полярона, то определенное условие, при котором полюс функции Грина соответствует связанному состоянию. Разлагая собственно энергетическую часть вблизи полюса, получаем условие связанного состояния:

$$\left. \frac{\partial \Sigma(\vec{k}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=E_k} > 0, \quad (14)$$

где энергия электрона в связанном состоянии  $E_k$  определяется эффективной массой  $m^*$ :

$$E_k = \frac{k^2}{2m^*} - \mu. \quad (15)$$

Можно показать, что при выполнении условия (14) эффективная масса  $m^* < m$ , что имеет место только в случае связанного состояния. Для двумерной системы условия (11) и (14) эквивалентны. Энергия связанного состояния  $E_k < 0$ , если иметь в виду, что химический потенциал в нашей

задаче имеет смысл глубины эффективной потенциальной ямы.

Вывод о наличии связанного состояния можно сделать также с помощью t-оператора [36], определяемого следующим образом:

$$t(\vec{k}, \omega) = V_{eff}(\vec{k}) + V_{eff}(\vec{k}) G(\vec{k}, \omega) V_{eff}(\vec{k}). \quad (16)$$

Здесь учтено, что рассеяние происходит на эффективном потенциале  $V_{eff}(\vec{k})$ .

Известно, что каждому связанному состоянию отвечает полюс t-оператора. Видно, что полюсы t-оператора совпадают с полюсами функции Грина. Умножая уравнение (16) слева на функцию Грина свободного движения  $G_0(\vec{k}, \omega)$ , получим

$$G_0(\vec{k}, \omega) t(\vec{k}, \omega) = G(\vec{k}, \omega) V_{eff}(\vec{k}). \quad (17)$$

Используя выражение (17), получаем уравнение Липпмана-Швингера для t-оператора:

$$t(\vec{k}, \omega) = V_{eff}(\vec{k}) + V_{eff}(\vec{k}) G_0(\vec{k}, \omega) t(\vec{k}, \omega), \quad (18)$$

которое в импульсном представлении для двумерной системы имеет вид:

$$\begin{aligned} t(\vec{k}, \omega) = V_{eff}(\vec{k}) + \\ + \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{V_{eff}(\vec{k} - \vec{q}) t(\vec{k}, \omega)}{k^2 - q^2 + i\delta} \frac{d^2 q}{(2\pi)^2}. \end{aligned} \quad (19)$$

Рассмотрим двумерную систему. Положим,  $V_{eff}(\vec{k}) = -Ua^2$ , где  $a$  – характерный размер потенциальной ямы. Уравнение (19) запишем в виде:

$$\begin{aligned} t(k, \omega) = -Ua^2 + \\ + Ua^2 \frac{2m}{\hbar^2} \int t(k, \omega) \frac{2\pi q}{q^2 - k^2 - i\delta} \frac{dq}{(2\pi)^2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Полюс t-оператора (20) даёт энергию связанного состояния [37]:

$$E_0 \approx -\frac{\hbar^2}{ma^2} \exp\left(-\frac{2\pi \hbar^2}{ma^2 U}\right). \quad (21)$$

Видно, что появление связанного состояния возможно при любой малой глубине эффективной потенциальной ямы. При достаточной глубине этой ямы возможно появление в  $V_{eff}$  двух и более уровней. В двумерной квантовой потенциальной яме квантование энергии, т. е. наличие связанного состояния, возникает из-за ограничения какой-либо степени

свободы. В двух других направлениях движение не ограничено, т. е. мобильно.

#### 4. Основное состояние 2D системы, сверхпроводящая щель, критическая температура

Подчеркнем, что появление связанного состояния в  $V_{eff}$ , т. е. «мобильная локализация», в общем случае не приводит к переходу в диэлектрическое состояние. Однако можно предположить, что в общем случае часть электронов будет локализована по мотовскому или андерсоновскому сценарию. Другая часть – это обычные электроны, движение которых сопровождается диссипацией. И, наконец, третья часть – это электроны, локализованные по «мобильному» сценарию. Соотношение между ними и определяет, будет ли система в состоянии мотовского или андерсоновского диэлектрика, или в металлическом состоянии, или происходит переход «нормальный металл – сверхпроводник». Очевидно, что «мобильная локализация» объясняет поведение двумерных систем, например, Si [38; 39]: резкое увеличение проводимости при понижении температуры при плотности электронов больше некоторой критической величины.

Переход всех электронов системы в состояние «мобильной локализации» представляет собой переход в сверхпроводящее состояние. Этот переход минимизирует энергию системы, а следовательно, приводит к возникновению коррелированного спинового состояния «мобильно локализованных» электронов системы. Иными словами, это минимизированное по энергии спин-коррелированное состояние является коллективным, когерентным, в котором любая пара соседних спинов имеет противоположное направление.

Волновую функцию основного состояния такой системы электронов можно записать в следующем виде:

$$|GS\rangle = A \sum_k a_{1,k\uparrow}^+ a_{2,-k\downarrow}^+ \cdots a_{n,-k\downarrow}^+ |0\rangle, \quad (22)$$

где  $n=N/2$ ,  $N$  – число электронов системы. Удобно записать выражение (22), объединив попарно операторы рождения с противоположными спинами. Тогда мы получаем выражение, в точности совпадающее с соответствующим выражением теории БКШ. Однако различие есть, и оно заключается в том, что в нашем случае оператор  $a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+$  не связан с рождением ку-

перовской пары и объединение попарно этих операторов является чисто формальным.

Щелевая функция определяется также, как и в БКШ, – аномальной функцией Грина, и уравнение согласования имеет вид:

$$\Delta_0 = V_{eff} \sum_k u_k v_k. \quad (23)$$

Здесь  $u_k$  и  $v_k$  – функции Боголюбова. В отличие от БКШ, постоянная взаимодействия вычисляется с помощью выражения (10). Критическая температура  $T_c \approx \Delta_0$  и, следовательно, определяется глубиной потенциальной ямы  $V_{eff}$ :

$$T_c \propto V_{eff} / k_B, \quad (24)$$

где  $k_B$  – постоянная Больцмана. При записи выражения (24) мы учли, что плотность состояний в нашем случае будет иметь логарифмическую особенность Ван Хофа. В соответствии с (24) температура перехода достигает значения 100 К уже при  $V_{eff} \approx 8 \cdot 10^{-3}$  эВ.

Поскольку  $T_c$  не определяется напрямую дебаевской частотой, то изотопический эффект будет выражен слабо. Электрон-фононное взаимодействие включено в  $V_{eff}$ , но оно в общем случае не является определяющим.

#### Заключение

Существует три вида поведения электронов: 1) мотовская и андерсоновская локализации, приводящие к переходу в диэлектрическое состояние. Электроны при этом теряют подвижность; 2) «металлическое», т. е. обычное поведение электронов, сопровождающееся диссипацией; 3) «мобильная локализация», при которой электрон находится в связанном состоянии в  $V_{eff}$ , его движение является бездиссипативным, т. е. сверхпроводящим.

Автор благодарит участников Сибирского семинара по сверхпроводимости и смежным проблемам, в частности В.В. Валькова и С.Г. Овчинникова, за плодотворные дискуссии.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Bednorz J.G., Müller K.A. Z. Phys. B: Condens. Matter **64**, 189 (1986).

- [2] *Schrieffer J.R., Wen X.G., Zhang S.C.* Phys. Rev. Lett. **60**, 944 (1988).
- [3] *Schrieffer J.R., Wen X.G., Zhang S.C.* Phys. Rev. B **39**, 11663 (1989).
- [4] *Kampf A.P., Schrieffer J.R.* Phys. Rev. B **42**, 7967 (1990).
- [5] *Anderson P.W.* Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [6] *Ren Y., Anderson P.W.* Phys. Rev. B **48**, 16662 (1993).
- [7] *Tao R., Zhang X., Tang X., Anderson P.W.* Phys. Rev. Lett. **83**, 5575 (1999).
- [8] *Anderson P.W.* cond-mat/0510053.
- [9] *Anderson P.W.* Phys. Rev. Lett. **96**, 017001 (2006).
- [10] *Emery V.J.* Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
- [11] *Emery V.J., Reiter G.* Phys. Rev. B **38**, 4547 (1988).
- [12] *Emery V.J., Kivelson S.A., Lin H.Q.* Phys. Rev. Lett. **64**, 475 (1990).
- [13] *Carlson E.W., Orgad D., Kivelson S.A., Emery V.J.* Phys. Rev. B **62**, 3422 1(2000).
- [14] *Садовский М.В., Тимофеев А.А.* СФХТ **43**, 11 (1991).
- [15] *Chakravarty S., Laughlin R.B., Morr D.K., Nayak C.* Phys. Rev. B, **63**, 094503 (2001).
- [16] *Dogatto E.* Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
- [17] *Van Harlingen D.J.* Rev. Mod. Phys. **67**, 515 (1995).
- [18] *Tsuei C.C., Kirtley J.R.* Rev. Mod. Phys. **72**, 969 (2000).
- [19] *Lee P.A., Nagaosa N. and X.-G. Wen,* Rev. Mod. Phys., **78**, 17 (2006).
- [20] *Овчинников С.Г.* УФН, **167**, 1043 (1997).
- [21] *Изюмов Ю.А.* УФН, **169**, 225 (1999).
- [22] *Максимов Е.Г.* УФН, **170**, 1033 (2000).
- [23] *Aimi T., Imada M.* J. Phys. Soc. Jpn., **76**, 113708 (2007).
- [24] *Anderson P.W.* Phys. Rev. Lett., **64**, 1839 (1990).
- [25] *Anderson P.W.* Phys. Rev. B **42**, 2624 (1990).
- [26] *Ogata M., Anderson P.W.* Phys. Rev. Lett. **70**, 3087 (1993).
- [27] *Anderson P.W., Ramakrishnan T.V., Strong S., Clarke D.G.* Phys. Rev. Lett. **77**, 4241 (1996).
- [28] *Anderson P.W.* Phys. Rev. B **55**, 11785 (1997).
- [29] *Белявский В.И., Капаев В.В., Копаев Ю.В.* ЖЭТФ, **118**, 941 (2000).
- [30] *Belyavsky V.I., Kopaev Yu.V.* Phys. Rev. B **67**, 024513 (2003).
- [31] *Belyavsky V.I., Kopaev Yu.V., Smirnov M.Yu.* Phys. Rev. B **72**, 132501 (2005).
- [32] *Bohr N.* Phil. Mag., **26**, 1-25, 476-502, 857-875 (1913).
- [33] *Мотт Н.Ф.* Переходы металл-изолятор. М.: Наука, 1979.
- [34] *Anderson P.W.* Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [35] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1989.
- [36] *Taylor J.R.* Scattering Theory. The Quantum Theory on Nonrelativistic Collisions. NY: John Wiley & Sons, 1972.
- [37] *Левитов Л.С., Шитов А.В.* Функции Грина. Задачи и решения. М.: Физматлит, 2003.
- [38] *Kravchenko S.V., Mason W., Furneaux J.E., Pudalov V.M.* Phys. Rev. Lett., **75**, 910 (1995).
- [39] *Abrahams E., Kravchenko S.V., Sarachik M.P.* Rev. Mod. Phys., **73**, 251 (2001).

## **ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ УЛЬТРАКОРОТКИХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ С ПОВЕРХНОСТЬЮ: ГЕНЕРАЦИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ**

Рассмотрен механизм взаимодействия ультракоротких – пико- и фемто-секундных – импульсов с поверхностью материалов с металлической и полупроводниковой проводимостью, а также диэлектриков. Показано, что глубина проникновения излучения определяется длительностью импульса. Вещество, прозрачное для длинных импульсов, оказывается непрозрачным для ультракоротких импульсов. Причём непрозрачными для ультракоротких импульсов становятся любые вещества, и длина волны излучения не играет существенной роли.

*Ключевые слова:* пико- и фемто-секундные лазерные импульсы, длительность импульса, глубина проникновения, мягкое рентгеновское излучение.

Взаимодействию ультракоротких – пико- и фемто-секундных – лазерных импульсов с поверхностью твёрдого тела уделяется большое внимание сразу после появления соответствующих лазеров. Интерес подогревается двумя обстоятельствами. Во-первых, очень важно понять физические процессы, происходящие при поглощении ультракоротких импульсов с длительностью, сравнимой с характерными внутриатомными временами [1–3]. Во-вторых, возможно интересное практическое применение этого процесса: абляция, рентгеновское излучение, генерируемое при поглощении импульса поверхностью твердого тела или жидкости, получение сверхплотной плазмы [4–6].

Важным вопросом, характеризующим процесс взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов, является глубина проникновения импульса внутрь вещества. Ниже мы покажем, что эта глубина непосредственно связана с длительностью импульса, поэтому механизм распространения излучения существенно отличается от того, которое имеет место в случае длинного импульса.

### **1. Глубина проникновения**

Рассмотрим классическую картину взаимодействия ультракороткого импульса с поверхностью твёрдого тела или жидкости. Будем считать, что импульс падает нормально на плоскую поверхность вещества. Запишем уравнения Максвелла:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{E} &= - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\ \operatorname{rot} \vec{H} &= \frac{\varepsilon}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{j}, \\ \vec{B} &= \mu \vec{H}, \\ \vec{j} &= \sigma \vec{E}, \end{aligned} \tag{1}$$

где  $\varepsilon$  и  $\mu$  – диэлектрическая и магнитная проницаемость соответственно,  $\sigma$  – проводимость вещества. Остальные обозначения общеприняты. Для плоского фронта падающего импульса длительностью  $\tau_p$  для  $\mu = 1$  уравнения (1) можно записать в виде

$$\begin{aligned} ikE_0\theta(t) &= -\frac{1}{c}H_0\delta(t-\tau_p), \\ -ikH_0\theta(t) &= \frac{\varepsilon}{c}E_0\delta(t-\tau_p) + \frac{4\pi\sigma}{c}E_0\theta(t), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $E_0$  и  $H_0$  – амплитуды электрического и магнитного полей падающего импульса,  $\theta(t)$  – ступенчатая функция Хэвисайда:

$$\theta(t) = \begin{cases} 1, & \text{при } t > 0, \\ 0, & \text{при } t < 0. \end{cases}$$

Интегрируя обе части уравнений (2) по времени, получаем:

$$\begin{aligned} ikE_0\tau_p &= -\frac{1}{c}H_0, \\ -ikH_0\tau_p &= \frac{\varepsilon}{c}E_0 + \frac{4\pi\sigma}{c}\tau_p E_0. \end{aligned} \quad (3)$$

Отсюда находим:

$$k = k_R + ik_I = \frac{n}{\sqrt{2c\tau_p}} \sqrt{1 + \frac{4\pi\sigma\tau_p}{\varepsilon}} (1 + i), \quad (4)$$

где  $n = \sqrt{\varepsilon}$  – показатель преломления.

Глубина проникновения импульса определяется выражением:

$$\delta = k_I^{-1} = \frac{\sqrt{2c\tau_p}}{n} \left(1 + \frac{4\pi\sigma\tau_p}{\varepsilon}\right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (5)$$

Для случая, когда вещество является металлом, имеем

$$\frac{4\pi\sigma\tau_p}{\varepsilon} \gg 1, \quad (6)$$

и глубина проникновения определяется выражением:

$$\delta = \left(\frac{c^2\tau_p}{2\pi\sigma}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (7)$$

т. е. для металлов  $\delta \propto \tau^{1/2}$ .

В случае диэлектрика неравенство (6) имеет противоположное направление:

$$\frac{4\pi\sigma\tau_p}{\varepsilon} \ll 1, \quad (8)$$

и

$$\delta = \frac{\sqrt{2c\tau_p}}{n}. \quad (9)$$

Таким образом, для диэлектриков глубина проникновения импульса пропорциональна длительности импульса:  $\delta \propto \tau_p$ .

В промежуточном случае мы имеем для  $\delta$  выражение (5). В любом случае глубина проникновения тем меньше, чем меньше длительность импульса. Отсюда следует два важных вывода. 1) Любое вещество оказывается непрозрачным для ультракоротких импульсов, хотя оно может быть прозрачным для длинных импульсов. 2) В тонком слое толщиной порядка  $\delta$  за время длительности импульса  $\tau_p$  выделяется вся энергия импульса, которая частично, как будет показано ниже, переизлучается в мягком рентгеновском диапазоне, а остальная часть уносится с поверхности при абляции.

## 2. Рентгеновское излучение

В неоднородном переменном поле на заряженные частицы действует сила, пропорциональная градиенту квадрата амплитуды поля  $E_0^2$ . Эта сила, отнесённая к одному электрону, равна (см., например: [7])

$$\vec{f} = -\frac{e^2}{4m\omega^2} \nabla |E_0|^2. \quad (10)$$

В нашем случае эта сила, направленная вдоль вектора  $\vec{k}$  вглубь материала, будет с большой точностью равна

$$f = \frac{e^2}{4m\omega^2} \frac{E_0^2}{\delta}. \quad (11)$$

Физическая картина при этом выглядит следующим образом. Сила (11), действующая на электроны (в случае металлов – на электроны проводимости, в случае диэлектриков – на валентные электроны), приводит к их сдвигу в направлении, нормальном к поверхности вглубь материала, на максимальную величину порядка  $\delta$ . При этом ионы вследствие большей массы за время действия импульса  $\tau_p$



остаются практически неподвижными. Между смещёнными электронами и неподвижными ионами возникает большое электростатическое поле, тормозящее электроны. После окончания фазы ускорения направление импульса электронов будет меняться на противоположное – электроны начнут двигаться к поверхности. При этом электроны в силу инерции пройдут точку, в которой эффект разделения зарядов равен нулю, после неё электростатическое поле возникнет вновь, но противоположного знака. Электроны вырываются наружу, увлекая за собой ионы, начинается абляция.

В этой картине нас будет интересовать стадия торможения электронов и последующего изменения направления движения и ускорения. На этой стадии возникает тормозное излучение электронов.

Максимальная частота фотона, излучаемая электроном, может быть оценена исходя из того, что к концу действия импульса скорость электрона будет максимальной. Тогда эта частота определяется из выражения:

$$\Omega_m = \frac{p^2}{2m\hbar}, \quad (12)$$

где с учётом (11) импульс электрона к концу фазы ускорения равен

$$p = \frac{e^2 E_0^2 \tau_p}{4m\omega^2 \delta}. \quad (13)$$

Максимальная частота фотона  $\Omega_m$  будет равна

$$\Omega_m = \frac{e^4 E_0^4 \tau_p^2}{32m^3 \hbar \omega^4 \delta^2}. \quad (14)$$

В случае металла, используя (7), находим

$$\Omega_m = \frac{\pi e^4 E_0^4 \sigma \tau_p}{16m^3 \hbar c^2 \omega^4}, \quad (15)$$

т. е. частота  $\Omega_m$  пропорциональна  $\tau_p$ . А в случае диэлектрика на основе (9) имеем

$$\Omega_m = \frac{e^4 E_0^4 n}{64m^3 \hbar c^2 \omega^4}, \quad (16)$$

т. е.  $\Omega_m$  в этом случае явно от  $\tau_p$  не зависит.

Отметим, что, в отличие от характеристического рентгеновского излучения, в данном случае частота излучения ограничена сверху, а не снизу.

Для энергии в импульсе  $W = 0,1$  Дж,  $E_0 = 1,8 \cdot 10^8$  ед. СГСЕ,  $\omega = 3 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$ ,  $\sigma = 0,5 \cdot 10^{18} \text{ с}^{-1}$  (медь),  $\tau_p = 10^{-15} \text{ с}$  имеем  $\delta = 5$  нм,  $\hbar\Omega_m = 37,5$  эВ. Эта энергия фотона соответствует мягкому рентгеновскому диапазону.

Для тех значений энергии, длительности импульса и амплитуды лазерного поля  $E_0$  и  $\omega = 1,3 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$ ,  $n = 1,5$  (силикатное стекло) получаем  $\delta = 0,28$  мкм,  $\hbar\Omega_m = 24,4$  эВ. Эта энергия фотона также соответствует мягкому рентгеновскому диапазону.

Дифференциальное сечение излучения рентгеновского фотона частоты  $\Omega < \Omega_m$  даётся формулой [8]:

$$d\sigma_\Omega = \frac{128\pi}{3} Z^3 \alpha^2 r_e^2 \left(\frac{c}{v}\right)^3 \frac{\hbar d\Omega}{mv^2}, \quad (17)$$

где  $Z$  – зарядовое число ядра, на котором происходит торможение электрона,  $r_e = e^2 / m$ ,  $\alpha = e^2$ . Известно, что сечение  $d\sigma_\Omega / d\Omega$  стремится при  $\Omega \rightarrow \Omega_m$  к конечному пределу, поскольку  $\Omega_m$  является верхней границей непрерывного тормозного излучения.

Заметим, что рассмотренное рентгеновское излучение может быть использовано в медицине, причём низкая энергия фотонов добавляет дополнительные перспективы.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Perez D., Lewis L.J. // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 89. P. 255504.
- [2] Kim H.T., Lee D.G., Hong K.-H., Kim J.-H., Choi I.W., Nam C.H. // Phys. Rev. A. 2003. V. 67. P. 051801.
- [3] Kondoh Y., Yabe T., Maehara J., Nakamura T., Ogata Y. // Phys. Rev. E. 2003. V. 68. P. 066408.
- [4] Emma P., Bane K., Cornacchia M., Huang Z., Schlarb H., Stupakov G., Walz D. Phys. Rev. Lett. 2004. V. 92. P. 074801.
- [5] Cavalieri A.L., Fritz D.M., Lee S.N. et al. Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94. P. 114801.
- [6] Audebert P., Renaudin P. et al. Phys. Rev. Lett., 2005. V. 94. P. 025004.
- [7] Гинзбург В.Л. Распространение электромагнитных волн в плазме. М.: Наука, 1967.
- [8] Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Квантовая электродинамика. 2-е изд. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. Т. IV. М.: Наука, 1980.

Вестн. Ом. ун-та. 2009. № 2. С. 122–126.

УДК 621.315.592

**В.А. Богданова, Н.А. Давлеткильдеев, А.О. Мельшин, Е.Н. Сидоров**

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

### **ВЛИЯНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ КОРРЕЛЯЦИИ ПРИМЕСНЫХ ДЕФЕКТОВ НА СПЕКТРАЛЬНУЮ ЗАВИСИМОСТЬ КРАЕВОЙ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ GaAs:Te**

Представлены результаты влияния пространственной корреляции примесных дефектов на спектральную зависимость краевой фотолюминесценции в монокристаллах GaAs:Te

*Ключевые слова:* арсенид галлия, сильное легирование, краевая фотолюминесценция, электронная структура, самоорганизующие примесные дефекты.

В монокристаллах GaAs:Te, выращенных методом Чохральского, в области концентраций примеси  $10^{17}\text{см}^{-3} < N < 10^{19}\text{см}^{-3}$  наблюдаются немонотонные изменения ряда параметров, характеризующих электронный энергетический спектр.

Так, методами стационарной фотолюминесценции и инфракрасной спектроскопии при  $T=300\text{К}$  было показано [1–3], что в данном материале наблюдается немонотонное изменение величин химического потенциала  $\mu$ , сужения запрещенной зоны  $\Delta E_g$  и параметра, характеризующего спад плотности состояний у края валентной зоны  $\gamma_n$ . Изменения указанных параметров интерпретируются с точки зрения упорядочения в примесной подсистеме. Предполагается, что наиболее вероятной причиной немонотонных изменений параметров является переход примесной подсистемы из состояния с неоднородным распределением примесных дефектов в состояние с пространственно-коррелированным распределением.

Настоящая статья посвящена дальнейшему изучению особенностей изменения параметров, характеризующих электронную структуру монокристаллов GaAs:Te методом фотолюминесценции (ФЛ). Исследовались образцы, полученные из стехиометрических навесок методом Чохральского из-под флюса, с концентрацией свободных носителей заряда в диапазоне  $10^{17}\text{см}^{-3} < n_0 < 10^{19}\text{см}^{-3}$ , определенной из холловских измерений. Измерение спектров ФЛ проводилось в интервале температур  $6\div 300\text{К}$ . Фотолюминесценция возбуждалась  $\text{Ar}^+$ -лазером, интенсивность возбуждения  $L \sim 100\text{Вт}\cdot\text{см}^{-2}$ , длина волны возбуждающего излучения 458 нм.

В общем виде форма спектра ФЛ сильно легированных полупроводников (СЛП) дается следующим выражением [4]:

$$I(\hbar\omega) \sim \int dE_c dE_v \rho_c(E_c) \rho_v(E_v) \times f_c(E_c) f_v(E_v) \delta(E_c - E_v - \hbar\omega), \quad (1)$$

где  $E_e$ ,  $E_h$  – энергии электронов и дырок,  $\rho_c$ ,  $\rho_v$  – плотности состояний (ПС),  $f_c$ ,  $f_v$  – функции распределения по состояниям для электронов и дырок соответственно.

При подгонке спектров ФЛ с применением соотношения (1) необходимо использовать большое число подгоночных параметров. В этом случае вследствие корреляции параметров могут быть получены неоднозначные результаты.

Обычно для процедуры подгонки ФЛ, обусловленной рекомбинацией свободных электронов со свободными дырками (ВВ-переходы), используется более простое соотношение [4]:

$$I(\hbar\omega) \sim \rho_c(\hbar\omega) f_c(\hbar\omega), \quad (2)$$

которое прямо связывает форму спектра ФЛ с ПС зоны проводимости. Формула (2) предполагает, что распределение дырок по энергии много уже при  $k \approx 0$  в валентной зоне, чем распределение электронов.

Для функции ПС в зоне проводимости, включая хвост ПС, обусловленный случайным распределением примеси, обычно используют формулу Кейна [5]:

$$\rho_c(E_e) \sim \int_{-\infty}^{E_e} \rho_{0c}(E_e - z) \exp\left(-\frac{z^2}{\gamma_e^2}\right) dz, \quad (3)$$

где энергия  $E_e$  отсчитывается от края зоны,  $\rho_{0c}$  – неискаженная функция ПС,  $\gamma_e$  – величина среднеквадратичной флуктуации примесного потенциала.

В качестве функции распределения электронов  $f_c(E)$  используется распределение Ферми-Дирака:

$$f_c(E_e) = \left[1 + \exp\left(\frac{E_e - \mu}{kT}\right)\right]^{-1}, \quad (4)$$

где значение химического потенциала  $\mu$  отсчитывается от края зоны. Согласно соотношению (2) полуширина спектра межзонной ФЛ определяется величиной химпотенциала.

В работе [6] показано, что спектр краевой ФЛ, обусловленный рекомбинацией свободных электронов с дырками, локализованными на глубоких уровнях «хвоста» ПС валентной зоны (ВТ-переходы), в области спектрального максимума определяется рекомбинацией свободных электронов с дырками, локализованных в состояниях «гауссова хвоста» валентной зоны при высоких уровнях легирования и (или) высоких уровнях возбуждения ФЛ. Таким образом, функция плотности со-

стояния дырок может быть представлена выражением:

$$\rho_h(E_h) \sim \exp\left(-\frac{E_h^2}{\gamma_h^2}\right). \quad (5)$$

Спектр ФЛ описывается следующим выражением [5]:

$$I(\hbar\omega) \sim \int_0^{\infty} \frac{\rho_{0c}(\hbar\omega - E_g + E_h) \rho_h(E_h)}{\left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_p - E_h}{kT}\right)\right]} \times \\ \times \frac{dE_h}{\left[f_c(\hbar\omega - E_g + E_h)\right]^{-1}}, \quad (6)$$

где  $E_h$  отсчитывается от потолка валентной зоны. Параметр  $\varepsilon_p$  определяет величину характерных энергий ионизации тех «акцепторных» уровней, которые при данной температуре обуславливают излучательную рекомбинацию:

$$\varepsilon_p = kT \cdot \lambda, \quad (7)$$

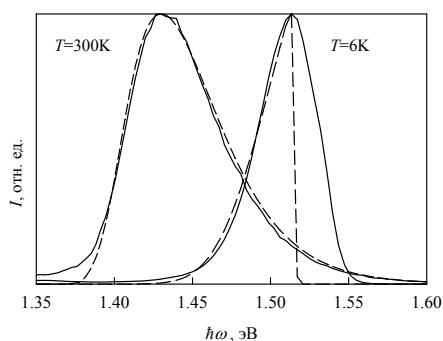
где  $\lambda$ , в свою очередь, определяется эффективным числом нелокализованных состояний в валентной зоне, коэффициентом захвата свободной дырки на состояние хвоста валентной зоны, коэффициентом излучательной рекомбинации свободного электрона и локализованной дырки, концентрациями неравновесных свободных носителей заряда.

Согласно соотношению (6) полуширина спектра межзонной ФЛ определяется величиной  $\gamma_h$ .

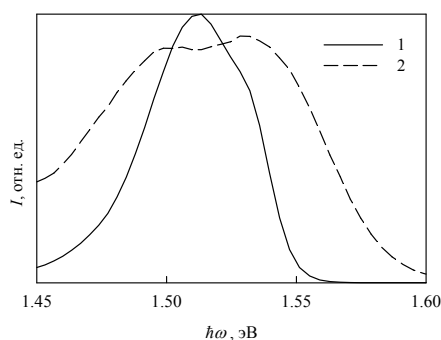
В настоящей статье для анализа температурной эволюции спектров межзонной ФЛ использовались 2 модели: 1) ВВ-переходы, описываемые выражениями (2)–(4) с подгоночными параметрами  $\mu$ ,  $\Delta E_g$ ,  $\gamma_e$ ; ВТ-переходы, описываемые выражениями (5), (6) с подгоночными параметрами  $\mu$ ,  $\Delta E_g$ ,  $\gamma_h$ . Параметр  $\varepsilon_p$  не использовался как подгоночный. Согласно оценкам работы [6], величина  $\lambda$  в исследуемом материале при указанном уровне возбуждения лежит в диапазоне 2÷4. В настоящей статье ([6]) для расчетов было выбрано значение  $\lambda = 3$ .

В работе [1] обнаружено, что во всем исследуемом концентрационном диапазоне высокотемпературные спектры исследуемого материала хорошо описываются ВВ-моделью, т. е. доминирует люминесценция при рекомбинации свободных электронов со свободными дырками. Бы-

ли получены концентрационные зависимости  $\mu_{300K}(n_0)$ ,  $\Delta E_{g,300K}(n_0)$ .



**Рис. 1.** Спектры ФЛ образца GaAs:Te с  $n_0=9.9 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  при  $T=300\text{K}$  и  $T=6\text{K}$   
Сплошные кривые – эксперимент, штриховые кривые – расчетные спектры, полученные с использованием соотношений (1)–(3)



**Рис. 2.** Экспериментальные спектры ФЛ образцов GaAs:Te  
1 –  $n_0=9.9 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  при  $T=30\text{K}$ ;  
2 –  $n_0=2.7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  при  $T=110\text{K}$

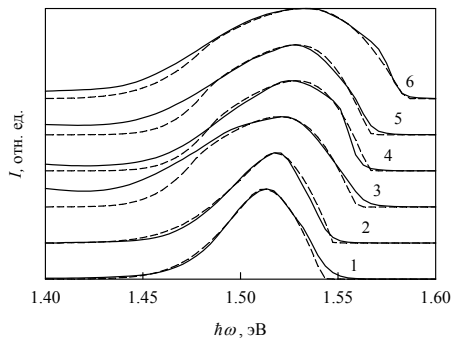
Необходимо отметить, что в работе [1] спектры ФЛ, используемые для анализа, были получены в следующих условиях эксперимента: ФЛ возбуждалась He-Ne-лазером, интенсивность возбуждения  $L \sim 7 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$ . Зависимости  $\mu_{300K}(n_0)$ ,  $\Delta E_{g,300K}(n_0)$ , полученные в настоящей статье, согласуются с данными работы [1].

Анализ, проведенный в настоящей статье, показал, что как в области концентраций  $n_0 < 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , так и в области концентраций  $n_0 > 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  свободных носителей заряда крайняя ФЛ не описывается с помощью ВВ-модели во всем исследуемом температурном диапазоне. На рисунке 1 представлены экспериментальные спектры фотолюминесценции образцов с  $n_0=9.9 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  при  $T=6\text{K}$  и

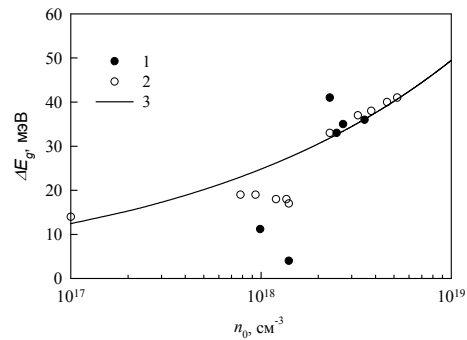
$T=300\text{K}$ , а также теоретические спектры ФЛ, рассчитанные при помощи соотношений (1)–(3). Видно, что ВВ-модель хорошо описывает спектр при  $T=300\text{K}$ , но не описывает спектральную зависимость при  $T=6\text{K}$ .

Если химический потенциал определяет полуширину спектра при  $T=300\text{K}$ , то для спектров при  $T=6\text{K}$  существует дополнительный уширяющий фактор. Результаты анализа температурной эволюции спектров краевой ФЛ показали, что чем выше концентрация свободных носителей заряда, тем выше температура, когда ВВ-модель перестает описывать спектральную зависимость краевой люминесценции в исследуемых образцах.

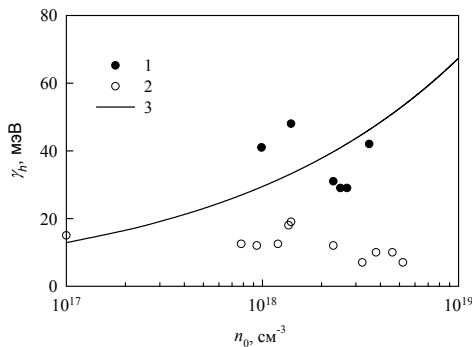
Более того, существуют температуры, при которых явно проявляются два конкурирующих канала. Это иллюстрирует рисунок 2. Необходимо отметить, что излучательная рекомбинация электронов и дырок в GaAs изучена достаточно хорошо. Повышенный интерес к люминесценции в этом материале был обусловлен открытием стимулированного излучения и созданием инжекционных лазеров, а также источников спонтанного излучения, обладающих высокой эффективностью и быстродействием. Кроме того, исследование люминесценции – это один из самых тонких и наиболее распространенных экспериментальных методов изучения конкретных особенностей энергетического спектра, обусловленных эффектами легирования. На основе анализа спектральной зависимости межзонной ФЛ обычно определяют концентрационные зависимости сужения запрещенной зоны, среднеквадратичной флуктуации примесного потенциала (параметров, характеризующих «хвосты» ПС). Ни в коей мере не претендуя на полноту охвата, можно указать на работы [7–13]. Отмечается, что спектр межзонной ФЛ в монокристаллическом n-GaAs представляет собой бесструктурную полосу в широких концентрационном и температурном диапазонах, анализ которой удастся провести с использованием одной из альтернативных моделей – ВТ- или ВВ-модели. Наблюдаемая структура межзонной ФЛ исследуемого материала обнаружена впервые.



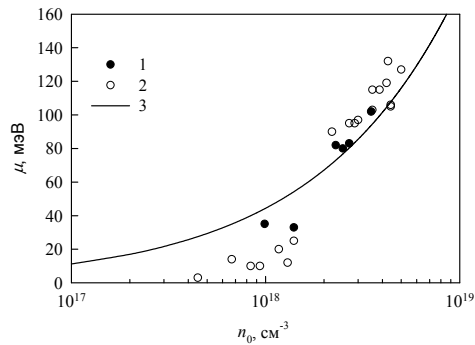
**Рис. 3.** Экспериментальные (сплошная линия) и теоретические (штриховая линия) спектральные зависимости краевой ФЛ образцов GaAs:Te при  $T=6K$ . Расчет теоретических спектров проводился с использованием соотношений (5), (6).  $n_0$ : 1 –  $9.9 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , 2 –  $1.4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , 3 –  $2.3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , 4 –  $2.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , 5 –  $2.7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , 6 –  $3.6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$



**Рис. 5.** Концентрационная зависимость сужения запрещенной зоны в монокристаллах n-GaAs  
1 –  $\Delta E_{g,6K}$ , 2 –  $\Delta E_{g,300K}$ , 3 – теоретическая зависимость  $\Delta E_g$ , обусловленной многочастичными эффектами [15]



**Рис. 4.** Параметр спада ПС валентной зоны в монокристаллах n-GaAs  
1 –  $\gamma_{n,6K}$ , 2 –  $\gamma_{n,300K}$  [3], 3 – теоретическая зависимость величины среднеквадратичной флуктуации примесного потенциала [14]



**Рис. 6.** Концентрационная зависимость химического потенциала в монокристаллах n-GaAs  
1 –  $\mu_{n,6K}$ , 2 –  $\mu_{n,300K}$ , 3 – теоретические значения для стандартной зоны проводимости [16]

Сделано предположение, что в исследуемых образцах с уменьшением температуры с ВВ-каналом начинает конкурировать ВТ-канал, который при низкой температуре становится доминирующим.

На рисунке 3 представлены результаты анализа подгонки с использованием ВТ-модели. Видно, что учет распределения дырок по энергиям акцепторноподобных состояний в хвосте плотности состояний у края валентной зоны, позволяет достаточно хорошо описать спектральную зависимость межзонной ФЛ в районе максимума.

На рисунках 4–6 представлены концентрационные зависимости подгоночных параметров  $\Delta E_g$ ,  $\gamma_n$ ,  $\mu$ . Видно, что зависимости  $\mu_{6K}(n_0)$  и  $\Delta E_{g,6K}(n_0)$ , полученные при подгонке низкотемпературных спектров ФЛ с использованием ВТ-модели, качественно согласуются с концентрационными зави-

симостями этих параметров, полученными при подгонке комнатнотемпературных спектров ФЛ с использованием ВВ-модели при  $T=300K$ . Можно даже говорить и о количественном согласии, если учесть, что при  $n_0 \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$  еще проявляется зависимость химпотенциала от температуры, т. е. теоретические значения  $\mu_{300K}$  меньше значений  $\mu_{6K}$ . И в том, и в другом случае в области  $n_0 < 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  значения подгоночных параметров  $\Delta E_g$  и  $\mu$  лежат ниже теоретических, что свидетельствует о наличии дополнительного искажения закона дисперсии и кристаллической решетки. Из рисунка 4 видно, что значения подгоночного параметра  $\gamma_n$ , характеризующего хвост плотности состояний валентной зоны, лежат выше теоретических значений среднеквадратичной флуктуации примесного потенциала. Данные настоящей статьи качественно согласуются с зави-

симостью  $n_{\text{300K}}(n_0)$ , полученной из анализа спектров поглощения под краем фундаментального поглощения [3], и свидетельствуют о том, что в концентрационной области  $n_0 < 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  имеют место крупномасштабные флуктуации в распределении примесных дефектов.

В области  $n_0 > 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  величина  $n_{\text{6K}}$  уменьшается, что свидетельствует о коррелированном распределении доноров.

Таким образом, в статье проведено исследование спектральной зависимости краевой фотолюминесценции серии монокристаллов арсенида галлия, выращенных методом Чохральского, легированных теллуrom с концентрацией свободных носителей заряда  $n_0 = 10^{17} \div 10^{19} \text{ см}^{-3}$  в температурном диапазоне  $T = 6 \div 300 \text{ К}$ . Обнаружено, что во всем исследуемом концентрационном диапазоне низкотемпературные спектры описываются ВТ-моделью, т. е. доминирует люминесценция при рекомбинации свободных электронов с дырками, локализованными в состояниях «гауссова хвоста». Получены концентрационные зависимости подгоночных параметров: химического потенциала при  $T = 6 \text{ К}$   $\mu_{6\text{K}}$ ; сужения запрещенной зоны  $\Delta E_{g,6\text{K}}$ ; параметра, характеризующего протяженность «гауссова хвоста» валентной зоны  $n_{\text{6K}}$ . Обнаруженные немонотонные изменения величин химического потенциала, среднеквадратичной флуктуации примесного потенциала, сужения запрещенной зоны подтверждают ранее сделанные выводы и предположения [1–3], а именно: в области концентраций  $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3} < n_0 < 1.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  крупномасштабные флуктуации в распределении примесных дефектов приводят к искажению кристаллической структуры и, следовательно, закона дисперсии свободных носителей заряда. При дальнейшем увеличении  $n_0$  процесс диссоциации неоднородностей в распределении примесных дефектов гомогенизирует твердый раствор, а кулоновское взаимодействие между примесными дефектами, инициирует переход из состояния с неоднородным

распределением примесных дефектов в состояние с пространственно-коррелированным распределением в области концентраций  $n_0 > 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Богданова В.А., Давлеткильдеев Н.А., Семиколова Н.А., Сидоров Е.Н. Эффективная масса электронов в сильно легированном арсениде галлия при упорядочении примесных комплексов // ФТП. 2002. Т. 36. Вып. 4. С. 407–411.
- [2] Их же. Рассеяние электронов проводимости на пространственно коррелированной системе зарядов в сильно легированном GaAs:Te // ФТП. 2006. Т. 40. Вып. 2. С. 166–168.
- [3] Их же. Влияние пространственной корреляции примесных дефектов на оптическое поглощение с участием флуктуационных уровней в  $n^+$ -GaAs // Вестник Омского университета. 2005. № 2. С. 30–32.
- [4] Bebb H.B., Williams E.W. Semiconductors and Semimetals // N.Y.: Academic Press, 1972. P. 276.
- [5] Van Meighem P. Theory of band tails in heavily doped semiconductors // Reviews of Modern Physics. 1992. V. 64. P. 755.
- [6] Леванюк А.П., Осипов В.В. Краевая люминесценция прямозонных полупроводников // Успехи физических наук. 1981. Т. 133. Вып. 3. С. 427–477.
- [7] Casey H.C., Stern Jr., Stern F. // J. Appl. Phys. 1976. V. 47. P. 631.
- [8] Olego D., Cardona M. // Phys. Rev. B. 1980. V. 22. P. 886.
- [9] De-Sheng J., Machita Y., Ploog K., Queisser H.J. // J. Appl. Phys. 1982. V. 53. P. 999.
- [10] Borhgs G., Bhattacharyya K., Deneffe K., Van Mieghem P., Mertens R. // J. Appl. Phys. 1989. V. 66. P. 4381.
- [11] Lee N.-Y., Lee K.Y., Lee C., Kim J.-E., Park H.Y., Kwak D.-H., Lee H.-C., Lim H. // J. Appl. Phys. 1995. V. 78. P. 3367.
- [12] Вилькоцкий В.А., Доманевский Д.С., Жоховец С.В., Прокопья М.В. // ФТП. 1984. V. 18. P. 2193.
- [13] Szymyd D.M., Porro P., Majerfeld A., Lagomarsino S. // J. Appl. Phys. 1990. V. 68. P. 2367.
- [14] Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979.
- [15] Jain S.C., Roulston D.J. Solid State Electron. 1991. V. 34. P. 453.
- [16] Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. М.: Наука, 1977. С. 626.

Вестн. Ом. ун-та. 2009. № 2. С. 127–131.

УДК 621.315.592

**В.А. Богданова, Н.А. Давлеткильдеев, Н.А. Семиколенова, Е.Н. Сидоров**

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

### **ВЛИЯНИЕ КОРРЕЛЯЦИИ В РАСПРЕДЕЛЕНИИ ПРИМЕСНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ПАРАМЕТРЫ СВЯЗАННЫХ ПЛАЗМОН-ЛО-ФОНОННЫХ МОД В МОНОКРИСТАЛЛАХ GaAs:Te**

В настоящей статье представлены результаты дальнейших исследований эффектов пространственной корреляции в распределении примесных дефектов в сильно легированных монокристаллах GaAs:Te

*Ключевые слова:* арсенид галлия, сильное легирование, спектроотражение, плазмоны, фононы, затухание, корреляция ближнего порядка.

В настоящей статье представлены результаты дальнейших исследований эффектов пространственной корреляции в распределении примесных дефектов в сильно легированных монокристаллах GaAs:Te [1–3]. В работе [2] показано, что учет пространственной корреляции в распределении примеси позволяет объяснить экспериментальную концентрационную зависимость спектрального параметра коэффициента поглощения свободными носителями заряда, а именно снижение величины спектрального параметра при концентрации свободных носителей заряда  $n_0 > 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Эффект примесного упорядочения в работе [2] учитывался при помощи структурного фактора  $S(q)$  [4]:

$$S(q) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-iq(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \right\rangle. \quad (1)$$

Структурный фактор, который равен 1 при случайном распределении примеси, можно записать через функцию парной корреляции  $g(r)$  в следующем виде ( $S(q)$  и  $g(r)$  связаны преобразованием Фурье):

$$S(q) = 1 + \frac{4\pi n_0}{q} \int_0^{2k_F} r \sin(qr) [g(r) - 1] dr. \quad (2)$$

Как известно, коэффициент поглощения свободными носителями заряда  $\alpha$  непосредственно связан с действительной частью динамической проводимости [5].

С другой стороны, с точки зрения квазиклассики, реальная часть динамической проводимости определяется средним временем релаксации импульса электрона  $\langle \tau \rangle$  [5].

Часто для оценки среднего времени релаксации импульса свободных носителей заряда используют время жизни длинноволнового плазмона  $1/\gamma_p$  (где  $\gamma_p$  – величина затухания плазменных колебаний), так как различные процессы рассеяния, дающие вклад в  $\langle \tau \rangle$ , подобны тем,

которые дают вклад в  $\gamma_p$ . Поэтому представляет интерес исследование концентрационной зависимости параметров, описывающих плазменные колебания.

Известно, что длинноволновые плазмоны свободных носителей заряда в частично ионных полупроводниках могут взаимодействовать с инфракрасно (ИК) активными длинноволновыми продольными оптическими (ЛО) фононами в условиях, когда частота длинноволнового плазмона  $\omega_p$  близка к частоте однофононного резонанса.

Настоящая статья посвящена исследованию гибридных плазмон-ЛО-фононных мод в монокристаллах GaAs:Te в спектрах ИК-отражения.

В работе исследовались образцы монокристаллов GaAs:Te, полученных из стехиометрических навесок методом Чохральского из-под флюса, с концентрацией свободных носителей заряда в диапазоне  $4 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3} < n_0 < 3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , определенной из холловских измерений. Спектры отражения измерялись на ИК-Фурье-спектрометре IFS-113v в диапазоне волновых чисел  $\nu = 100 \div 700 \text{ см}^{-1}$  при комнатной температуре.

Диэлектрическая проницаемость, связанная с гибридными плазмон-ЛО-фононными модами в длинноволновом пределе с учетом вклада межзонных переходов, может быть представлена в виде суммы [6]:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)\omega_i^2}{\omega_i^2 - \omega^2 + i\gamma\omega} - \frac{\omega_p^2 \varepsilon_\infty}{\omega(\omega + i/\tau_p)}. \quad (3)$$

Здесь  $\omega_i$  – частота поперечных оптических колебаний,  $\gamma$  – величина затухания фононных колебаний,  $\varepsilon_s$  – низкочастотная диэлектрическая проницаемость,  $\varepsilon_\infty$  – высокочастотная диэлектрическая проницаемость.

Коэффициент отражения  $R(\omega)$  при угле падения, близком к нормальному, однозначно связан с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon(\omega)$  по формулам:

$$R(\omega) = \frac{[n(\omega) - 1]^2 + k^2(\omega)}{[n(\omega) + 1]^2 + k^2(\omega)}, \quad (4)$$

$$\varepsilon_1(\omega) = n^2 - k^2, \quad (5)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 2nk, \quad (6)$$

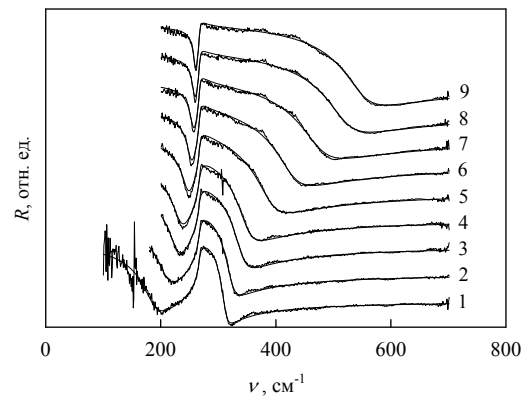
где  $n$  – показатель преломления,  $k$  – коэффициент экстинкции.

На рисунке 1 показаны экспериментальные и теоретические спектры отра-

жения образцов GaAs:Te, рассчитанные с использованием соотношений (3)–(6).

Процедура подгонки теоретических и экспериментальных спектров проводилась методом наименьших квадратов с использованием подгоночных параметров:  $\omega_p$ ,  $\omega_i$ ,  $\gamma$ ,  $\gamma_p$ ,  $\varepsilon_s$ ,  $\varepsilon_\infty$ .

На рисунках 2, 3 представлены концентрационные зависимости параметров  $\gamma$ ,  $\gamma_p$  (в работе не обнаружена зависимость параметров  $\omega_i$ ,  $\varepsilon_s$ ,  $\varepsilon_\infty$  от концентрации свободных носителей заряда  $n_0$ , величина параметра  $\omega_p$  растет с ростом  $n_0$  как корневая функция).



**Рис. 1.** Экспериментальные и теоретические спектры отражения образцов GaAs:Te. Расчет теоретических спектров проводился с использованием соотношений (3)–(6);

$n_0, \text{ см}^{-3}$ : 1 –  $4.5 \cdot 10^{17}$ , 2 –  $5.8 \cdot 10^{17}$ , 3 –  $7.3 \cdot 10^{17}$ ,  
4 –  $8.5 \cdot 10^{17}$ , 5 –  $1.2 \cdot 10^{18}$ , 6 –  $1.5 \cdot 10^{18}$ , 7 –  $2 \cdot 10^{18}$ ,  
8 –  $2.6 \cdot 10^{18}$ , 9 –  $2.7 \cdot 10^{18}$

Из рисунка 2 видно, что коэффициент затухания фононных колебаний при  $n_0 > 10^{18} \text{ см}^{-3}$  начинает уменьшаться и при  $n_0 \geq 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  достигает значений, характерных для нелегированных монокристаллов GaAs ( $\sim 2 \text{ см}^{-1}$ ). Рисунок 3 демонстрирует обратную тенденцию концентрационной зависимости коэффициента затуханий плазменных колебаний, т. е. значение  $\gamma_p$  возрастает и при  $n_0 \geq 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  имеет максимальную величину.

В работе [7] выделены следующие каналы затухания связанных плазмон-фононных мод:

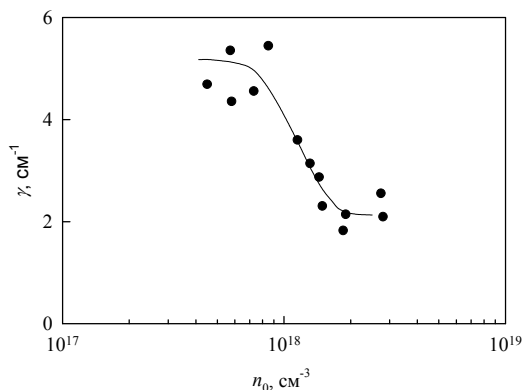
1) распад на 2 фонона – ангармоническое затухание;

2) вязкость (текучесть), дающая вклад в диэлектрические потери;

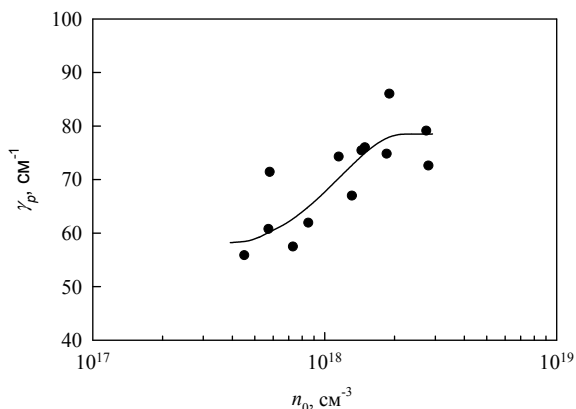
3) эмиссия одночастичных электронных возбуждений – затухание Ландау;



- 4) эмиссия двух электрон-дырочных пар<sup>1</sup>;  
5) столкновительное затухание.



**Рис. 2.** Зависимость величины затухания фонных колебаний от концентрации свободных носителей заряда



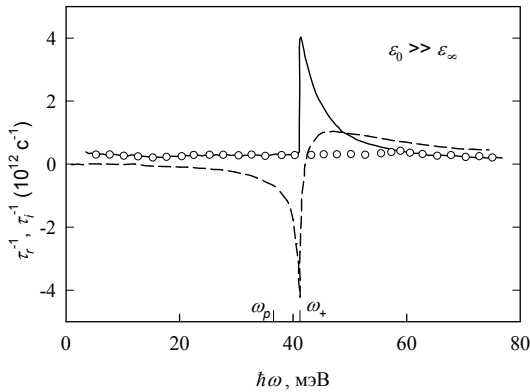
**Рис. 3.** Зависимость величины затухания плазменных колебаний от концентрации свободных носителей заряда

Необходимо отметить, что корректный учет механизмов затухания как фононов, так и плазмонов очень сложен. В элементарной трактовке движения свободных электронов, которая используется для настоящего анализа, коэффициент затухания (как фононов, так и плазмонов) выступает как чисто феноменологический параметр, используемый для более адекватного описания спектральной зависимости коэффициента отражения. Более высокие значения подгоночного параметра  $\gamma_p$  при  $n_0 \geq 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  в исследуемых образцах отражают более сглаженный характер спектральной зависимости  $R(\omega)$  в области

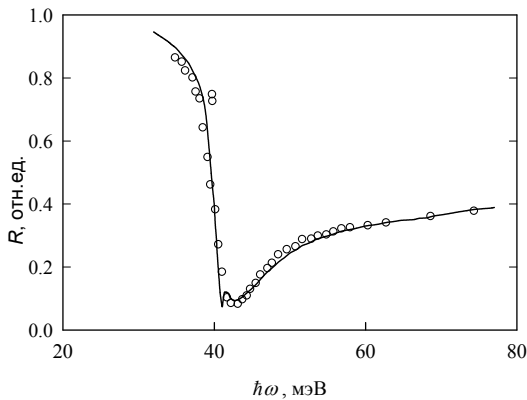
плазменного края (при  $\omega = \omega_p$ ) и в области спектрального минимума (при  $\omega \geq \omega_p$ ).

Работа [2] была посвящена изучению влияния корреляции в распределении примесных дефектов на поглощение свободными носителями заряда, обусловленного рассеянием на них. Речь шла о поглощении электромагнитного излучения за счет индивидуальных возбуждений. В спектральной области  $\omega \geq \omega_p$  нужно учитывать еще поглощение за счет плазменных возбуждений с ненулевым волновым вектором. Теоретическое исследование поглощения, связанного с генерацией таких плазмонов [4], показало, что этот механизм важен в полупроводниках с высокой статической диэлектрической проницаемостью и при высокой концентрации свободных носителей заряда. Причем в работе [8] показано, что в случае доминирования рассеяния на ионах примеси в полярных полупроводниках коллективное поглощение доминирует над одночастичным. На рисунке 4 представлены результаты расчетов работы [8] для полупроводника со значительным вкладом ионной связи. В работе [8] также показано, что данный механизм значительно менее эффективен в полупроводниках с относительно малым вкладом ионной связи, в частности в GaAs. Тем не менее, экспериментальные исследования поглощения свободными носителями заряда в монокристаллах GaAs:Te [9–11] показали заметный вклад данного механизма в коэффициент поглощения при  $\omega \geq \omega_p$ .

На рисунке 5 показано, как проявляется вклад плазменного поглощения в спектральной зависимости коэффициента отражения [8]. Расчетная кривая показывает узкий провал, локализованный на частоте  $\omega \approx \omega_p$ . Этот провал обусловлен резким изменением частотных зависимостей действительной и мнимой частей обратной времени релаксации в области частоты  $\omega_p$  исключительно коллективным процессом. Этот провал не виден в представленных экспериментальных спектрах, поскольку его ширина ( $\sim 0.5 \text{ эВ}$ ) не превышает разрешения спектрофотометра, обычно используемого для этих целей.



**Рис. 4.** Спектральные зависимости действительной  $\tau_r^{-1}(\omega)$  (сплошная линия) и мнимой  $\tau_i^{-1}(\omega)$  (штриховая линия) частей обратного времени релаксации импульса за счет рассеяния на длинноволновых возбуждениях изотропной плазмы [8]. Открытые кружки –  $\tau_r^{-1}(\omega)$  за счет одночастичных возбуждений



**Рис. 5.** Спектральная зависимость коэффициента отражения [8]

Сплошная линия – расчет, кружки – экспериментальные значения для образцов PbSe при  $T=30\text{K}$

В работе [8] отмечается, что этот провал может быть гораздо менее выраженным в случае подавления плазменных мод. И тогда будет наблюдаться более сглаженный минимум в  $R(\omega)$  в области плазменной частоты.

В работе [12] делается предположение, что эффективность генерации плазмонов в поглощении свободными носителями заряда должна подавляться для упорядочивающихся систем, так как появление порядка в распределении заряженных дефектов уменьшает вероятность рассеяния свободных носителей заряда для малых изменений момента импульса, т. е. в той области изменения момента импульса, где плазмоны являются доминирующими возбуждениями, ответственными за поглощение света.

Было сделано предположение, что плазмоны, являющиеся хорошо определяемыми коллективными возбуждениями электронного газа в диапазоне малых волновых векторов, могут служить чувствительным инструментом при изучении пространственной корреляции кулоновских центров.

В работе [12] было проведено исследование влияния пространственной корреляции зарядов на обратное время релаксации в окрестности частоты  $\omega_p$  для системы HgSe:Fe в режиме смешанной валентности (при концентрации железа больше  $5 \cdot 10^{18} \text{см}^{-3}$ ). Описание пространственной корреляции зарядов базировалось на моделировании методом Монте-Карло, который позволяет изучать влияние различных условий на процесс упорядочения. Авторы работы [12] смогли рассчитать функцию парной корреляции  $g(R)$  и из нее структурный фактор  $S(q)$ . Частотная зависимость обратного времени релаксации определялась с использованием соотношения:

$$\frac{1}{\tau(\omega)} = \frac{m^* E_F}{6\pi^2 \hbar^3} \int_0^{2k_F} |V(q)|^2 S(q) q^3 dq, \quad (7)$$

где  $V(q)$  – Фурье-образ примесного потенциала. Вкладом рассеяния на фононах авторы [12] пренебрегли, так как в этом частотном диапазоне он практически не зависит от энергии. Обнаружено, что при случайном распределении примеси в области плазменной частоты обратное время релаксации импульса имеет ярко выраженное увеличение. Когда же учитывается пространственная корреляция зарядов на примесных центрах Fe, рост этой зависимости значительно подавляется.

Все вышеизложенное позволяет связать наблюдаемое увеличение значения подгоночного параметра  $\gamma_p$  в исследуемом материале при  $n_0 \geq 2 \cdot 10^{18} \text{см}^{-3}$  (указывающее на более сглаженный характер спектра коэффициента отражения в области плазменной частоты) с подавлением генерации плазмонов вследствие коррелированного распределения примесных дефектов.

Что касается параметра  $\gamma$ , то основным механизмом затухания фононных мод является ангармонический механизм ( $\gamma \sim 1.5 \text{ см}^{-1}$ ). Помимо ангармонического механизма, вклад в  $\gamma$  может вносить затухание фононов вследствие их рассеяния

на дефектах. Наблюдаемое уменьшение параметра  $\gamma$  в исследуемых образцах при  $n_0 \geq 2 \cdot 10^{18} \text{см}^{-3}$  можно связать с уменьшением эффективности рассеяния фононов на дефектах, однако это предположение не может являться очевидным и требует дальнейших исследований.

Таким образом, проведено исследование коэффициента отражения в монокристаллах GaAs:Te в спектральной области, где в поглощении доминируют коллективные возбуждения. Обнаружено, что значение параметра затухания плазменных колебаний  $\gamma_p$  при  $n_0 \geq 10^{18} \text{см}^{-3}$  возрастает и при  $n_0 \geq 2 \cdot 10^{18} \text{см}^{-3}$  оно максимально. Сделано предположение, что наблюдаемое увеличение значения подгоночного параметра  $\gamma_p$  обуславливает корреляция ближнего порядка в распределении примесных дефектов (структурный фактор  $S(q) \neq 1$ ).

#### ПРИМЕЧАНИЯ

Термин «дырка» в этом случае означает вакансию ниже уровня Ферми.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Богданова В.А., Давлеткильдеев Н.А., Семиколонова Н.А., Сидоров Е.Н. Эффективная масса электронов в сильно легированном арсениде галлия при упорядочении примесных комплексов // ФТП. 2002. Т. 36. Вып. 4. С. 407–411.
- [2] Их же. Рассеяние электронов проводимости на пространственно коррелированной системе зарядов в сильно легированном GaAs:Te // ФТП. 2006. Т. 40. Вып. 2. С. 166–168.
- [3] Их же. Влияние пространственной корреляции примесных дефектов на оптическое поглощение с участием флуктуационных уровней в  $n^+$ -GaAs // Вестник Омского университета. 2005. № 2. С. 30–32.
- [4] Jerzy Mycielski, Andrzej Mycielski. Free-carrier absorption by photon-ionized-impurity-plasmon processes in polar semiconductors // Phys.Rev. B. 1978. V. 18. № 4. P. 1859–1867.
- [5] Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. М.: Наука, 1977. С. 626.
- [6] Уханов Ю.И. Оптические свойства полупроводников. М.: Наука, 1977. С. 366.
- [7] Kozorezov A.G., Wigmore J.K., M. Giltrow. Decay of coupled plasmon-phonon modes in heavily doped semiconductors // J.Phys.: Condens. Matter. 1997. V. 9. P. 4863–4874.
- [8] Stefan Goettig. Optical absorption by electron plasma in multivalley polar semiconductors with impurities // J.Phys.C.: Solid State Phys. 1984. V. 17. P. 4463–4478.
- [9] Szuszkiewicz W., Witowski A.M., Karpierz K. Transmission and reflectivity measurements in highly doped GaAs in the infrared // Acta Physica Polonica. 1986. V. A69. № 5. P. 893–896.
- [10] Karpierz K., Szuszkiewicz W., Witowski A.M. Far-infrared optical properties of highly doped n-GaAs // Acta Physica Polonica. 1987. V. A71. № 2. P. 311–313.
- [11] Son Vu Hai, Karpierz K., Szuszkiewicz W. Free-carrier absorption in GaAs at 77K and 300K // Acta Physica Polonica. 1988. V. A73. № 3. P. 353–356.
- [12] Szuszkiewicz W., Sobkowicz P., Witkowska B., Bardyszewski W., Julien C., Balrnfnski M. Influence of impurity charge correlation on free-carrier absorption // Acta Physica Polonica. 1993. V. A84. № 3. P. 323–327.

### **ВЛИЯНИЕ УРОВНЯ ЛЕГИРОВАНИЯ НА СОСТАВ И СТРУКТУРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ МИКРОДЕФЕКТОВ В N<sup>+</sup>-GaAs**

В работе исследовались монокристаллы GaAs, легированные теллуrom (GaAs:Te), с концентрацией свободных носителей заряда  $n^0 = 5 \cdot 10^{17} \div 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  (соответствующей концентрации примеси), выращенные методом Чохральского.

*Ключевые слова:* арсенид галлия, сильное легирование, микродефекты, атомно-силовая микроскопия, рентгеновская дифракция, фазовый состав.

Несмотря на накопленный богатый экспериментальный материал, вопрос о природе микродефектов, наблюдаемых в сильно легированных кристаллах полупроводниковых соединений A<sup>III</sup>B<sup>V</sup>, до сих пор остается нерешенным.

Согласно результатам электронно-микроскопических исследований, основными типами микродефектов в кристаллах полупроводниковых соединений A<sup>III</sup>B<sup>V</sup> являются: 1) относительно крупные (размером 0,1–1 мкм) дефекты упаковки, как однослойные, так и многослойные; 2) мелкие (размером от нескольких единиц до десятков нанометров) призматические дислокационные петли, как полные, так и частичные; 3) мелкие частицы выделений, расположенные обычно в площади дефекта упаковки или на дислокационной петле, ограничивающей его. Точно не установлено, из каких атомов – собственных или примесных – состоят внедренные слои дефектов упаковки и связанные с ними частицы выделений. По вопросу о природе наблюдаемых микродефектов и о возможных механизмах их образования в литературе имеются различные, порой весьма противоречивые мнения [1].

Большинство авторов полагают, что состав внедренных слоев и частиц выделений в GaAs, легированном элементами VI группы (Te, Se, S), близок к фазе Ga<sub>2</sub>(Te, Se, S)<sub>3</sub> [1]. Об этом свидетельствуют результаты анализа дифракционного контраста на электронно-микроскопических изображениях микродефектов. Однако прямые данные о составе микродефектов отсутствуют, поскольку на микродифрактограммах не удавалось наблюдать дополнительных рефлексов, связанных с ними.

Настоящая статья посвящена исследованию фазового состава и структурных параметров микродефектов в монокристаллах GaAs при различных уровнях легирования теллуrom.

В работе исследовались монокристаллы GaAs, легированные теллуrom (GaAs:Te), с концентрацией свободных носителей заряда

$n_0=5 \cdot 10^{17} \div 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  (соответствующей концентрации примеси), выращенные методом Чохральского из расплава стехиометрического состава из-под слоя флюса в направлении  $\langle 100 \rangle$ .

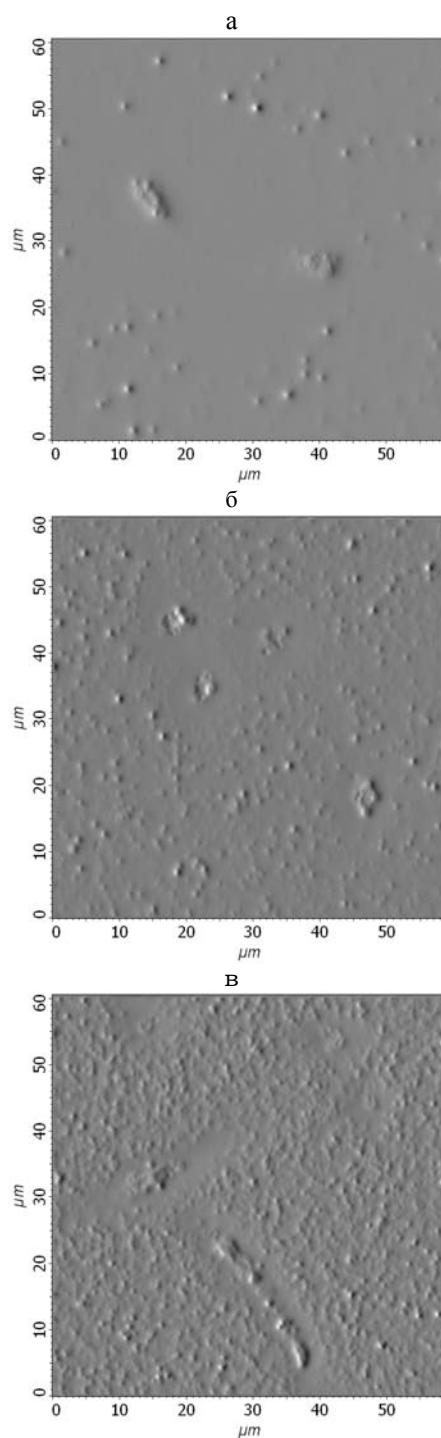
Исследуемые образцы вырезались из слитка в виде дисков толщиной 2 мм и специально ориентировались вдоль плоскости (100). Отклонение поверхности образцов от плоскости (100) составляло не более  $1^\circ$ . После ориентации поверхность образцов подвергалась стандартной обработке.

Выявление микродефектов на поверхности монокристаллов GaAs:Te производилось методом избирательного химического травления в разбавленном растворе Сиртла при дополнительном освещении (метод DSL-травления) [2]. Травление образцов осуществлялось в растворе состава HF:CrO<sub>3</sub>:H<sub>2</sub>O (1:5:6) в течение 5 минут при освещении галогеновой лампой [2].

Морфология поверхности образцов и отдельных фигур травления исследовалась методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) на сканирующем зондовом микроскопе Solver PRO в полуконтактном режиме сканирования на воздухе, с использованием зондового датчика NSG10.

Исследование фазового состава и структурных параметров микродефектов проводилось методом рентгенодифракционного анализа на дифрактометре Shimadzu XRD-6000 с использованием CuK<sub>α</sub>-излучения.

На рисунке 1 представлены обзорные АСМ-изображения поверхности образцов с различными концентрациями свободных носителей заряда, которые демонстрируют характерные изменения дефектной структуры монокристаллов GaAs:Te с ростом уровня легирования. Анализ АСМ-изображений показывает, что все фигуры травления являются бугорками. Крупные протяженные фигуры травления представляют собой возвышение (бугорок), поверхность которого покрыта отдельными мелкими бугорками (микробугорками). Мелкие фигуры травления являются одиночными микробугорками.



**Рис. 1.** АСМ-изображение фигур травления на поверхности монокристаллов GaAs:Te с различной концентрацией свободных носителей заряда: а –  $10^{18} \text{ см}^{-3}$ , б –  $1,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , в –  $2,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$

С ростом уровня легирования размеры бугорков и микробугорков уменьшаются (рис. 1). Особенностью распределения фигур травления на поверхности образца с концентрацией  $n_0=10^{18} \text{ см}^{-3}$  явля-

ется отсутствие отдельных микробугорков на расстоянии около 10–15 мкм вокруг бугорка (рис. 1а). С увеличением уровня легирования размеры зон обеднения микробугорками уменьшаются (рис. 1 б, в).

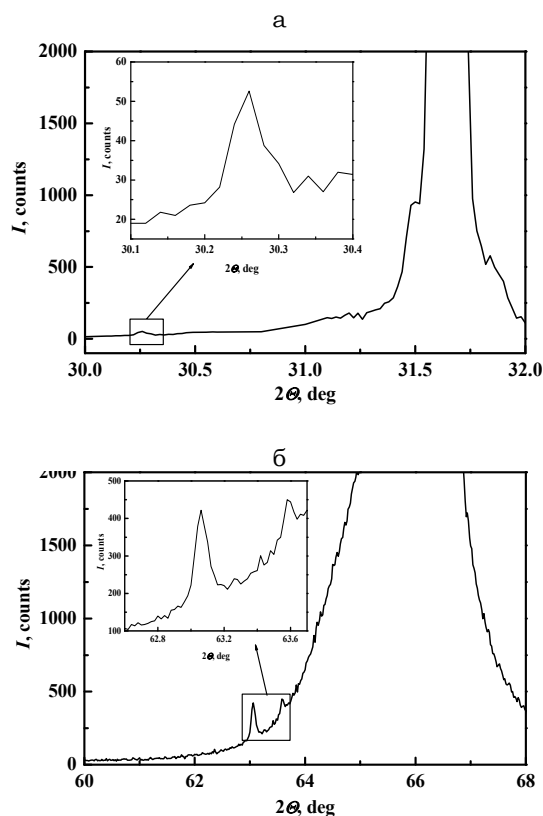
Согласно выводам авторов методики выявления дефектов методом DSL-травления [2], крупные фигуры травления (бугорки, покрытые микробугорками) образуются в местах выхода дислокаций на поверхность кристалла. Ростовые дислокации в исследуемом материале имеют сложную конфигурацию, напоминающую клубок, окруженный облаком дислокационных петель Франка, залегающих в плоскости (111). Дислокационные петли Франка ограничивают дефекты упаковки внедренного типа, состоящие из одного или нескольких внедренных слоев [3]. Комплексный дефект, содержащий ростовую дислокацию и дислокационные петли, имеет характерные размеры  $2 \div 6$  мкм [2], что хорошо согласуется с размерами крупных фигур травления на АСМ-изображениях (рис. 1). Кроме того, плотность крупных фигур травления по порядку величины соответствует плотности ростовых дислокаций в исследуемом материале [4].

Мелкие фигуры травления (микробугорки) образуются в местах выхода на поверхность одиночных дислокационных петель Франка. Поперечные размеры микробугорков ( $0,2 \div 1$  мкм) соответствуют характерным размерам дислокационных петель, приведенным в литературе [1–3; 5; 6]. Величина плотности микробугорков согласуется с величиной плотности дислокационных петель, полученной в работах [3; 6].

Таким образом, в исследуемых кристаллах выявляются лишь микродефекты одного типа – дефекты упаковки внедренного типа, окруженные дислокационными петлями Франка. Микродефекты типа мелких призматических дислокационных петель в исследуемых образцах не наблюдались, поскольку их формирование происходит при концентрациях примеси, превышающих  $8 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup> [6; 7]. Мелкие частицы выделений по причине малости размера и расположения внутри дефектов упаковки данным методом не выявляются.

Для анализа фазового состава и структурных параметров микродефектов проведена регистрация рентгенов-

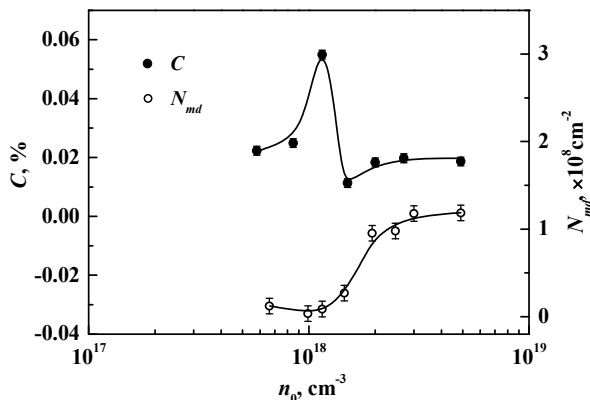
ских дифрактограмм в области углов, соответствующих отражениям от плоскостей (200) и (400) матрицы GaAs и предполагаемой фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>. На рисунке 2 представлены фрагменты дифрактограмм монокристаллов GaAs:Te в области указанных углов. На вставках показаны обнаруженные рентгеновские линии от плоскостей (200) и (400) фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, что подтверждает присутствие указанной фазы в монокристаллах GaAs:Te.



**Рис. 2.** Типичные дифрактограммы монокристаллов GaAs:Te в области отражения от плоскостей (200) (а) и (400) (б) GaAs: на вставках показаны рентгеновские линии от плоскостей (200) и (400) фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>

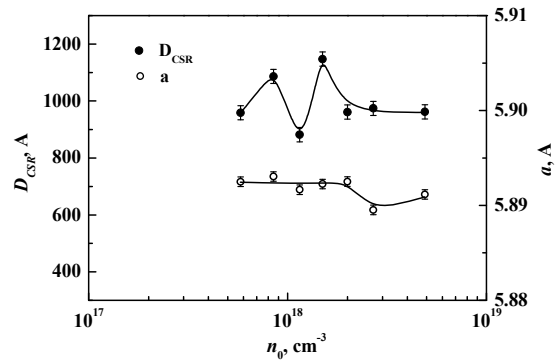
На основе сопоставления интегральных интенсивностей отражения от фазы и матрицы проведена оценка относительного объемного содержания Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>. На рисунке 3 представлена концентрационная зависимость объемного содержания фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>. Содержание фазы по порядку величины соответствует содержанию Te в исследуемых образцах. При концентрациях  $n_0 > 1,15 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup> наблюдается нарушение монотонного роста объемного содержания фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> с увеличением концентрации

свободных носителей заряда, в то время как плотность микродефектов, определенная на основе анализа АСМ-изображений, растет во всем исследуемом концентрационном интервале (рис. 3). Следует отметить, что вклад в рентгеновское отражение от фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> дают не только выявляемые DSL-травлением микродефекты типа дефектов упаковки, но и невыявляемые мелкие частицы выделений, расположенные в площади дефекта упаковки или на дислокационной петле, ограничивающей его. Согласно данным электронномикроскопических исследований [1; 3; 6], плотность частиц выделений на порядок превышает плотность дефектов упаковки, с ростом уровня легирования плотность и тех, и других пропорционально увеличивается. Поэтому уменьшение объемной доли фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> при  $n_0 > 1,15 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  не может быть связано с уменьшением плотности микродефектов.



**Рис. 3.** Концентрационная зависимость относительного объемного содержания фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> и плотности микродефектов в монокристаллах GaAs:Te

Анализ факторов физического уширения рентгеновских линий показал, что ширина линий отражения от фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> обусловлена в основном малостью областей когерентного рассеяния (ОКР). На основе уравнения Шерера была проведена оценка размеров ОКР. На рисунке 4 представлены концентрационные зависимости размеров ОКР и периода решетки фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>.



**Рис. 4.** Концентрационная зависимость размеров ОКР и периода решетки фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> в монокристаллах GaAs:Te

Наблюдается немонотонная концентрационная зависимость размеров ОКР фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, характеризующаяся в начале ростом, а затем уменьшением размеров ОКР. Средний размер ОКР при различных концентрациях составляет порядка 1000 Å, что в два раза превышает средний размер частиц выделений, полученный из анализа электронно-микроскопических изображений [3; 6; 8]. Причиной данного несоответствия размеров ОКР может быть малая интенсивность и, соответственно, узость рентгеновских линий от фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>.

Период решетки фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> с ростом концентрации примеси в GaAs претерпевает незначительные изменения, лежащие в пределах ошибки определения, за исключением области больших концентраций, где он несколько уменьшается.

Комплекс полученных результатов можно объяснить следующим образом. Несоответствие увеличения плотности микродефектов резкому снижению содержания фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> при  $n_0 > 1,15 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  свидетельствует о разориентации кристаллитов фазы относительно матрицы GaAs. Это может быть обусловлено интенсивным локальным пересыщением объема GaAs вокруг микродефектов вакансиями, образующимися в процессе формирования и роста внедренного слоя. На эту же причину указывают авторы работы [6] при объяснении отличия экспериментально наблюдаемого параметра несоответствия решеток GaAs и Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> от расчетного при анализе муарового контраста на электронномикроскопических изображениях. Этой

же причиной обусловлено уменьшение размеров ОКР с ростом уровня легирования. Локальное пересыщение вакансиями и, соответственно, сокращение количества свободных атомов для достройки решетки препятствует дальнейшему росту внедренного слоя. При этом рост объемного содержания фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> в основном обеспечивается увеличением плотности микродефектов.

Таким образом, получены следующие основные результаты:

- методом избирательного DSL-травления выявлены микродефекты структуры монокристаллов GaAs:Te;

- на основе сравнительного анализа литературных данных по электронной микроскопии и данных по морфологии фигур травления, полученных методом атомно-силовой микроскопии, установлено соответствие фигур травления микродефектам кристаллической структуры монокристаллов GaAs:Te – дислокационным петлям Франка, ограничивающим дефекты упаковки внедрения;

- методом рентгенодифракционного анализа обнаружено присутствие в монокристаллах GaAs:Te фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>. На основе анализа дифрактограмм определены относительное объемное содержание, размеры ОКР и период ре-

шетки фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, получены немонотонные концентрационные зависимости этих параметров;

- немонотонное поведение концентрационных зависимостей объемного содержания и структурных параметров фазы Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> объясняется локальным пересыщением объема арсенида галлия вокруг микродефектов вакансиями, образующимися в процессе роста внедренного слоя.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Мильвидский М.Г., Освенский В.Б. Структурные дефекты в монокристаллах полупроводников. М.: Металлургия, 1984. С. 233.
- [2] Weyher J.L., J. van de Ven // J. Cryst. Growth. 1986. V. 78. P. 191.
- [3] Моргулис Л.М., Освенский В.Б., Мильвидский М.Г. // ФТТ. 1974. Т. 16. С. 223.
- [4] Богданова В.А., Давлеткильдеев Н.А., Нукунов М.М., Семиколенова Н.А. // ФТТ. 2008. Т. 50. С. 236.
- [5] Laister D., Jenkins G.M. // J. Mater. Sci. 1968. V. 3. P. 584.
- [6] Моргулис Л.М., Мильвидский М.Г., Освенский В.Б. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1974. Т. 38. С. 1447.
- [7] Verner V.D., Maksimov S.K., Nichugovskii D.K. // Phys. Stat. Sol. (a). 1976. V. 33. P. 755.
- [8] Hutchinson P.W., Dobson P.S. // Phil. Mag. 1974. V. 30. P. 65.



Вестн. Ом. ун-та. 2009. № 2. С. 137–140.

УДК 519.876.2

**А.В. Мамонов**

ЗАО «Проектный институт реконструкции и строительства объектов нефти и газа»

**П.В. Прудников**

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

## **МОДЕЛЬ ПОСТРОЕНИЯ КОРПОРАТИВНОЙ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ**

Представлена модель построения корпоративной информационной системы (КИС) универсальной открытой архитектуры. Продемонстрирована возможность использования КИС для управления процессами производства произвольной организации.

*Ключевые слова:* корпоративная информационная система, система управления производством, открытая архитектура.

Любая деятельность предприятия может быть представлена в виде совокупности проектов, осуществление которых приводит к выпуску продукции или достижению необходимых результатов. В современных условиях сильной конкуренции производителей основными проблемами при выполнении проектов на крупных предприятиях являются: обеспечение контроля над ходом выполнения проекта в рамках жестких внешних условий и сроков, а также организация оптимального взаимодействия большого числа участников проекта. Решение данных проблем наиболее эффективно может быть осуществлено с использованием современных средств коммуникаций и соответствующего программного обеспечения. В настоящее время крупные организации и структуры административного управления, особенно территориально распределенные, осознают потребность в усовершенствовании процессов управления и производства. Проблема эффективного управления проектами может быть решена с помощью внедрения в организации корпоративной информационной системы (КИС), которая должна охватывать все сферы деятельности организации и объединять их в единое информационное пространство. В данной статье представлена модель построения КИС универсальной открытой архитектуры, основанная на концепции контент-ориентированного хранилища данных.

Корпоративная информационная система должна обеспечивать решение следующих проблем:

- организацию единого информационного пространства для структурных подразделений, непосредственно выполняющих работы по проекту;
- хранение и обеспечение безопасного доступа к электронной документации по проектам;
- корпоративное планирование работ;

- управление процессом выполнения работ (непрерывный контроль с возможностью развития в области анализа и поддержки принятия решений);
- интеграцию задач вспомогательных подразделений в общий процесс выполнения работ;
- эффективное использование ресурсов организации и оптимизацию затрат при выполнении проектов.

Традиционный подход предполагает использование набора отдельных узкоспециализированных программных средств для реализации вышеуказанных задач. Необходимо отметить, что такой подход приводит к проблемам взаимодействия отдельных программных продуктов, как правило, от разных компаний-разработчиков и в целом сильно снижает эффект от применения информационных технологий в организации.

Существуют следующие классы программного обеспечения (ПО), предназначенные для решения задач по организации процесса производства в целом:

- ERP – Enterprise Resource Planning (комплекс интегрированных систем, позволяющих создать единое информационное пространство для автоматизации планирования, учета, контроля и анализа всех основных бизнес-операций над ресурсами предприятия: производство, снабжение, хранение, финансы, продажа (сбыт) и т. д.) [1; 2];
- CRM – Customer Relationships Management (управление взаимоотношениями с клиентами) [2];
- PLM – Product Lifecycle Management (система управления жизненным циклом продукции) [3].

В рамках вышеперечисленных подходов декларируется решение всех проблем организации. Однако практика показывает определенную узкую направленность для каждой информационной системы подобного типа. Для реализации всех задач организации требуется более общий подход. Недостатком существующих систем является к тому же чрезвычайно высокая стоимость подготовки инфраструктуры, первоначальной закупки ПО, ее внедрения и сопровождения.

В данной статье рассмотрена модель построения КИС, основанная на следующих принципах:

1) универсальность модели данных – модель данных позволяет хранить в семантически связанном виде произвольную информацию;

2) возможность управления метаданными системы без программирования – предлагаемая модель обеспечивает возможность развития и настройки системы без знания языков программирования;

3) наличие системы управления правами доступа – модель содержит механизмы авторизации и аутентификации с использованием внешних центров корпоративного доступа (OpenLDAP, eDirectory, ActiveDirectory);

4) высокая масштабируемость решения – модель может функционировать на широком спектре программно-аппаратных платформ, начиная с наиболее распространенных систем на основе MS Windows и Intel вплоть до высокопроизводительных и отказоустойчивых кластеров на основе SUN Solaris и UltraSPARC 25K или IBM AIX и PowerX Cell;

5) гибкость аппаратных и программных средств – в зависимости от потребностей организации можно использовать соответствующий набор программных и аппаратных средств, обеспечивая возможность построения катастрофоустойчивых решений и удовлетворения требований ГОСТ по защите информации;

6) использование открытых стандартов – при реализации ПО в соответствии с данной моделью используются только открытые стандарты (SQL, JSP, XML, AJAX, HTML), получившие широкое распространение;

7) использование бесплатных платформ – инфраструктура решения может быть построена на основе бесплатного ПО, при этом в качестве операционной системы (ОС) может быть использовано семейство ОС Linux, в качестве системы управления базами данных (СУБД) – СУБД Oracle XE [4] или PostgreSQL [5], в качестве сервера приложений (СП) – любой СП, совместимый со спецификациями J2EE [6].

Одной из ключевых проблем построения КИС является обеспечение информационной безопасности и соответствие ее стандартам РФ в этой области. Представленная в данной статье модель КИС предполагает реализацию следующих основ-

ных принципов обеспечения информационной безопасности:

- авторизация и аутентификация пользователей через LDAP-сервер;
- использование протокола HTTPS для шифрования web-трафика;
- проверка контрольных сумм md5 для документов (или использование сертифицированной электронно-цифровой подписи);
- система управления правами доступа (СУПД) интегрирована со штатным расписанием организации, доступ к информации предоставляется на основе иерархии;
- специальная технология доступа к объектам СУБД, исключающая прямой доступ к данным (минуя СУПД);
- в системе хранится полная история изменений данных;
- права доступа определяют представление данных;
- возможность произвольного объединения в группы доступа.

Основой КИС является хранилище данных (DataWarehouse), предназначенное для хранения как самих данных, так и их описаний (метаданные). Структура метаданных представлена на рисунке 1.

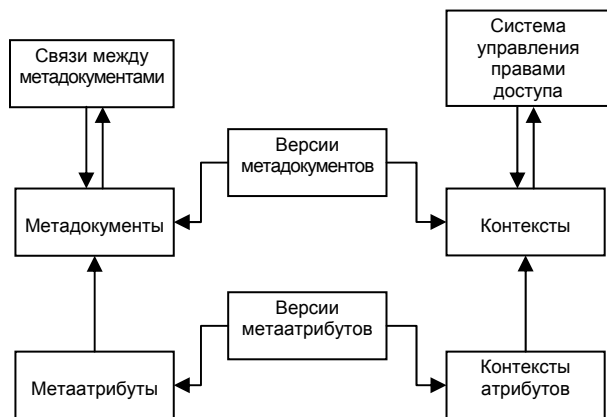


Рис. 1. Структура метаданных

Организация метаданных позволяет реализовать классические схемы отношений между документами КИС – одного-к-одному, одного-ко-многим, многих-ко-многим – в соответствии с теорией реляционных баз данных.

Базовым объектом системы хранения данных является документ произвольной структуры. Структура документа состоит

из произвольного набора атрибутов следующих типов:

- ссылка на другой документ;
- строка;
- число;
- дата;
- файл.

Данная организация хранения информации позволяет реализовать универсальный механизм поиска информации по всем атрибутам (документам) и даже по содержимому файлов в случае применения СУБД, обладающей функцией полнотекстового поиска.

Под объектом КИС будем понимать произвольную совокупность документов КИС, объединенных описанными в метаданных связями. Объектом КИС может являться простая служебная записка, информация по сотруднику организации, содержание всего проекта и т. д. Базовая структура КИС представлена на рисунке 2.

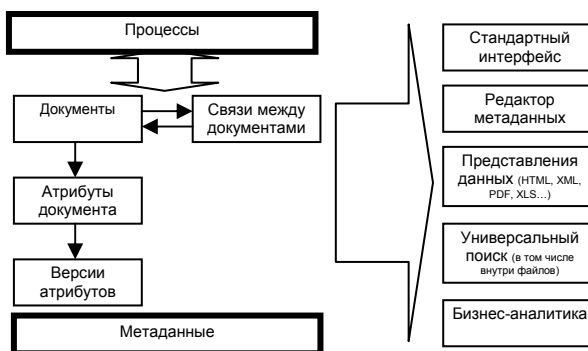


Рис. 2. Базовая структура КИС

Предложенная модель позволяет реализовать проектный подход ко всей деятельности организации. Она дает возможность вести портфель проектов от уровня стратегического планирования развития организации до уровня детализации конкретных работ, их исполнителей, сроков выполнения, а также других ресурсов. Это может быть как проект постройки Балтийской трубопроводной системы, так и проект реализации учебного процесса на кафедре или в университете в целом.

Для реализации процессного подхода к выполнению работ по проектам в КИС необходимо также использовать подсистему управления потоком работ (WorkFlow), включающую следующие функции:

- задание маршрутов прохождения объектов КИС без программирования;
- существование типовых элементов WorkFlow – согласование, утверждение, уведомление;
- использование шаблонов маршрутов и документов.

Пример типового элемента WorkFlow подсистемы управления «согласование» представлен на рисунке 3.

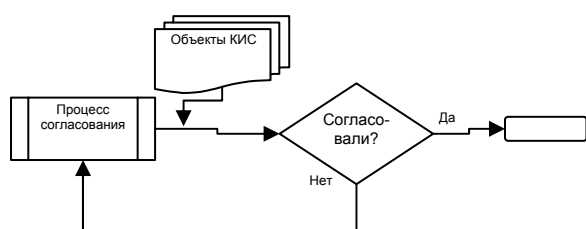


Рис. 3. Пример типового элемента WorkFlow

Связующим звеном КИС является подсистема электронного документооборота, объединяющая в себе как функции внешней переписки организации, так и внутреннего документооборота. Это позволяет проследить путь любого документа от его создания исполнителем до утверждения руководством и отправки во внешние организации с контролем прохождения на каждом этапе.

В заключение отметим, что в данной статье описаны принципы построения универсальной модели корпоративной информационной системы с возможностью её настройки под конкретные при-

кладные задачи. Реализованная на основе этой модели КИС может быть использована в различных сферах деятельности.

Отличительной особенностью данной модели является единый подход к хранению и обработке всех данных организации вне зависимости от потребителей информации с последующим представлением информации в необходимой каждому потребителю форме. В реализуемой модели возможна пересылка сложноструктурированных объектов КИС с требуемой степенью детализации любому потребителю с учетом прав доступа. Описанный подход к проектированию КИС обеспечивает высокую надежность и безопасность хранения информации.

На основании предложенной модели был реализован пилотный проект создания КИС в ЗАО «ПИРС» с последующим применением в нефтегазовой сфере. В результате был выявлен высокий экономический эффект от внедрения данной модели корпоративной информационной системы.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] SAP. <http://www.sap.com>
- [2] MS Dynamics. [http://www.microsoft.com/dynamics/](http://www.microsoft.com/dynamics;); Oracle Applications. <http://www.oracle.com>
- [3] Dassault Systemes. <http://www.3ds.com/>; Parametric Technology Corporation. <http://www.ptc.com>
- [4] Oracle XE. <http://www.oracle.com/technology/products/database/xe/index.html>
- [5] PostgreSQL. <http://www.postgresql.org>
- [6] J2EE. <http://java.sun.com/javaee>

УДК 544.424.2

**Л.Н. Адеева, В.Ф. Борбат**

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

### **ЗОЛА ТЭЦ – ПЕРСПЕКТИВНОЕ СЫРЬЕ ДЛЯ ПРОМЫШЛЕННОСТИ**

Рассмотрены методы использования и переработки золы ТЭЦ. Проведена оценка существующих методов переработки золы с точки зрения глубины переработки и в экологическом аспекте.

*Ключевые слова:* газовая электронография, первичная обработка, дифракционные кольца, эллиптичность.

Проблема использования золошлаковых материалов (ЗШМ), образующихся на ТЭЦ при сжигании углей, не решена как в целом по России, так и в Омске. Омские ТЭЦ работают на угле, содержащем до 63 % минеральных компонентов [1]. При сжигании пылеобразного горючего при 1200–1700 °С образуются твердые отходы двух видов: зола уноса (летучая зола) и шлак. Примерно 80 % минеральной части угля переходит в золу уноса, улавливаемую в циклонах и на электрофильтрах, а до 20 % переходит в шлак, который накапливается в шлаковых бункерах под топкой. Затем методом гидроудаления золу и шлаки перемещают на золоотвалы, где они складываются и хранятся на открытом воздухе (Омск) или под слоем воды (Павлодар, Экибастуз). В настоящее время на омских золоотвалах скопилось около 60 миллионов тонн ЗШМ.

С точки зрения рационального природопользования ЗШМ представляет собой добытое из недр земли, перемещенное на другую территорию и недоиспользованное сырье, способное обеспечить многие нужды промышленности. Известно, что золы на 98–99 % состоят из Si, Al, Fe, O, Ca, Ti, Mg, S, K, Na. Эти элементы называют золообразующими (макроэлементами). Практически все остальные элементы периодической системы присутствуют в золе на уровне 0,1 % и менее, это микроэлементы. При сгорании угля часть микроэлементов (Sr, Ba, Sc, Y, La, Ti, Zr и др.) концентрируется в шлаке. Другие элементы (Ga, In, Tl, Ge, Sn, Pb и др.) при температурах выше 1000 °С выносятся из зоны высоких температур и конденсируются в электрофильтрах (при 110–120 °С). Можно ожидать обогащения летучей золы именно этими металлами [2].

Нельзя не сказать и об экологическом аспекте обсуждаемой проблемы. Золоотвалы создают большую экологическую напряженность в регионе, представляют угрозу для окружающей среды и здоровья людей. В результате ветровой эрозии частицы золы поступают в атмосферу и распространяются на несколько километров. Осевшая пыль, а вместе с ней химически активные токсичные вещества загрязняют

почву. Под действием кислотных осадков происходит миграция токсических веществ из золоотвалов, приводящая к загрязнению почв, грунтовых вод, поверхностных вод бассейна реки Иртыш. Оборудование и эксплуатация золоотвалов требуют значительных затрат, кроме того, под золоотвалы отчуждаются плодородные земли вблизи Иртыша. Из всего вышесказанного следует, что золоотвалы несут большой экологический, экономический и социальный ущерб региону, а проблема утилизации ЗШМ требует безотлагательного решения.

Масштабы накопленных ЗШМ и размеры территории, занятой золоотвалами (в Омске более 1100 га), позволяют говорить о золоотвалах как о техногенных месторождениях, содержащих сотни тысяч тонн Al, Fe, Si, а также сотни тонн редких и рассеянных металлов. Несмотря на многолетние научно-исследовательские работы по утилизации ЗШМ, уровень использования этих материалов остается в России чрезвычайно низким, составляя всего 4 %. Для сравнения укажем, что в Европейском союзе он доведен до 50 % (30 млн тонн в год) [3]. Переработка ЗШМ особенно важна для омского региона, практически не имеющего собственных минеральных ресурсов. Проблема утилизации ЗШМ Омска в последние годы постоянно обсуждается, но до настоящего времени ЗШМ почти не используются. Можно отметить лишь запуск в 2007 г. в Омске производства газозолобетона (ООО «Комбинат пористых материалов») мощностью 120 тыс. м<sup>3</sup>/год с годовым потреблением 44 тыс. тонн золы. Некоторое время ЗШМ использовались при строительстве дорог, но в настоящее время эта практика не имеет продолжения [1]. Планируется ввести в эксплуатацию завод эффективного силикатного кирпича. Имеется несколько проектов: «Производство автоклавного газобетона», «Производство высокопрочных вяжущих на основе отходов омских ТЭЦ».

Низкий уровень использования местной золы объясняется, в частности, тем, что омские ЗШМ относятся к кислым золоам, содержат до 10 % частиц несгоревшего угля («недожег»), неоднородны и имеют сложный дисперсионный, минеральный и химический состав. Все это затрудняет как прямое использование зо-

лы, так и получение таких продуктов ее глубокой переработки, которые бы по содержанию нежелательных примесей соответствовали действующим ГОСТам и ТУ. Тем не менее, предложены технические решения, позволяющие справиться с этой трудной задачей. В настоящей статье будут рассмотрены способы переработки и использования золошлаковых материалов, разработанные, в частности, на кафедре неорганической химии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского.

**Использование ЗШМ в строительстве.** Авторы статьи не претендуют на полноту освещения работ, посвященных вопросу использования золошлаковых материалов в строительстве (имеется более трехсот таких публикаций), а лишь указывают на одну из самых освоенных областей использования зол. В мировой строительной практике широко используют как неклассифицированные золы, так и золы после их предварительного обогащения или разделения на составляющие [4]. Так, золы могут использоваться для сооружения оснований дорожных покрытий, при реконструкции верхних изношенных слоев асфальта как фиксатор дегтя, смолы, гудрона, для создания планировочных насыпей и т. п. [3] Использование ЗШМ в этих целях должно быть обосновано в ходе испытаний пригодности и безопасности, с учетом механических нагрузок и погодно-климатических факторов. Необходимо оценить химическую безопасность использования зол с точки зрения загрязнения грунтовых вод вымываемыми из золы токсичными веществами. Кроме того, необходимо иметь технологии пылеподавления, исключающие загрязнение близлежащих территорий из-за уноса зольной пыли при выполнении строительных работ.

Как сухая, так и влажная (из отвалов) дисперсная зола ТЭЦ широко используется для изготовления изделий из плотных или ячеистых золобетонов (стеновые блоки и панели, плиты покрытий и перекрытий) [5]. Золы используются как добавка в бетоны взамен природного материала – песка. Наибольшее распространение золобетоны получили как материал для ограждающих конструкций в виде крупных блоков для стен промышленных зданий [6]. Ограничением использования золы как наполнителя служит ее дисперсность и высокая пористость, что приводит к

высокой влагоемкости бетона, меньшей прочности и повышенной деформируемости. Для получения изделий заданного качества требуется выверенная дозировка золы, строгое соблюдение режимов термообработки – пропаривания и автоклавирования.

Использование ЗШМ при производстве строительных материалов регулируется нормативами (ГОСТы и ТУ), которые устанавливают такие показатели качества, как дисперсный состав, химический состав, насыпная плотность, наличие посторонних включений и т. д. Для обеспечения нужного уровня качества вводятся ограничения по объему использования ЗШМ в том или ином продукте. В конкретном производстве часто может использоваться только часть золы, удовлетворяющая требованиям. Соответствующая фракция должна выделяться и проходить дополнительную подготовку либо на площадке ТЭЦ, либо в районе золоотвала (гидравлическое разделение, классификация зольной пульпы, обезвоживание) [9]. Поскольку золы углей различных месторождений значительно различаются между собой, их использование в строительстве определяется дисперсным и химическим составом каждой золы.

Для утилизации зол, образующихся при сжигании экибастузских углей на омских ТЭЦ, предложены технологии, позволяющие получать следующие материалы:

- высокопрочные минеральные вяжущие на основе золы ТЭЦ-5 и шлама Ачинского глиноземного завода. Это минеральное вяжущее (зальцит) соответствует портландцементам марок М-400-500 [7];

- ячеистый бетон (газобетон), в котором зола полностью заменяет песок. Доля золы в общей массе сырья достигает 50–55 %. Газобетон относится к конструктивно-теплоизоляционным материалам [8];

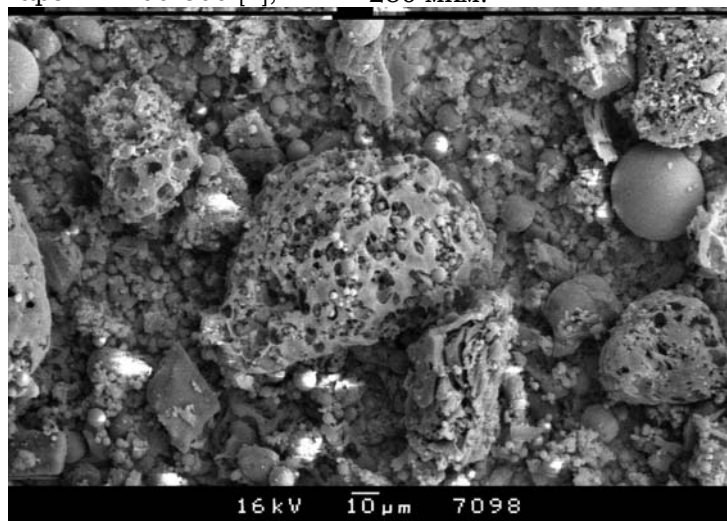
- аглопорит, используемый для производства бетонов и теплоизоляционных засыпок. Аглопоритовый гравий является наиболее золоемким (до 90 % золы) продуктом. Его получают путем смешения золы с глиной, гранулирования и обжига при 1150 °С [9].

#### **Выделение ценных компонентов.**

Зола ТЭЦ содержит компоненты, обладающие уникальными технологическими свойствами, позволяющими эффективно использовать их во многих современных технологиях. К таким компонентам относятся алюмосиликатные и магнитные микросферы, а также несгоревшие угольные частицы.

*Алюмосиликатные микросферы* образуются в результате расплавления минеральных компонентов, миграции расплава в виде отдельных капель и раздува последних за счет газовых включений. За рубежом микросферы находят применение в производстве керамических легких теплоизоляционных материалов, жаростойких бетонов, термопластиков, радиопрозрачных керамик, полиэтилена низкой плотности, полипропилена и многого другого [10]. В нашей стране также разработаны технологии применения микросфер как наполнителей композиционных материалов.

Микросферы, отчетливо видные на фотографии (рис. 1), имеют размеры от 10 до 250 мкм.



**Рис. 1.** Фотография золы уноса экибастузского угля

Микросферы экибастузского угля содержат 13 % стеклофазы, 53 % муллита, 34 % кварца. В силикатных сферах преобладают оксиды кремния, алюминия, калия. Температура плавления силикатных микросфер превышает 1350 °С. Силикатные микросферы почти в 2 раза легче воды, что является основой их эффективного гравитационного выделения. Разработано много приспособлений для выделения микросфер (декантаторы, сгустители, гидроциклоны и др.). Наименее затратный и эффективный способ выделения силикатных микросфер из золы – использование гидротехнических сооружений золоотвалов. После естественного всплывания полых микросфер на поверхность пруда их собирают. Примером такой организации золоотвалов являются павлоградские и экибастузские ГРЭС (Казахстан), которые сбрасывают золу в горько-соленые озера, находящиеся в 10–15 км от ГРЭС. Ежегодно на крупнейших ТЭЦ России образуется несколько десятков тысяч тонн алюмосиликатных микросфер, которые могли бы использоваться для получения высококачественных композиционных материалов [11].

*Магнитные микросферы* представляют собой глобулы размером от 5 до 300 мкм. Содержание магнитных микросфер в золах уноса составляет 3,3–16 % [12]. К образованию магнитных микросфер приводит наличие в исходном угле легкоплавких железистых карбонатов. Основным компонентом во всех магнитных микросферах является железо, содержание которого в пересчете на  $Fe_2O_3$  достигает 88 %, т. е. ферросферы являются главным концентратом железа в составе зол уноса. В составе ферросфер преобладает магнетит с примесями ферритов магния, марганца, кальция. Есть стеклофаза, расположенная между ветвями рудных дендритов и содержащая оксиды кремния (18–38 %) и оксиды алюминия (1–12 %), остальное – примеси. Количество ферросфер в золе уноса на 1–2 порядка превышает количество силикатных полых микросфер, на каждой ТЭЦ ресурсы ферросфер составляют десятки и даже сотни тысяч тонн в год [4]. Область применения магнитных микросфер достаточно широка: от использования в качестве специфического железорудного концентрата в металлургических процессах до их эффективного применения в

качестве катализаторов высокотемпературного окислительного превращения метана.

Для выделения магнитных микросфер из золы могут использоваться методы сухой и мокрой магнитной сепарации. Так, в работе [13] методом сухой магнитной сепарации из золы были выделены магнитные концентраты с выходом около 30 %. Схема разделения включает следующие стадии: гранулометрическая концентрация, гидродинамическое разделение, сухая магнитная сепарация тяжелых продуктов гидродинамического разделения при напряженности магнитного поля 0,3 Тл. Такая схема позволяет получать магнитные концентраты высокой чистоты и постоянного состава.

*Несгоревшие частицы угля* («недожег») составляют от 5 до 15 % золы. При разделении золы на фракции несгоревший уголь концентрируется во фракции 100–200 мкм [14]. Недожег отличается от исходного угля и представляет собой частицы кокса или полукокса [4]. Несгоревшие частицы целесообразно извлекать из золы, так как они являются вредной составляющей, снижающей качество строительных изделий. К тому же они могут быть использованы, исходя из их характеристик. В работе [13] была изучена угольная фракция золы уноса от сжигания каменного угля Тугнуйского месторождения. Установлено, что угольные частицы содержат от 33 до 58 % минеральной части, высокую пористость и довольно развитую удельную поверхность – 91–155 м<sup>2</sup>/г. Это позволяет использовать их в качестве углеродминеральных сорбентов при очистке воды от органических загрязнений. Недожег можно выделить из золы методом флотации [15], а также методом электро-масс-классификации [16], который основан на явлении трибозарядки частиц при трении. Последний метод предлагается и для классификации золы в целом, в том числе для выделения фракции несгоревшего угля. В работе [14] показана возможность флотационного извлечения угольных частиц из золы уноса экибастузского угля. При флотации с использованием керосина и ОП-10 недожег может быть извлечен из золы на 80 %.

**Характеристика золы уноса экибастузского угля как сырья для глубокой переработки.** Нами исследована зола уноса, образующаяся при высокотем-



пературном сжигании угля Экибастузского бассейна, отобранная с 1–4 полей электрофильтров ТЭЦ-4 г. Омска [17]. Гранулометрический состав определен путем воздушной сепарации. Частицы имеют размер от 21 до 204 мкм, 75 % массы золы составляют частицы с размером до 50 мкм. Такая зола может быть отнесена к разряду пылей. Удельную поверхность определяли методом БЭТ на адсорбционном приборе «Sorpty-1750» («Fisons», Италия) по адсорбции азота при 77,4 К. Она составляет  $11,0 \pm 0,4$  м<sup>2</sup>/г. По данным ртутной порометрии, проведенной на приборе «Porosimetr-2000», зола уноса относится к макропористым объектам. На кривых распределения объема пор по размерам

отчетливо наблюдается левая ветвь распределения в области радиусов 0,1–10 мкм с максимумом в области 3–5 мкм. Судя по модулю основности  $M_0$ , равному 0,019, такая зола уноса относится к кислым золам ( $M_0 < 1$ ).

По химическому составу основу этой золы уноса (до 95 %) составляют оксиды кремния, алюминия и железа (табл. 1). Содержание оксидов щелочных и щелочноземельных металлов в сумме составляет 2,3 %. Кроме основных золообразующих элементов, в ней содержатся еще 15 микроэлементов, содержание каждого из которых превышает  $10^{-4}$  % (табл. 2).

Таблица 1

Химический состав золы уноса угля Экибастузского бассейна

SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CaO	MgO	TiO <sub>2</sub>	K <sub>2</sub> O	Na <sub>2</sub> O	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	MnO <sub>2</sub>	SO <sub>3</sub>	ППП
61,5	27,4	5,65	1,17	0,49	1,49	0,42	0,32	0,52	0,17	0,57	5,1

Таблица 2

Результаты нейтронно-активационного анализа золы уноса\*

Элемент	Содержание	
	% масс.	г/т
Барий	0,20	2 000
Стронций	0,042	420
Цирконий	0,033	330
Ванадий	0,014	140
Церий	0,0067	67
Медь	0,0057	57
Галлий	0,0043	43
Иттрий	0,0042	42
Лантан	0,0015	15
Диспрозий	0,0010	10
Тербий	0,0009	9
Торий	0,0007	7
Иттербий	0,0006	6
Самарий	0,0006	6
Уран	0,0002	2

\*Примечание. Анализ выполнен в институте «Гидроцветмет» (Новосибирск).

Наибольшую потенциальную ценность представляют редкие металлы, поскольку они не образуют собственных месторождений. Данная зола уноса содержит следующие группы редких металлов:

- рассеянные – Ga;
- тугоплавкие – Ti, Zr, V;

- редкоземельные – Y, Yb, Tb, La, Ce, Dy, Sm;
- радиоактивные – U, Th.

Фазовый состав золы – важный фактор, влияющий на эффективность выщелачивания элементов. Рентгенофазовый анализ, проведенный на установке Дрон-3 (линии K<sub>α</sub>, β-фильтр), показал наличие в золе экибастузских углей аморфной фазы, α-кварца, алюмосиликатов типа силлиманина Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>×SiO<sub>2</sub> или муллита 3Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>×2SiO<sub>2</sub>. Были изучены основные закономерности извлечения кремния и алюминия при гидрощелочной обработке (такая обработка позволяет полностью выделить аморфную фазу [18]). Дифрактограмма полученного остатка показывает усиление сигнала α-кварца и отсутствие аморфной фазы. Выделение аморфной фазы вели при следующих оптимальных условиях: t = 85 °С, τ = 2,5 ч, C<sub>щ</sub> = 200 г/л, Т:Ж = 1:5. Степень извлечения кремния в этих условиях составила 47 % (в пересчете на SiO<sub>2</sub>), а алюминия – 10,5 % (в пересчете на Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>). С учетом полученных данных состав аморфной фазы можно представить как 9SiO<sub>2</sub> × 2Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

**Кислотные способы глубокой переработки золы.** Для извлечения микроэлементов основного и амфотерного характера используют растворы минеральных кислот (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, HCl, HNO<sub>3</sub>) [20–22].

Кислотное выщелачивание сочетают с магнитной сепарацией, восстановительно-окислительным и хлорирующим обжигом. Так, золу подвергают классификации, затем мелкую фракцию (<1 мм) делят магнитной сепарацией на магнитную и немагнитную фракции, а выщелачивание каждой фракции ведут соляной кислотой (6 М) в течение 2 ч. при температуре 105 °С и плотности пульпы 40 % [23]. Более полно металлы извлекаются из магнитной фракции.

Из золы бурых углей Канско-Ачинского бассейна скандий и иттрий извлекали солянокислыми растворами [24]. Установлено, что оптимальными условиями выщелачивания скандия и иттрия являются: температура 40–50 °С, исходная концентрация соляной кислоты – 2,5–3,2 моль/л, отношение Т:Ж = 1:4–1:5, продолжительность процесса 30–60 мин. При этом в раствор переходит 95–96 % иттрия и 85–90% скандия. Для извлечения микрокомпонентов из столь сложных по составу продуктов это весьма высокие показатели.

В работах кафедры неорганической химии ОмГУ изучалась возможность извлечения редких и редкоземельных элементов из золы экибастузских углей [25]. При обработке золы серной кислотой ( $S_{\text{к}} = 200$  г/л, время извлечения – 2 ч., Т:Ж = 1:5) степени извлечения редких металлов невелики: Се – 0,35 %, Ga – 1,2 %, V – 4,6 %. Повышение температуры до 85 °С увеличивает степень извлечения указанных металлов до 82; 16,3; 5,8 % соответственно. Эффективным приемом является введение добавки NaCl. Использование раствора серной кислоты ( $S_{\text{к}} = 200$  г/л) с концентрацией NaCl 50 г/л при 85 °С позволяет извлечь из золы 90 % Се, при этом извлечение Ga составило 25,6 %, V – 7 %. При обработке золы серной кислотой из нее выщелачиваются также радиоактивные элементы – уран и торий. При указанных условиях степень извлечения составляет для урана – 87 %, для тория – 86 %. Повысить степень извлечения редкоземельных элементов из золы в сернокислой среде можно, применяя электрохимическое выщелачивание. Обработку сернокислотной пульпы проводят на медном катоде и свинцовом аноде при плотности тока 1,5 мА/см<sup>2</sup> и концентрации кислоты 50–300 г/л. При этом

степень извлечения редкоземельных элементов составляет 89 % [27].

Методом кучного выщелачивания можно извлекать РЗЭ, уран и торий из золы перед ее использованием в жилищном строительстве [26]. При кислотном выщелачивании основная масса золы остается неиспользованной и требует дальнейшей переработки.

**Щелочное извлечение редких металлов.** Для извлечения микроэлементов кислотного и амфотерного характера используют различные щелочные растворы (NaOH, Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, NaHCO<sub>3</sub>, NH<sub>4</sub>OH) [28; 29]. Так извлекают дорогостоящий металл скандий из промежуточных продуктов переработки бокситов на глинозем [30]. Выщелачивание ведут 5–12 %-ым раствором карбоната или гидрокарбоната натрия, обработку повторяют не менее трех раз при соотношении Т:Ж = 1:2,5–5,0, температуре до 50 °С и времени обработки не менее 2 часов. В полученный раствор вводят гидроксид амфотерного металла-коллектора (раствор оксида алюминия или оксида цинка в гидроксиде натрия), затем осадок отфильтровывают, промывают, сушат и прокаливают. Содержание оксида скандия в продукте составляет 26–27 %.

Нами показано, что при гидрощелочной обработке золы уноса экибастузского угля извлекаются кремний и галлий [31]. При оптимальных условиях:  $t = 85 \pm 5$  °С,  $\tau = 1$  ч,  $S_{\text{щ}} = 200$ –250 г/л, Т:Ж = 1:4–6 степень извлечения кремния (в расчете на SiO<sub>2</sub>) составляет 49,3 %, алюминия – 5,5 %, галлия – 56 %. Раствор выщелачивания характеризуется следующими показателями: SiO<sub>2</sub> – 60 г/л, Ga – 5 мг/л. Для последующего извлечения галлия можно использовать известные схемы, включающие экстракцию или ионный обмен. Практически весь галлий может быть извлечен из золы за три стадии выщелачивания. Аморфный диоксид кремния может быть выделен из раствора и использован в качестве сырья для химической промышленности, например, для получения силикатной матрицы катализаторов, лакокрасочных материалов, белой сажи.

Отметим, что гидрощелочной способ переработки золы, так же как и кислотный, приводит к образованию неразложившегося остатка золы, который рекомендуется использовать в строительстве

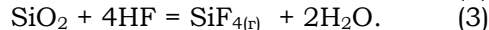
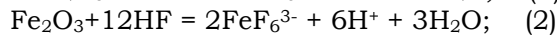
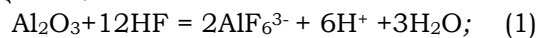
после соответствующей классификации и подготовки.

Более полно переработать золу на продукты можно способом спекания ее с карбонатом натрия в электропечах при температуре 1400–1500 °С [32]. Охлажденный плавл подвергается водному выщелачиванию, что ведет к извлечению силикатов натрия и калия. Полученный раствор поступает на переделы производства белой сажи, а кек – на щелочное выщелачивание алюминия с получением концентрата редких металлов. Метод вскрытия золы с содой позволяет полностью переработать золу и получить ряд ценных продуктов: глинозем, белитовый шлак, концентрат редкоземельных элементов и другие, но является дорогостоящим, требующим больших капитальных и энергетических затрат.

**Комплексная переработка золы уноса экибастузского угля фторидным методом.** Наличие  $\alpha$ -кварца и муллита в золе экибастузских углей делает малоэффективными кислотные и щелочные методы из-за стойкости данных фаз к химическому воздействию. Применение фторидной технологии позволяет преодолеть эту трудность, так как фторсодержащие соединения имеют высокую реакционную способность. Известно несколько фтористых соединений, которые могут быть использованы для переработки алюмосиликатных материалов. Такими веществами являются фторид кальция, фторид аммония, фтористоводородная кислота и гексафторсиликат натрия. Суть фторидной переработки золы заключается в том, что фтороводород взаимодействует с золой и переводит кремний, содержащийся в золе, в газообразное соединение – тетрафторсилан. При этом происходит отделение соединения кремния от основной массы веществ, содержащихся в золе. Тетрафторсилан поглощают раствором фторида аммония, затем раствор обрабатывают избытком аммиака для выделения высокодисперсного диоксида кремния. Из остатка золы после фторидной обработки получают ряд важных продуктов. Цикл исследований по глубокой переработке золы фторидным методом проведен на кафедре неорганической химии ОмГУ [33]. Рассмотрим фторидный способ переработки золы более подробно.

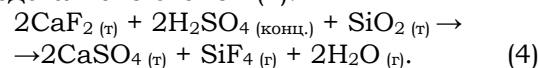
*Получение  $\text{SiF}_4$  при фторировании золы.* При обработке растворами фтористо-

водородной кислоты процесс растворения золы можно представить следующими реакциями:



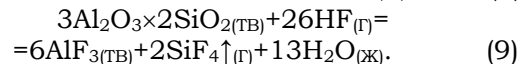
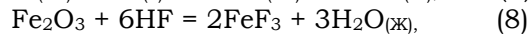
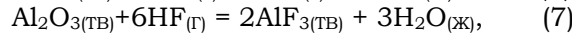
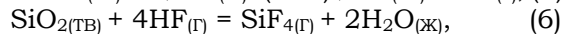
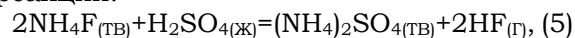
Наиболее полно кремний переходит в газовую фазу (в виде  $\text{SiF}_4$ ) при следующих условиях обработки:  $t=25$  °С, двукратный избыток HF, концентрация HF – 45 %. Степень извлечения кремния составляет  $(34\pm 4)$  % [34], чего явно недостаточно.

Поскольку фтористоводородная кислота является чрезвычайно токсичным реагентом, рассмотрена возможность фторирования золы фтористым водородом, выделяющимся при реакции  $\text{CaF}_2$  и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  непосредственно в зоне реакции. Получение тетрафторсилана при обработке золы смесью  $\text{CaF}_2$  и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  может быть представлено схемой (4):

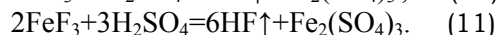


Наиболее полное извлечение кремния достигается в условиях избытка фторида кальция (1:1,5) и серной кислоты (1:4) при 250 °С. Для полного протекания реакции требуется 40 минут [35]. В этих условиях степень извлечения кремния достигает 97,47 %. При использовании  $\text{CaF}_2$  образуется большое количество гипса, который может быть использован в строительстве.

С точки зрения рациональной организации фторидной переработки и создания замкнутого технологического цикла фторид аммония имеет преимущества по сравнению с  $\text{CaF}_2$  [37]. При использовании этого реагента протекают следующие реакции:



При нагревании реакционной среды в течение 1,5 ч. избыток фтора удаляется из зоны реакции:



При  $t = 250$  °С, избытке  $\text{H}_2\text{SO}_4$  (1:3) и  $\text{NH}_4\text{F}$  (1:1,2) степень извлечения кремния составляет 96,3 %.

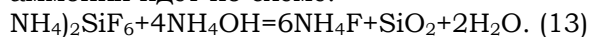
Для проведения фторирования вместо  $\text{CaF}_2$  или  $\text{NH}_4\text{F}$  можно использовать фторсодержащие твердые отходы. Примене-

ние фторсодержащих отходов алюминиевого производства (Красноярск) позволяет извлечь кремний из золы на 90 % [36].

*Гидрохимическая переработка SiF<sub>4</sub> на белую сажу.* Образующийся SiF<sub>4</sub> поглощают раствором NH<sub>4</sub>F. Условия абсорбции описаны в литературе [38]. Процесс можно представить реакцией:



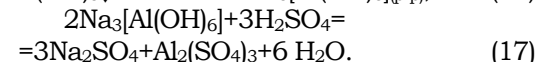
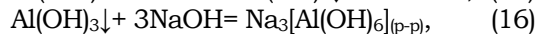
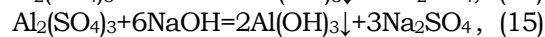
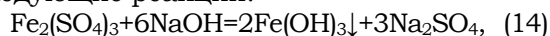
Фторид аммония берут в 3-кратном избытке (0,164 г/мл). Полученный кремнефторид аммония обрабатывают аммиаком (23–25 %), используя 150 % аммиака от стехиометрически необходимого количества. Гидролиз кремнефторида аммония идет по схеме:



Полученный диоксид кремния имеет удельную поверхность 386±14 м<sup>2</sup>/г. По данным спектрального анализа, продукт содержит лишь следовые количества Fe, Al, Ca, Mg, Ti [39]. Таким образом, происходит эффективное отделение кремния от других элементов, входящих в состав золы.

*Извлечение алюминия и железа из золы.* После удаления кремния алюминий и железо разделяют в форме сульфатов.

Предварительно избыток фтора из реакционной среды удаляют, нагревая реакционную смесь при 250 °С в течение 1,5 ч. [37] Комбинированные кислотно-щелочные методы переработки алюминий-железосодержащего сырья хорошо известны. Примером может быть методика [40]. Для разделения железа и алюминия проводят следующие реакции:



В выделенном продукте (сульфате алюминия) содержится всего 0,14±0,02 % Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, что говорит о хорошем разделении компонентов. Низкое содержание железа делает возможным использовать полученный продукт для получения глинозема. Твердый остаток, полученный после растворения сульфатов алюминия и железа, прокачивали и анализировали атомно-эмиссионным методом. Оценочные результаты (в % масс.) приведены в таблице 3.

Т а б л и ц а 3

Элементный состав остатка по данным полуколичественного спектрального анализа

Si	Fe	Al	РЗЭ	Ba	Mn	Zr	Hf	Co	Ni	V	Sr
10-100	~1	~1	~1	~0,2	~0,2	~0,2	~0,06	~0,02	~0,02	~0,02	~0,02

Методом РФА установлено, что основной фазой в твердом остатке является α-кварц (SiO<sub>2</sub>) ≈ 90 %. Таким образом, полученный остаток можно рассматривать как бедный концентрат РЗЭ.

Принципиальная схема комплексной переработки золы предложена в работе [38] (рис. 2).

С нашей точки зрения, из рассмотренных методов переработки и использования золы ТЭЦ наибольшие перспективы имеет фторидный способ. Он позволяет наиболее полно переработать золу и получить целый ряд ценных продуктов, высоко востребованных в промышленности.

Таковыми продуктами являются белая сажа (применяется в производстве автомобильных и авиационных шин), криолит (сырье для получения алюминия) и концентрат редкоземельных элементов. Последний может быть переработан с получением дорогостоящих иттрия, скандия и церия, необходимых в радиоэлектронике и приборостроении. Большим достоинством фторидной технологии является и то, что она позволяет переработать золу без образования новых отходов, что отвечает современным экологическим требованиям, предъявляемым к утилизационным технологиям.

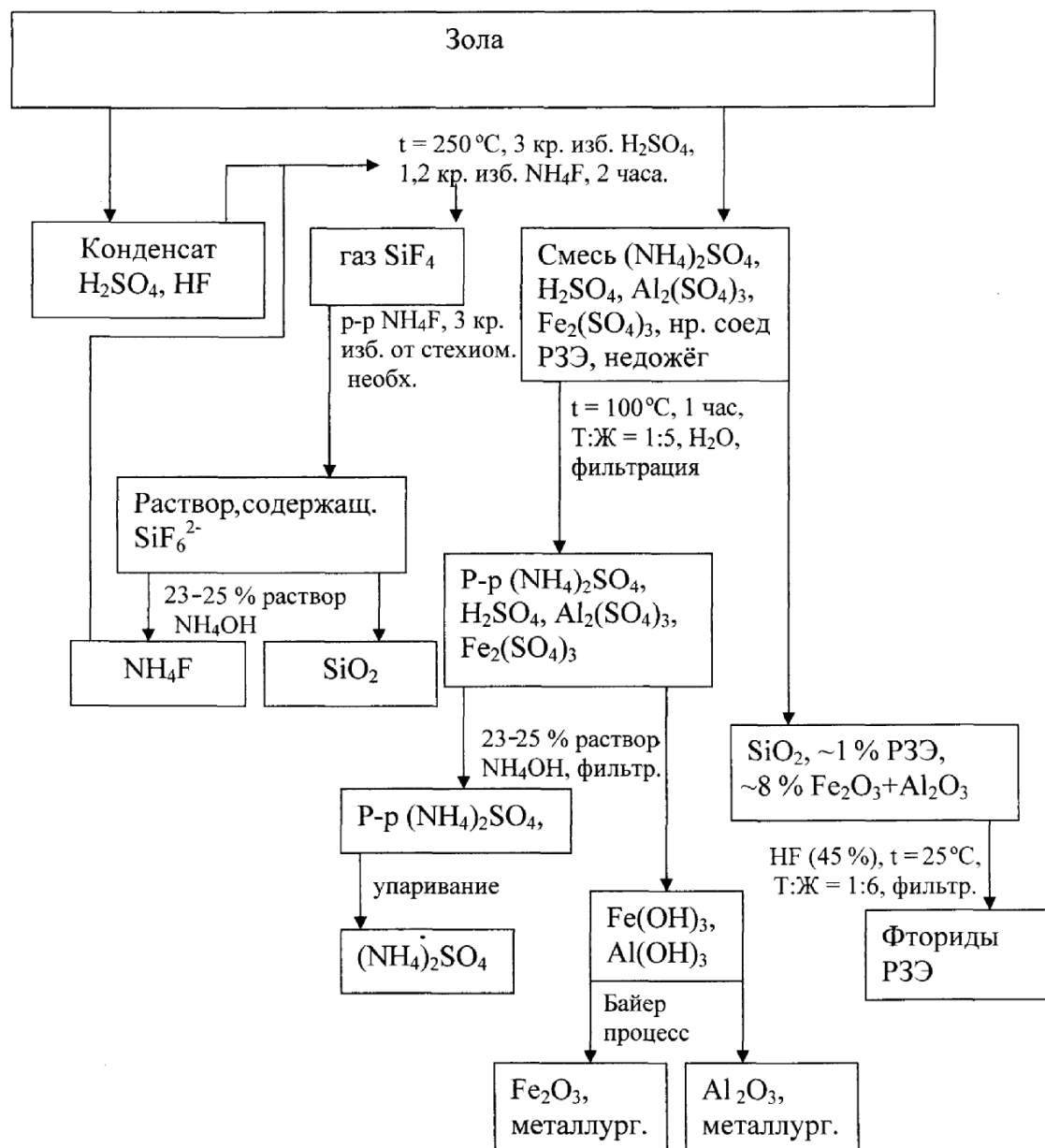


Рис. 2. Принципиальная схема комплексной фторидной переработки золы

Очевидно, вовлечение в хозяйственный оборот омских золошлаковых материалов приведет к значительному экономическому эффекту [41]. Экономический эффект включает следующие составляющие: использование более дешевых сырьевых ресурсов, уменьшение изъятия природных ресурсов в регионе, уменьшение издержек на размещение отходов производства, повышение качества и надежности продукции, применение более эффективных технико-экономических решений.

Таким образом, использование и, особенно, глубокая переработка золы омских ТЭЦ позволит расширить перечень высокотехнологичной продукции, выпускаемой в регионе, и приведет к значительному эколого-экономическому эффекту.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Моденов С.Н. Анализ состояния дел и планы по вовлечению в оборот золошлаковых материалов Омских ТЭЦ / С.Н. Моденов // Расширение региональной сырьевой базы вовлечением в оборот золошлаковых материалов ТЭЦ ОАО «ТГК-

- 11»: материалы региональной научно-практической конференции. Омск, 2007. С. 3–7.
- [2] Шпирт М.Я. Безотходная технология. Утилизация отходов добычи и переработки твердых горючих ископаемых / М.Я. Шпирт. М., 1988. 255 с.
- [3] Сиротюк В.В. Опыт и перспективы использования золошлаковых материалов в транспортном строительстве / В.В. Сиротюк // Расширение региональной сырьевой базы вовлечением в оборот золошлаковых материалов ТЭЦ ОАО «ТГК-11». С. 37–52.
- [4] Сокол Э.В. Природа, химический и фазовый состав энергетических зол Челябинских углей / Э.В. Сокол, Н.В. Максимова. Новосибирск, 2001. 110 с.
- [5] <http://bibliotekar.ru/spravochnik-64/14htm>
- [6] <http://entcentr.narod.ru/tehrizr.htm>
- [7] Прокопец В.С. Производство высокопрочных минеральных вяжущих на основе ЗШО Омских ТЭЦ / В.С. Прокопец // Расширение региональной сырьевой базы вовлечением в оборот золошлаковых материалов ТЭЦ ОАО «ТГК-11». С. 116–127.
- [8] Козлитин В.А. Ячеистый бетон из отходов – лидирующий материал для жилищного строительства / В.А. Козлитин // Расширение региональной сырьевой базы вовлечением в оборот золошлаковых материалов ТЭЦ ОАО «ТГК-11». С. 74–92.
- [9] Успенский С.К. Переработка и подготовка золошлаковых материалов к использованию / С.К. Успенский // Расширение региональной сырьевой базы вовлечением в оборот золошлаковых материалов ТЭЦ ОАО «ТГК-11». С. 93–11.
- [10] [www.cenosphereindia.com](http://www.cenosphereindia.com)
- [11] Кизильштейн Л.Я. Компоненты зол и шлаков ТЭЦ / Л.Я. Кизильштейн. М.: Энергоатомиздат, 1995. 227 с.
- [12] Аншиц А.Г. Выделение магнитных микросфер постоянного состава из энергетических зол и изучение их физико-химических свойств / А.Г. Аншиц, В.А. Низов, Е.В. Кондратенко // Химия в интересах устойчивого развития. 1999. № 7. С. 105–118.
- [13] Шаронова О.М. Состав и направления использования летучей золы ТЭЦ-2 г. Улан-Удэ / О.М. Шаронова, Г.В. Акимочкина, Н.Н. Аншиц // Анализ состояния и развития природной территории: минерально-сырьевой комплекс: материалы Всероссийской научно-технической конференции с международным участием. Улан-Удэ, 2006. С. 99–101.
- [14] Михайлов Ю.Л. Физико-химические исследования процессов выщелачивания компонентов золы от сжигания углей экибастузского бассейна: дис. ... канд. хим. наук / Ю.Л. Михайлов. Красноярск, 2001.
- [15] Мнушкин И.И. Флотационное обогащение золы тепловых электростанций / И.И. Мнушкин, Н.Н. Черныш // Обогащение полезных ископаемых. 1987. № 37. С. 50–54.
- [16] Зырянов В.В. Комплексная технология переработки сухих зол уноса ТЭЦ. Энергетика UA // В.В. Зырянов // <http://energyua.com>
- [17] Борбат В.Ф. Золошлаковые отходы углей – перспективное сырье для различных отраслей промышленности / В.Ф. Борбат, Л.Н. Адеева, П.Е. Колосов, Ю.Л. Михайлов // Инновационные технологии–2001: материалы Международного научного семинара. Красноярск, 2001. С. 136–138.
- [18] Кистяковский Б.Б. Производство цветных металлов / Б.Б. Кистяковский, Н.В. Гудима. М., 1978. 244 с.
- [19] Борбат В.Ф. Исследование возможности обогащения золы-уноса ТЭЦ по редким и цветным металлам для их последующего извлечения / В.Ф. Борбат, Ю.Л. Михайлов, Л.Н. Адеева, О.А. Голованова, Т.Н. Филатова // Изв. вузов. Химия и химическая технология. 1999. Т. 42. № 5. С. 86–90.
- [20] Tsuboi Izumi. Recovery of rare metals from coal fly ash. / Izumi Tsuboi / Int. Solv. Extr. Conf. Kyoto. 1990. P. 215.
- [21] Абишева З.С. Кислотно-экстракционная технология извлечения галлия из золы-уноса от сжигания энергетических углей / З.С. Абишева, И.А. Блайда, Е.И. Пономарева // Цветные металлы. 1994. № 3. С. 36–38.
- [22] Степанов С.И. Пат. № 2094374 РФ. МПК<sup>7</sup> C01 F 17/00, В 09 В3/00. Способ извлечения скандия из кремнийсодержащих материалов / С.И. Степанов, А.А. Ильенок. Заявка № 96111651/25; заявл. 11.06.96; опубл. 27.10.97.
- [23] Berry E.E. Enhanced resource recovery by beneficiation and direct acid leaching of fly ash / E.E. Berry, R.T. Hemmings, D.M. Golden // Fly Ash and Coal Convers. by. Prod.: Charact., Util. and Disposal: III Symp. Pittsburgh, 1987. P. 365–380.
- [24] Концевой А.А. Извлечение скандия и иттрия из золошлаковых отходов / А.А. Концевой, А.Д. Михнев, Г.Л. Пашков, Л.П. Колмакова. Журнал прикладной химии. 1995. Т. 68. № 7.
- [25] Борбат В.Ф. Сернокислотное извлечение редкоземельных металлов из золы экибастузского угля // В.Ф. Борбат, Л.Н. Адеева, Ю.Л. Михайлов. Изв. вузов. Химия и химическая технология. 2002. № 2. С. 23–27.
- [26] Борбат В.Ф. Пат. № 2138339 РФ. МПК<sup>7</sup> 6 В 03 В 9/06, С 04 В 7/28, 18/10. Способ подготовки золы-уноса от сжигания углей для использования в производстве строительных материалов / В.Ф. Борбат, Л.Н. Адеева, О.А. Нечаева, Ю.Л. Михайлов. Заявка № 98107-53/03; заявл. 06.04.98; опубл. 27.09.99.
- [27] Борбат В.Ф. Пат. № 2167213 РФ. МПК<sup>7</sup> 7 С 22 В 59/00, 60/00, 3/08, 7/00. Способ извлечения редкоземельных и радиоактивных металлов из окисленного технологически упорного сырья / В.Ф. Борбат, Ю.Л. Михайлов, Л.Н. Адеева, В.А. Мухин. Заявка № 20 00101939/02; заявл. 26.01 00; опубл. 20.07.01.
- [28] Clements J.L. Recovery of metals from coal fly ash / J.L. Clements. Recycle and Secondary Recovery

- Metals. Proc. Int. Symp. And Fall Ext. and Process Met. Meet. Warrendale, 1985. P. 747–769.
- [29] Пат. 184347 ВНР Способ извлечения редких металлов выщелачиванием из остатков сгорания каменного угля, особенно бурого, содержащего редкие металлы / Panto G. et al. № 2723/80; заявл. 14.11.80, опубл. 20.10.86.
- [30] Диев В.Н. Пат. № 2201988 РФ. МПК<sup>7</sup> С22 В59/00, С22 В 3/4. Способ извлечения скандия при переработке бокситов на глинозем / В.Н. Диев, Н.А. Сабирзянов, Л.М. Скрябнева, С.П. Яценко, В.С. Анашкин, С.Н. Аминов, К.Ф. Завадский, А.В. Сысоев, Е.П. Устич. Заявка №2001105366/02; заявл.26.02.2001; опубл. 10.04.2003.
- [31] Борбат В.Ф. Гидрощелочное извлечение галлия из золы уноса экибастузских углей / В.Ф. Борбат, Ю.Л. Михайлов, Л.Н. Адеева, О.А. Голованова // Изв. вузов. Химия и химическая технология. 2000. Т. 43. № 1. С. 102–105.
- [32] Гужелев Э.П. Рациональное применение золы ТЭЦ: Результаты научно-практических исследований / Э.П. Гужелев, Ю.Т. Усманский. Омск: Омский гос. ун-т, 1998. – 238 с.
- [33] Борбат В.Ф. Исследование возможности фторидной переработки золы ТЭЦ / В.Ф. Борбат, Л.Н. Адеева, Ю.Л. Михайлов, Э.О. Чариков. Современные неорганические фториды – INTERSIFLUORINE: материалы международного семинара. Новосибирск, 2003. С. 52–54.
- [34] Борбат В.Ф. Кинетические закономерности извлечения кремния из золошлаковых отходов / В.Ф. Борбат, Ю.Л. Михайлов, Л.Н. Адеева, Э.О. Чариков // Изв. вузов. Химия и химическая технология. 2005. Т. 48. № 9. С. 139–142.
- [35] Борбат В.Ф. Комплексная переработка золошлаковых отходов / В.Ф. Борбат, Ю.Л. Михайлов, Л.Н. Адеева, Э.О. Чариков // Экономика региона: комплексные инновационные подходы и решения: материалы научно-практической конференции. Омск, 2005. С. 195–197.
- [36] Борбат В.Ф. Пат. № 2261841 РФ, МПК<sup>7</sup> С01 F 17/00, В 09 В3/00. Способ гидрохимического получения высокодисперсного диоксида кремния из техногенного сырья / В.Ф. Борбат, Ю.Л. Михайлов, Э.О. Чариков, Г.Л. Пашков. Заявка № 2004109475/15; заявл. 29.03.2004; опубл. 10.10.2005.
- [37] Борисов В.А. Комплексная фторидная переработка золы-уноса ТЭЦ / В.А. Борисов, Л.Н. Адеева, В.Ф. Борбат, Э.О. Чариков // Россия молодая: передовые технологии – в промышленность: материалы Всероссийской научно-технической конференции. Омск, 2008. С. 158–161.
- [38] Авторское свидетельство СССР № 170506, С 01 В 33/16. Способ получения высокодисперсного диоксида кремния / И.Н. Громова и др. 1992. Опубл. 07.02.92.
- [39] Борбат В.Ф. Анализ возможности процесса фторидной переработки золы ТЭЦ / В.Ф. Борбат, Л.Н. Адеева, Э.О. Чариков // Вестник Омского университета. 2003. Вып. 3. С. 39–41.
- [40] Пустильник Г.Л. Комплексная переработка бокситов и другого алюминийсодержащего сырья за рубежом / Г.Л. Пустильник. М.: Мир, 1972.
- [41] Шевцов В.Р. Вовлечение в оборот золошлаковых материалов – не только решение экологических проблем, но и эффективный бизнес / В.Р. Шевцов // Расширение региональной сырьевой базы вовлечением в оборот золошлаковых материалов ТЭЦ ОАО «ТГК-11». С. 153–161.

УДК 547.022

**Е.Г. Атавин, А.Я. Стасюк**

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

## ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЭЛЛИПТИЧНОСТИ ДИФРАКЦИОННЫХ КАРТИН

Анализируется влияние небольшого отклонения от перпендикулярности дифракционного конуса рассеяния и фотопластинки на вид дифракционных картин в электронографическом эксперименте.

*Ключевые слова:* газовая электронография, первичная обработка, дифракционные кольца, поликристаллический образец, эллиптичность.

Газовая электронография наряду с микроволновой спектроскопией являются основными методами исследования пространственного строения молекул в газовой фазе. В этом методе регистрируется дифракция электронов на струе пара исследуемого вещества. Электронограф представляет собой достаточно сложный электро-ваку-умный прибор, и на результат регистрации экспериментальных дифракционных картин оказывают влияние различные факторы [1]. В частности, под влиянием электростатических и магнитных полей траектория электронного луча может искажаться, что приводит к некоторой неопределенности в положении точки рассеяния. Кроме того, держатель фотопластинки в приборе смонтирован с конечной точностью. В итоге может возникать небольшое отклонение от перпендикулярности дифракционного конуса и поверхности фотопластинки с соответствующим искажением дифракционных колец.

### Электронограммы поликристаллических образцов

В отличие от дифракционных картин пара исследуемого вещества, представляющих собой совокупность широких дифракционных колец, электронограммы поликристаллических образцов представляют собой набор очень узких дифракционных колец (рис. 1). В этом случае может проявляться эллиптичность, связанная с отклонением конуса рассеяния и фотопластинки от перпендикулярности (рис. 2).

Из тригонометрических соотношений (рис. 2) можно вывести следующие геометрические характеристики эллипсов рассеяния:

$$r = OA' = OB' = L \operatorname{Tg} \Theta,$$

$$\Delta = r \operatorname{Cos} \Theta / 2 (1 / \operatorname{Cos}(\Theta + \alpha) - 1 / \operatorname{Cos}(\Theta - \alpha)) \approx ar^2 / L,$$

$$A = AB = r \operatorname{Cos} \Theta / 2 (1 / \operatorname{Cos}(\Theta + \alpha) + 1 / \operatorname{Cos}(\Theta - \alpha)) \approx r \{ 1 + \alpha^2 (1/2 + (r/L)^2) \},$$

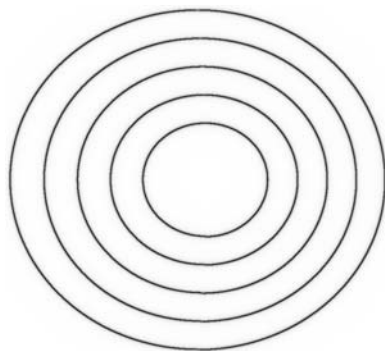
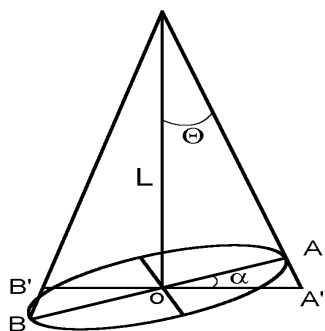
$$B = r / \sqrt{1 - (\Delta / A)^2} \approx r (1 + 1/2 (ar^2 / AL)^2),$$

где  $L$  – расстояние «сопло-пластинка»,  $r$  – радиус недеформированного цикла,  $\Theta$  – угол рассеяния,  $\Delta$  – смещение центра эллипса от проекции точки рассеяния,  $A$  – большая полуось эллипса,  $B$  – малая полуось эллипса,  $\alpha$  – угол неперпендикулярности.





**Рис. 1.** Электронограмма поликристаллической пленки оксида цинка ZnO  
 Расстояние «сопло-пластинка»  $L=500$  мм, длина волны электронов –  $0.0486608$  Å

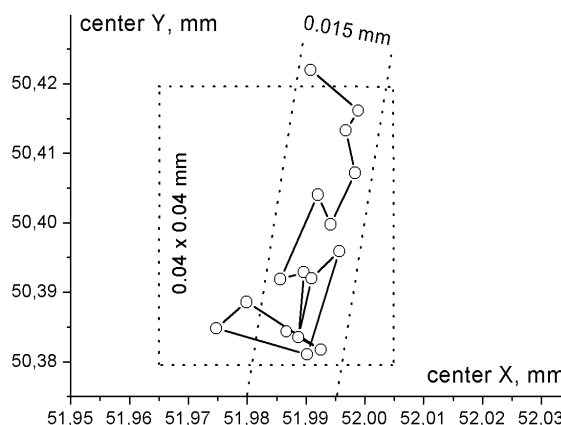


**Рис. 2.** Влияние неперпендикулярности на дифракционную картину  
 Для наглядности форма колец рассчитана для физически нереального значения угла  $\alpha=30^\circ$

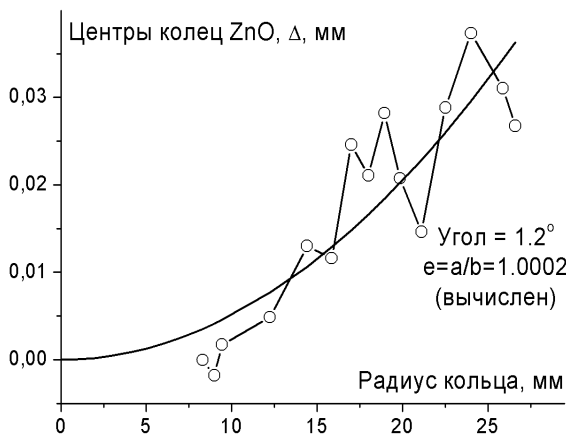
Наиболее интересным результатом эллиптичности рассматриваемого типа является появление астигматизма дифракционных колец. Это означает, что центры колец перестают совпадать не только с проекцией точки рассеяния, но и между собой. При этом дрейф центров проявляется как эффект первого порядка (линейная зависимость от  $\alpha$ ), в то время как ве-

личины полуосей зависят от  $\alpha$  квадратично (эффект второго порядка). То есть при малых  $\alpha$  эксцентриситет эллипса практически не отличается от единицы.

Мы определили центры 15 дифракционных колец окиси цинка (рис. 3).



**Рис. 3.** Положения центров 15 дифракционных колец окиси цинка относительно угла фотопластины



**Рис. 4.** Дрейф центров дифракционных колец

Видно, что на экспериментальной дифракционной картине действительно наблюдается небольшой астигматизм, соответствующий углу неперпендикулярности около  $1^\circ$  (рис 4).

Возможны три причины подобной неперпендикулярности (напомним, что рассматривается только этот источник эллиптичности).

1. Геометрические неточности изготовления и юстировки электронографа.

2. Искривление луча в магнитном поле Земли, не полностью экранированном корпусом прибора.

3. Влияние магнитного поля корпуса электронографа.

Подчеркнем, что все существующие программы первичной обработки экспериментальных дифрактограмм предполагают соосность дифракционных колец. Подчеркнем также, что отмеченный эффект может служить методом контроля за

небольшим отклонением геометрической схемы электронографа от перпендикулярности.

*Авторы благодарят профессора Г. Оберхаммера (университет г. Тьюбинген, Германия) за предоставленные фотоматериалы.*

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Атавин Е.Г., Фролова М.И. Источники систематических ошибок в электронографическом эксперименте // Вестник Омского университета. 2000. № 2. С. 33–35.

УДК 539.27

**Е.Г. Атавин, О.А. Калайтан**

*Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского*

**Л.В. Вилков**

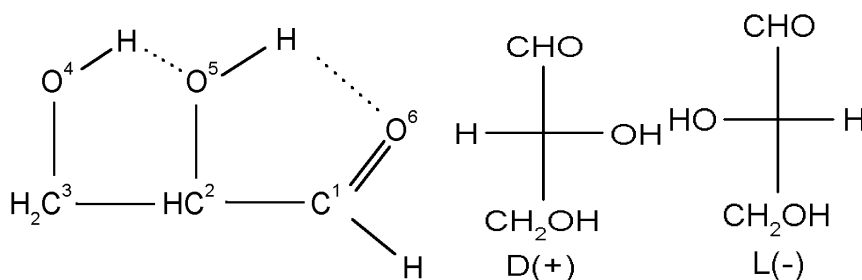
*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова*

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ  
И КОНФОРМАЦИОННОГО СОСТАВА  
МОЛЕКУЛ ГЛИЦЕРАЛЬДЕГИДА МЕТОДАМИ  
ГАЗОВОЙ ЭЛЕКТРОНОГРАФИИ  
И КВАНТОВОЙ ХИМИИ**

Геометрическое строение молекул и конформационный состав пара D-глицеринового альдегида исследованы методами газовой электронографии и квантовой химии. Получены равновесные значения длин связей, валентных и двугранных углов. Установлен сложный состав пара, состоящий в основном из пяти конформеров в соотношении: 53.1(14)%, 24.1(14)%, 4.30%, 8.70%, 4.80%.

*Ключевые слова:* газовая электронография, квантово-химические расчеты, геометрическое строение, конформационный состав, глицеральдегид, водородные связи.

Глицеральдегид – второй представитель ряда углеводов после гликолевого альдегида [1]. Существует в виде энантиомеров D(+) и L(-) или их рацемической смеси (рис. 1).



**Рис. 1.** Строение молекулы глицеринового альдегида

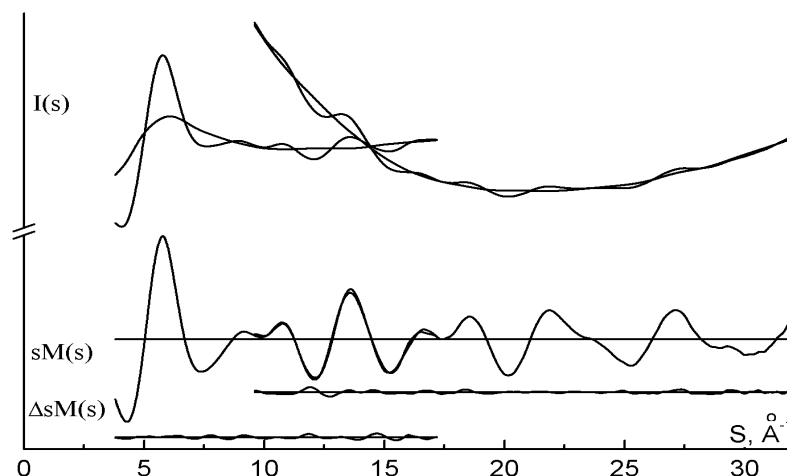
Глицеральдегид принят за конфигурационный стандарт, т. е. все вещества, получающиеся из D-глицеральдегида, относятся к D-ряду, а вещества, получающиеся из L-глицеральдегида, – к L-ряду.

Глицеральдегид играет важную роль в углеводном метаболизме [2], а также принадлежит к числу веществ, обнаруженных в космическом пространстве [3]. Оптически чистый глицеральдегид при комнатной температуре не кристаллизуется [4]. В кристалле DL-глицеральдегида молекулы

димеризованы в шестичленные циклические полуацетали [4]. В растворе и расплаве глицеральдегид существует в виде смеси мономерных и димерных молекул [4; 5], при этом доля последних с ростом температуры уменьшается [5]. В паре глицеральдегида методом микроволновой спектроскопии найдены несколько конформеров, а также продуктов его изомеризации и дегидратации, однако их относительные концентрации не определялись [6]. Цель данной статьи – изучение строения молекулы глицеральдегида в паре методами газовой электронографии и квантовой химии.

В работе использован образец D-глицеральдегида с чистотой 98 % [7]. Электронограммы получали в лаборатории газовой

электронографии химического факультета МГУ на электронографе ЭГ-100 М при ускоряющем напряжении 60кВ и температуре сопла испарителя 100–130 °С. Получено 3 пластинки с расстояния сопло-пластинка 362 мм и 4 пластинки с расстояния 194 мм. Одновременно для уточнения длины волны электронов были сняты электронограммы четыреххлористого углерода. Фотометрировали полученные электронограммы на сканере Epson Perfection 4870 PHOTO. Первичную обработку сканированных дифрактограмм вели по методике, представленной в работах [8; 9]. Фон на кривых интенсивности (рис. 2) проводился с использованием сплайн-функций.



**Рис. 2.** Экспериментальные интенсивности  $I(s)$ , фон, молекулярная составляющая интенсивности рассеяния  $sM(s)$  и разностные кривые  $\Delta sM(s) = sM(s)^{\text{эксп}} - sM(s)^{\text{теор}}$  пара D-глицеральдегида для длинного и короткого расстояний «сопло-фотопленка»

При вычислении кривой радиального распределения  $f(r)$  экспериментальная молекулярная составляющая интенсивности рассеяния в области  $0-3.4 \text{ \AA}^{-1}$  дополнялась теоретической моделью и умножалась на искусственный температурный фактор ( $b=0.002 \text{ \AA}^2$ ). Для уменьшения влияния неядерного рассеяния при вычислении кривой радиального распределения молекулярная составляющая интенсивности рассеяния делилась на  $g$ -функцию терма с максимальным вкладом в дифракционную картину (терм C-O).

**Конформационное поведение глицеральдегида.** При вращении вокруг двух связей C-C и двух связей C-O молекулы глицеральдегида в принципе возможно образование 81 конформера ( $3 \times 3 \times 3 \times 3$ ). Оптимизация их структур по-

казывает, что из-за образования водородных связей число конформеров снижается до 36. Десять из них находятся в пределах 4 ккал/моль, пять – в пределах 3 ккал/моль относительно основного конформера (рис. 3). Три конформера с наиболее низкой энергией (I–III) имеют по две внутримолекулярных водородных связи.

Относительные энергии Гиббса  $\Delta G$  при температуре электронографического эксперимента (388 K, MP2/cc-pVTZ) соответствуют мольным концентрациям конформеров I–V 65.1, 17.1, 4.3, 8.7, 4.8 % соответственно.

**Водородные связи в молекулах глицеральдегида.** Молекулы конформеров глицеральдегида стабилизированы внутримолекулярными водородными связями (рис. 1).

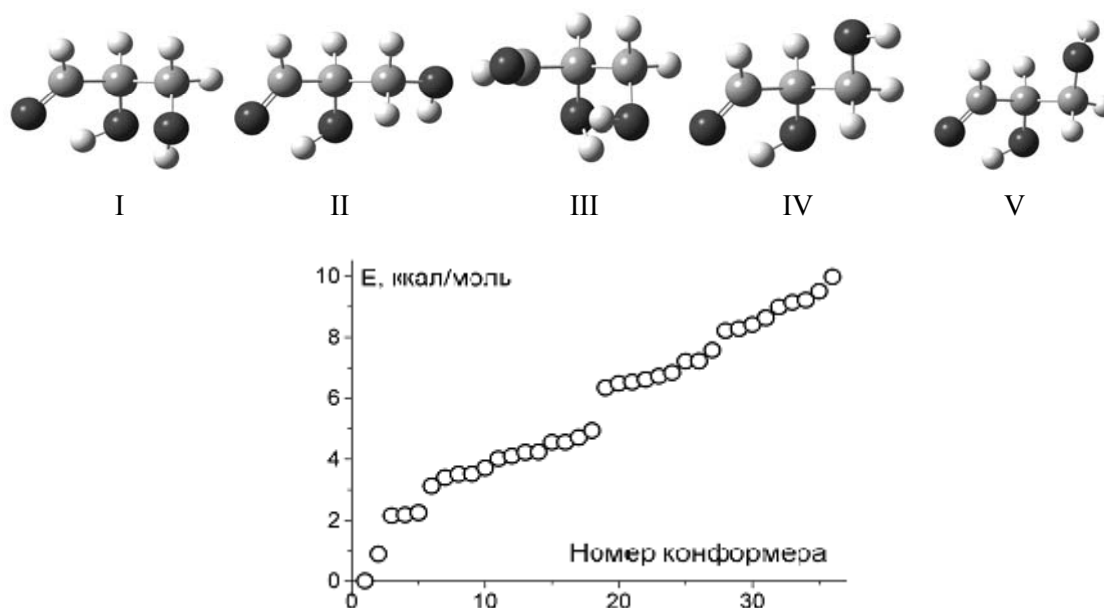


Рис. 3. Значения энергий конформеров глицеральдегида (B3LYP/cc-pvTZ)

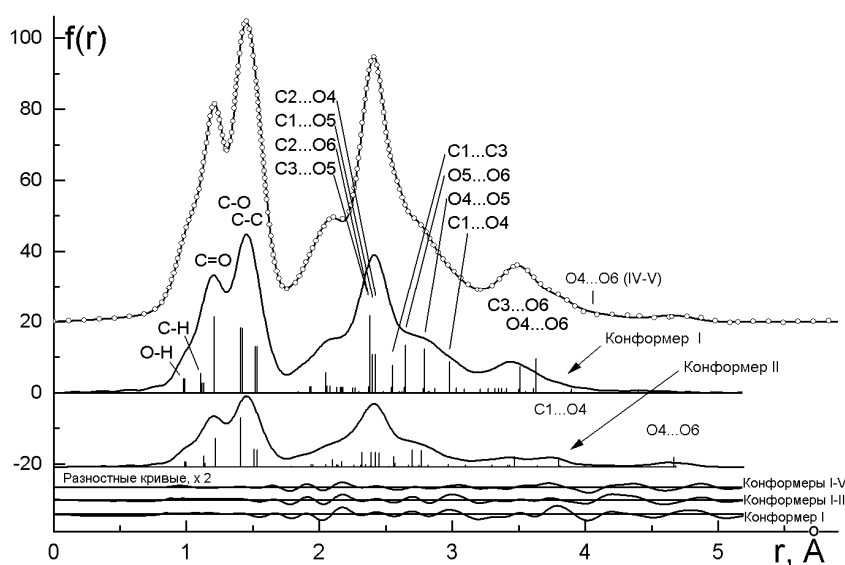


Рис. 4. Кривые радиального распределения глицеральдегида

Сравнивая конформеры с близким строением остова, но различным числом водородных связей (табл. 1), можно оценить энергию водородной связи  $O_4-H...O_5$  в 4 ккал/моль, а водородной связи  $O_5-H...O_6$  – в 7 ккал/моль.

Влияние водородных связей на структурные параметры молекулы глицеральдегида заметно различается (табл. 1). Длины связей C-O и C=O, у которых координаци-

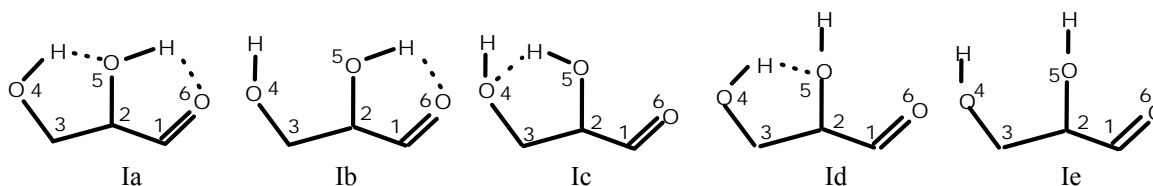
онное число атомов кислорода при образовании водородных связей увеличивается, заметно возрастают (на 0.01 Å и более). Связь C-O атома кислорода, формально не меняющего своего координационного числа, при образовании водородной связи несколько укорачивается (на 0.002–0.004 Å). Длины связей C-C при образовании водородных связей изменятся незначительно.

Таблица 1

Влияние образования водородных связей на энергию ( $E$ , кдж/моль) и структурные параметры основного конформера (I) глицеральдегида (B3LYP/сс-рV TZ)\*

	H-bond	$E$	$C_1-C_2$	$C_2-C_3$	$C_2-O_5$	$C_3-O_4$	$C=O$	$O_{4,5...H}$	$O_{6...H}$
Ia*	H...O <sub>5</sub> , H...O <sub>6</sub>	0.00	1.5194	1.5338	1.4115	1.4128	1.2132	2.302	2.025
Ib	H...O <sub>6</sub>	16.8	1.5220	1.5315	1.4016	1.4192	1.2122	–	2.047
Ic	H...O <sub>4</sub>	30.3	1.5179	1.5345	1.4024	1.4266	1.2066	2.212	–
Id	H...O <sub>5</sub>	29.6	1.5236	1.5365	1.4191	1.4116	1.2051	2.292	–
Ie	–	47.9	1.5255	1.5313	1.4053	1.4154	1.2043	–	–

\*Примечание. Варианты строения конформера I, отличающиеся числом водородных связей:



**Структурный анализ.** При проведении структурного анализа геометрические параметры были собраны в девять групп для уменьшения корреляций между ними. В четырех группах, объединяющих межъядерные расстояния {C=O}, {C<sub>3</sub>-O<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>-O<sub>5</sub>}, {C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>-C<sub>3</sub>}, {C-H, O-H}, и пяти группах, объединяющих углы {C<sub>1</sub>C<sub>2</sub>C<sub>3</sub>}, {C<sub>2</sub>C<sub>3</sub>O<sub>4</sub>}, {C<sub>1</sub>C<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, C<sub>2</sub>C<sub>1</sub>O<sub>6</sub>}, {C<sub>1</sub>C<sub>2</sub>C<sub>3</sub>O<sub>4</sub>} и {C<sub>3</sub>C<sub>2</sub>C<sub>1</sub>O<sub>6</sub>}, фиксировались малые разности, взятые из квантово-химического расчета (MP2(fc)/сс-рVQZ) (табл. 2, 3).

Варьировались также амплитуды колебаний (шесть групп) и относительное содержание конформеров I и II. Содержание конформеров III-V, значения валентных углов CCH и CON, а также торсионных углов CCOH были фиксированы на квантово-химических значениях, поскольку их влияние на дифракционную картину незначительно. Амплитуды колебаний и поправки R<sub>e</sub>-R<sub>a</sub> вычислялись по методике [10] на основании кубического силового поля, полученного в квантово-химическом расчете (MP2(fc)/сс-рVQZ).

Значения коэффициентов корреляции между сформированными группами, не превышающие 0.85, подтверждают возможность надежного определения значений перечисленных групп структурных параметров.

Таблица 2

Экспериментальные и теоретически рассчитанные структурные параметры молекулы конформера I глицеральдегида (расчеты: вычисленные –  $r_e$ , экспериментальные –  $r_e^{exp}$  и амплитуды  $I$  в Å, углы  $\angle_e$  в град.)

Длины связей	$r_e^*$	$r_e^{exp}$	$I^{exp}$	$I^{calc}$
OH	0.966	0.977(7) <sup>4</sup>	0.0691	0.0691
C-H	1.094	1.104(7) <sup>4</sup>	0.0753(40) <sup>1</sup>	0.0770
C=O	1.212	1.213(3) <sup>1</sup>	0.0359(40) <sup>1</sup>	0.0376
C <sub>2</sub> -O <sub>5</sub>	1.404	1.408(2) <sup>2</sup>	0.0513(50) <sup>2</sup>	0.0477
C <sub>3</sub> -O <sub>4</sub>	1.410	1.414(2) <sup>2</sup>	0.0515(50) <sup>2</sup>	0.0479
C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	1.507	1.510(5) <sup>3</sup>	0.0553(50) <sup>2</sup>	0.0517
C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	1.518	1.521(5) <sup>3</sup>	0.0557(50) <sup>2</sup>	0.0521

Таблица 3

Экспериментальные ( $\angle_e^{exp}$ ) и теоретически  $^{exp}$  рассчитанные ( $\angle_e$ ) валентные и двугранные углы молекулы конформера I глицеральдегида

Валентные углы	$\angle_e^*$	$\angle_e^{exp}$
C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> O <sub>6</sub>	121.5	123.9(9) <sup>7</sup>
C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	110.3	113.3(1.2) <sup>5</sup>
C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	110.0	107.3(9) <sup>7</sup>
C <sub>3</sub> C <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	109.2	108.8
C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	110.7	109.0(2.6) <sup>6</sup>
Двугранные углы	$\angle_e^*$	$\angle_e^{exp}$
6-1-2-3	-126.1	-125.8(3.5) <sup>9</sup>
6-1-2-5	-5.66	-5.7
1-2-3-4	59.9	62.3(4.5) <sup>8</sup>
5-2-3-4	-61.04	-57.0

\*Примечание. MP2/сс-рVQZ – стартовое приближение для структурного анализа;

1,2,3,4,5,6,7,8,9 – номера групп варьируемых параметров.

**Обсуждение результатов.** Моделирование экспериментальной дифракционной картины образца D-глицеральдегида одним конформером I приводит к достаточно низкому значению фактора согласования  $R_f=4.1$  %. Конформер II не способен описать дифракционную картину, наблюдаемую экспериментально ( $R_f=13$  %). Наилучшее согласие с экспериментальными данными (рис. 4) отвечает составу смеси конформеров I–V состава 53.1(16), 24.1(16), 4.30, 8.70, 4.80 % соответственно. Для параметров, значения которых уточнялись, в скобках приводится утроенное среднеквадратичное отклонение. Проверка возможности присутствия изомерного 1,3-дигидрокси-2-пропана (найденного в микроволновом исследовании [6]) как примеси к смеси конформеров I–V показала, что его концентрация, во всяком случае, не превышает предел, доступный электроно-графическому определению.

Авторы благодарят N. Vogt и J. Vogt (Universität Ulm, Germany) за предоставленный для исследования образец D-глицеральдегида и помощь в проведении квантово-химических расчетов.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Marstokk K.M., Møllendal H. Mol. Struct. 16(1973) P. 259.
- [2] Belasco J.G., Knowles J.R. Biochemistry. 19 (1980). 472–477.
- [3] Hollis J.M., Jewell P.R., Lovas F.J., Remijan A., Møllendal H. The Astrophysical Journal, 610:L21–L24, 2004 July 20.
- [4] Kobayashi Y., Igarashi T., Takahashi H., Higasi K. Infrared and Raman studies of the dimeric structures of 1,3-dihydroxyacetone D(+)- and DL-glyceraldehyde // J.Mol.Struct. 35 (1976). 85–99.
- [5] Yaylayan V.A., Harty-Majors S., Ismail A.A. Investigation of DL-glyceraldehyde-dihydroxyacetone interconversion by FTIR spectroscopy // Carbohydrate Research. 318 (1999). 20–25.
- [6] Lovas F.J., Suenram R.D., Plusquellic D.F., Møllendal H. The microwave spectrum of the C<sub>3</sub> sugars: glyceraldehyde and 1,3-dihydroxy-2-propanone and the dehydration product 2-hydroxy-2-propen-1-al // J.Mol.Spect. 222 (2003). 263–272.
- [7] Merch 13. 4494. Beilstein. Bul. 1. IV. 4114.
- [8] Atavin E.G. Analysis of the Metrological Characteristic of a Scanner Used as a Microphotometer // Instruments and Experimental Techniques. 2003. Vol. 46. N. 4. P. 484–487.
- [9] Atavin E.G., Vilkov L.V. The use of a scanner in the primary processing of electron diffraction patterns of vapors // Instruments and Experimental Techniques. 2002. Vol. 45. N. 2. P. 27–30.
- [10] Sipachev V.A. Vibrational effects in diffraction and microwave experiments: a start on the problem // J.Mol.Struct.(Theochem). 1985, V. 121. P. 143–151. Sipachev V.A Struct.Chem. 2000. V. 11. P. 167–172.

Вестн. Ом. ун-та. 2009. № 2. С. 160–163.

УДК 553.973

**Л.Н. Адеева, Т.А. Коваленко, В.И. Блинов**

*Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского*

**О.Н. Семенова, М.В. Тренихин**

*Институт проблем переработки углеводородов СО РАН, г. Омск*

## **ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА МИНЕРАЛЬНОЙ ЧАСТИ САПРОПЕЛЕЙ**

Состав минеральной части сапропелей месторождений Омской области изучен с применением ряда химических и физических методов. Установлен химический состав золы сапропелей, а также минералогические формы нахождения основных элементов.

*Ключевые слова:* сапропели, минеральный состав, химические и физические методы анализа.

В озерах Западной Сибири сосредоточены огромные залежи сапропелей, но их запасы практически не изучены, геологическая разведка проведена для ограниченного числа водоемов. В 1992 г. Сибирской торфопартией обследованы 157 озер в северных районах области. По предварительным оценкам, запасы сапропеля в Омской области составляют 156 млн тонн (300 млн м<sup>3</sup>) [1]. Очистка от сапропелевых отложений позволит восстановить природные функции озер, а донные отложения использовать в качестве дешевого местного органоминерального сырья. Чтобы разработать технологическую схему переработки данного сырья, необходимы глубокие исследования состава сапропелей. Органическое вещество сапропелевых отложений достаточно подробно изучено как по элементному, так и по групповому составу [2]. Изучение минеральной составляющей сапропелей дает возможность выяснить условия образования различных типов сапропелей, прогнозировать области применения сапропеля, а также поведение компонентов сырья в ходе переработки. Однако соответствующие исследования чаще всего ограничиваются элементным анализом, чего явно недостаточно. Исследование минералогического состава сапропелей позволяет прогнозировать возможности переработки и свойства получаемых продуктов. Изучение минеральной части сапропелей представляет и теоретический интерес, в частности, соответствующие данные важны для понимания генезиса каустобиолитов, для общего представления о круговороте веществ в природе.

Сапропели различных месторождений существенно отличаются по количественному содержанию золообразующих компонентов. Верхний предел зольности (85 %) принят условно, нижний составляет 4–7 % [3]. По способу связи золообразующих элементов с органическим веществом неорганические компоненты сапропелей подразделяют на три группы:



– неорганические компоненты, отделяемые физическим методом (механические включения минералов, аутигенные и терригенные минеральные примеси);

– неорганические компоненты, переходящие в раствор при кислотной или щелочной обработке;

– прочно связанные неорганические компоненты (органоминеральные соединения), а также компоненты, входящие в комплексные металлоорганические соединения.

Минералы сапропелевых отложений подразделяются на аллотигенные и аутигенные [4]. Аллотигенные минералы образуются вне сапропелевых отложений, привносятся в озера поверхностными водами, ветром и представлены кварцем, полевыми шпатами, слюдами, амфиболами. Все перечисленные минералы весьма устойчивы по отношению к химическим реагентам. В тонкодисперсной фракции сапропелей идентифицируются глинистые минералы (монтмориллонит, каолинит). Аутигенные минералы образуются биогенным или хемогенным путем непосредственно в процессе седиментации осадка и на стадии его последующего диагенетического преобразования. Наиболее часто встречаемыми минералами данной группы являются бета-керченит, сидерит и кальцит.

#### **Объекты и методики исследований**

Объектом наших исследований были сапропели различных месторождений Омской области, представляющие интерес с точки зрения их использования. В каждом водоеме донные отложения отбирали с лодки в нескольких точках при помощи специального сапропелевого бура. Отобранную генеральную пробу разделявали согласно рекомендациям, представленным в работе [5]. Изучали образцы нативного сапропеля, золу сапропелей, полученную при 600°C при доступе воздуха, продукты пиролиза сапропелей, полученные в среде аргона при температуре 900°C. Для анализа всех образцов использовали гравиметрический, атомно-абсорбционный, атомно-эмиссионный, рентгенофазовый и рентгенофлуоресцентный методы, а также ИК-спектроскопию.

Определение зольности вели по ГОСТ 11306-83 при температуре 800°C. Сущность метода заключается в озолении навески образца в муфеле, прокаливании

зольного остатка до постоянной массы при 800°C и взвешивании остатка.

Элементный анализ золы сапропелей проводили гравиметрическим методом, по методике, применяемой для анализа силикатных пород [6]. Содержание микроэлементов оценивали атомно-эмиссионным методом [7]. Дуговые спектры образцов золы регистрировали на спектрографе СТЭ-1 с помощью многоканального анализатора эмиссионных спектров МАЭС-10. Обработку полученных спектров проводили с использованием пакета «АТОМ-3®». Кроме того, для элементного анализа ряда образцов использовали метод рентгеновской флуоресцентной спектроскопии (спектрометр ARL OPTIM`X «TERMO»), методика анализа описана в работе [8]. Полученные спектры расшифровывали с использованием каталога рентгеновских линий WinXRF («TERMO»).

Минералогический состав образцов сапропелей изучали в ходе рентгенофазового анализа. Дифрактограммы получали «методом порошка» на рентгеновском стационарном дифрактометре ДРОН-3. Использовали  $\text{CuK}_\alpha$  – излучение с длиной волны 1,5405 Å. Режим работы рентгеновской трубки 35 кВт, 15 мА; юстировочные щели – 2, 0,25 мм. Качественный анализ проводили путем сопоставления экспериментальных значений межплоскостных расстояний и относительных интенсивностей дифракционных максимумов с набором соответствующих табличных значений для каждой из предполагаемых фаз. Идентификацию фаз вели по картотеке ASTM.

ИК-спектры регистрировали на фурье-спектрометре «Spectrum One FT-IR» фирмы Perkin-Elmer в области частот 4000–400  $\text{cm}^{-1}$  с разрешением 4  $\text{cm}^{-1}$ , число сканирований – 32. При этом образцы перетирали в агатовой ступке с KBr и прессовали в таблетки диаметром 7 мм.

#### **Полученные результаты и их обсуждение**

В таблице приведен химический состав золы исследуемых сапропелей, а также значения показателей зольности (в %). Во всех золах преобладает диоксид кремния (51,4–66,3 % масс.). В золе сапропеля озера Молодавское содержится значительное количество оксида кальция. Наибольшее содержание оксида алюминия обнаружено в золе сапропеля озера Пучай. На основе данных о зольности и

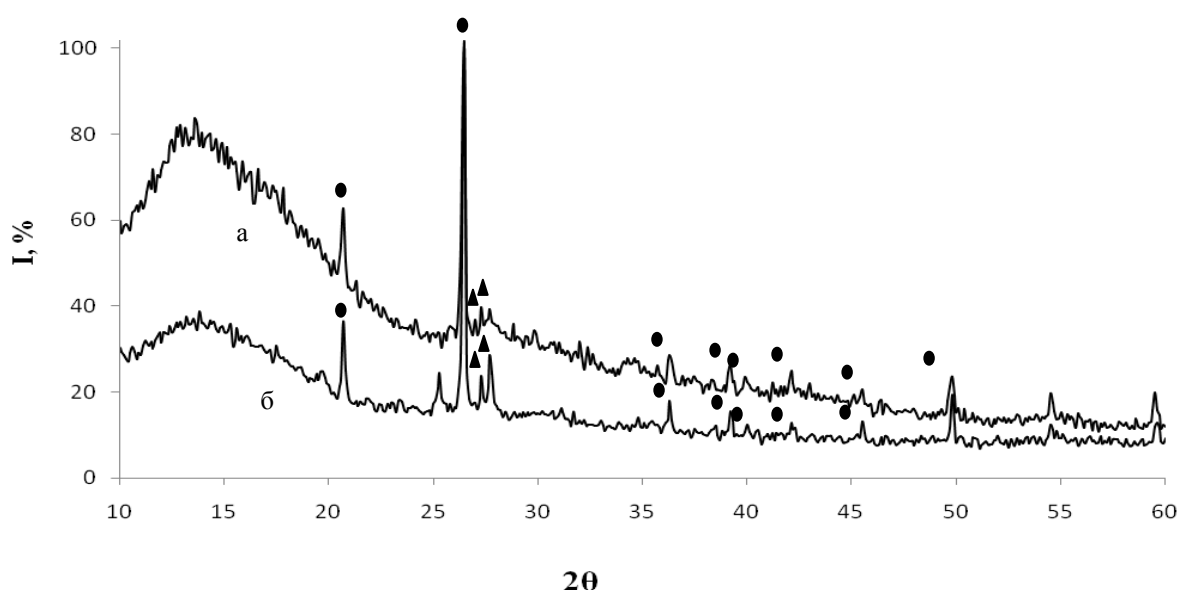
результатов химического анализа золы сапропелей месторождений Горькое и Пучай следует отнести к кремнеземистому виду. Кремнеземистый вид сапропелей широко распространен в Омской области

и составляет 42,2 % от общих запасов области [1]. Сапропели озера Молодавское и Жилой Рям по классификации, представленной в работе [2], относятся к органическому типу.

Химический состав золы сапропелей (900 °С), % масс

Озеро	A	SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CaO	MgO	K <sub>2</sub> O	ZnO	NiO	CoO
Молодавское	26,8	51,4	10,3	4,3	18,8	1,3	1,9	0,24	0,0038	0,0013
Горькое	64,0	62,7	10,0	3,9	7,9	5,0	1,8	0,0087	0,0051	0,0025
Жилой Рям	28,7	68,1	12,0	5,8	3,9	2,2	2,0	0,025	0,010	0,0024
Пучай	45,7	66,3	14,7	5,4	4,0	2,3	2,0	0,014	0,0089	0,0014

A – зольность



Дифрактограммы образцов сапропеля (а) и золы сапропеля (б) озера Жилой Рям:

● – кварц; ▲ – алюмосиликаты

В ходе качественного рентгено-флуоресцентного анализа в золах сапропелей достоверно обнаружены следующие элементы: кремний, алюминий, калий, кальций, титан, марганец, железо, цирконий, стронций, рубидий, цинк. Из неметаллов обнаружены фосфор, сера, хлор. В результате атомно-эмиссионного спектрального анализа в золе сапропелей нами также обнаружены Mn, Ti, Cr, Cu, Sr, Zr, Ba, Pb, V, Ga, Ce, La, Y, Mo на уровне  $10^{-4}$ – $10^{-2}$  % масс.

Данные рентгенофазового анализа сапропеля озера Жилой Рям, представленные на рисунке, свидетельствуют о наличии в составе образца кварца и смеси алюмосиликатов. В составе алюмо-

силикатов обнаружен анортоклаз – щелочной полевой шпат с преобладанием окиси натрия над окисью калия состава  $Na_{0,71}K_{0,29}AlSi_3O_8$ , а также санидин – силикат состава  $KAlSi_3O_8$ . На дифрактограмме золы сапропеля (см. рис.) в области  $2\theta=20-35$  наблюдается повышение фона, свидетельствующее о наличии в пробе аморфной фазы. Аморфная фаза диоксида кремния может быть удалена при двукратной обработке 5 %-ым раствором карбоната натрия по методике, предложенной в работе [9]. Установлено, что в пробе содержится аморфный диоксид кремния, при обработке происходит уменьшение массы золы сапропеля на 2 %. На дифрактограмме пробы после такой обработки

появляется несколько новых пиков, имеющиеся ранее пики становятся более интенсивными. Аморфный крем-незем накапливается в сапропелях биогенным путем из створок диатомовых водорослей [3]. Сапропели других месторождений Омской области также содержат в своем составе перечисленные минералы, что доказано при проведении рентгенофазового анализа их образцов. В ИК-спектрах продуктов пиролиза сапропелей наблюдаются несколько полос, которые были использованы для идентификации химической структуры поверхностных групп. В спектрах имеется широкая полоса с двумя максимумами при 1090 и 1040  $\text{см}^{-1}$ , что указывает на присутствие в образцах кремнезема и глинистых материалов. В спектрах некоторых образцов наблюдаются сильные полосы поглощения карбонатов (1430, 870  $\text{см}^{-1}$ ). Полосы поглощения вблизи 1730–1780  $\text{см}^{-1}$  могут быть обусловлены валентными колебаниями связи  $\text{C} = \text{O}$  в насыщенных альдегидах, кетонах, карбоновых кислотах, сложных эфирах, лактонах. Область ИК-спектра 3700–3100  $\text{см}^{-1}$  характеризует валентные колебания различных типов гидроксильных групп: в этой области идентифицированы силанольные  $\text{Si} - \text{O} - \text{H}$  группы (3748, 3652  $\text{см}^{-1}$ ).

На основании проведенного анализа можно сделать заключение, что основу минеральной части исследованных сапропелей составляют соединения кремния (51,4–68,3 %  $\text{SiO}_2$  на золу). В отложениях кремний находится в форме кварца, в составе алюмосиликатных минералов, а также в виде аморфного кремнезема. Наличие алюмосиликатов и аморфного кремнезема создает предпосылки для получения высокоэффективных сорбентов из сапропеля. Данное предположение подтверждается данными ИК-спектрокопии продуктов пиролиза сапропеля, показавшими наличие в образцах силанольных, силоксановых групп.

Алюминий входит в состав алюмосиликатов. В изучаемых образцах сапропелей аморфная форма  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , скорее всего, отсутствует, так как её переход в подвижное состояние обусловлен уровнем рН ниже 4,5, в то время как рН водно-солевой вытяжки

данных сапропелей не ниже 5. Для всех исследованных сапропелей свойственно повышенное содержание алюминия.

Содержание железа в золе исследованных сапропелей составляет 3,9–5,8 % масс. Основная часть терригенного железа связана с глинистыми минералами гидрослюдистого состава, и оно может рассматриваться как железосиликатное. В условиях сапропелеобразования также могут формироваться адсорбционные комплексы и соединения с органической составляющей сапропеля.

Обобщая полученные данные о составе и свойствах сапропелей месторождений Омской области, можно сделать следующие выводы.

1. Исследованные сапропели озер Омской области содержат 27–64 % минеральных компонентов, в основном это соединения кремния, алюминия, железа и кальция.

2. В неорганической части сапропеля доминируют кварц и алюмосиликаты. Показано наличие аморфного диоксида кремния.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Шмаков П.Ф., Третьяков А.Г., Левицкий В.А. Сапропелевые ресурсы озер Омской области и их рациональное использование // Кормовые ресурсы Западной Сибири и их рациональное использование: сб. науч. тр. Омск, 2005. С. 51–70.
- [2] Курзо Б.В., Богданов М.И. Генезис и ресурсы сапропелей Белоруссии. Минск, 1989. 157 с.
- [3] Лопотко М.З. Использование сапропелей в народном хозяйстве СССР и за рубежом. М., 1990. 150 с.
- [4] Тарантов А.С. Основные черты минералообразования в сапропелях в связи с использованием их в народном хозяйстве // Известия Высших учебных заведений. Геология и разведка. 1984. № 2. С. 51–56.
- [5] Карпов Ю.А., Савостин А.П. Методы пробоотбора и пробоподготовки. М., 2003. 243 с.
- [6] Гиллебранд В.Ф., Лендель Г.Э., Брайт Г.А., Гофман Д.И. Практическое руководство по неорганическому анализу. М., 1966. С. 930–959.
- [7] Арнаутков Н.В., Глухова Н.М., Яковлева Н.А. Приближенный количественный спектральный анализ природных объектов. Новосибирск, 1987. 102 с.
- [8] Эрхардт Х. Рентгенофлуоресцентный анализ. М., 1985. 254 с.
- [9] Лопотко М.З., Евдокимова Г.А. Сапропели и продукты на их основе. Минск, 1986. 190 с.

УДК 547.821.3:542.124

**А.А. Морозов, Г.П. Сагитуллина, Р.С. Сагитуллин**

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

**ФОРМАЛЬНАЯ КИНЕТИКА И МЕХАНИЗМ  
ПЕРЕГРУППИРОВКИ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ  
ПИРИДИНИЯ В АРОМАТИЧЕСКИЕ АМИНЫ  
ПОД ДЕЙСТВИЕМ ОСНОВАНИЙ\***

Применение методов формальной кинетики в исследовании механизма перегруппировки четвертичных солей пиридиния во вторичные ароматические амины под действием гидроксида натрия. Установлены первый кинетический порядок реакции, температурный коэффициент, активационные параметры ( $\Delta H^\ddagger$  and  $\Delta S^\ddagger$ ), независимость  $k_{obs}$ , концентрация гидроксида натрия.

*Ключевые слова:* кинетика, механизм, раскрытие пиридинового цикла, порядок реакции по реагенту, лимитирующая стадия, анаморфозы кинетических кривых, пиридий перхлорат.

**1. Введение**

Реакции образования карбо- и гетероциклических ароматических соединений, а также их превращения друг в друга составляют в органической химии обширную сферу исследований [1]. Следует выделить особый тип превращения шестичленных гетероаренов с сохранением размера ядра, в котором новая ароматическая (карбоциклическая или гетероциклическая) система образуется в результате элиминирования одного или нескольких эндоциклических гетероатомов либо гетероатом становится экзоциклическим. Особую трудность представляет прямое и обратное конвертирование пиридина в бензол из-за их стабильности вследствие высокой полной энергии делокализации.

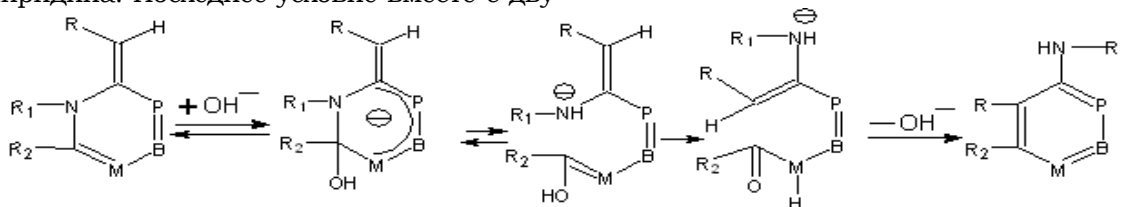
Теоретически такая цель может быть достигнута присоединением карбаниона к углеродному атому фрагмента  $=C=N-$  пиридинового цикла с дальнейшим расщеплением кольцевой системы и последующей рециклизацией без участия атома азота. Однако вследствие низкой электрофильности реакционного центра и недостаточно высокой основности C-нуклеофилов этот процесс не реализуется. Для реагентов с большей основностью (например, амид-ион) такое присоединение имеет место, хотя и без перехода в карбоциклическую ареновую структуру, поскольку реагент вступает в цикл [2].

Повысить активность  $\alpha$ -углеродного реакционного центра в пиридине можно с помощью N-алкилирования (кватернизации), которое обеспечивает уже при действии гидроксидных ионов раскрытие коль-

\*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 07-03-00783).

цевой системы с образованием ненасыщенного карбонильного соединения, причем без сохранения атома азота в открытой цепи. Такие процессы были известны давно [3; 4], но изомеризовать пиридин в N-фенил-алкиламин удалось только в 1970-х гг. Для этого кроме двойной активации исходного субстрата путем кватернизации и замещения одного атома водорода электроноакцепторной группой NO<sub>2</sub>, обеспечивающих смещение равновесия реакции присоединения OH-иона к субстрату в сторону образования аддукта открытого строения, потребовалось еще введение протонного заместителя в α-положение пиридина. Последнее условие вместе с дву-

мя первыми необходимо, чтобы инициированный распад, пройдя через эволюцию интермеdiатов, завершился процессом циклизации в замещенный анилин после двух быстрых односторонних стадий [5]. Этот тип перегруппировки циклических структур, названный изомеризационной рециклизацией, был впервые подробно исследован А.Н. Костом и сотрудниками [6]. Предложенная авторами обобщенная схема превращения исходного гетероциклического соединения в арил- и гетариламины включает ряд последовательных равновесных стадий образования интермеdiатов.



M, B, P – атомы углерода или азота.

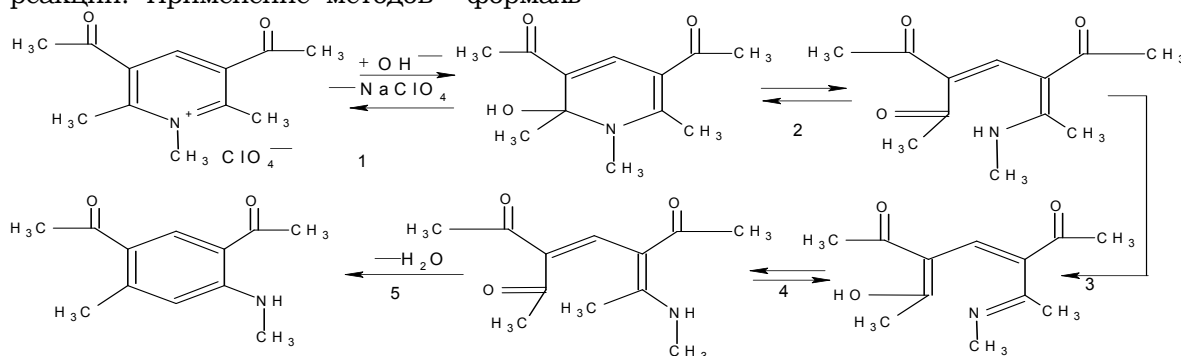
Стадия образования связи С–С является заключительным этапом процесса рециклизации, обуславливающим его необратимость. Детали электроциклического или ионного раскрытия псевдооснования и энергетический барьер поворота вокруг двойной связи P=B обсуждаются в работах [7; 8].

## 2. Постановка задачи

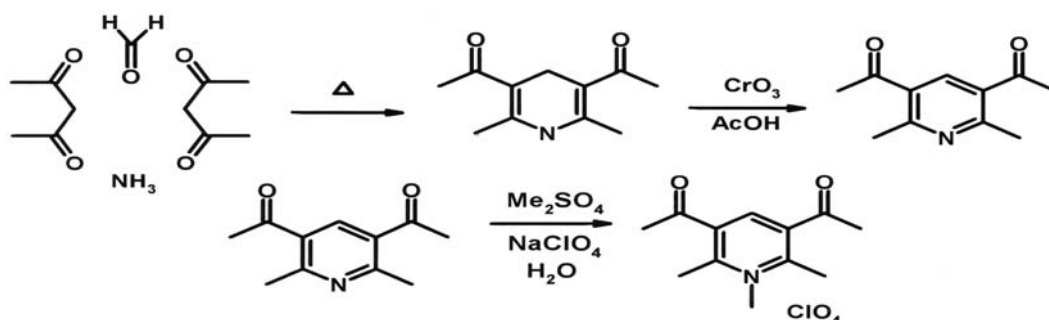
Последовательность стадий изомеризационной рециклизации была предложена в соответствии с известными теоретическими положениями о механизмах перегруппировок с учетом структурных особенностей субстрата. Отмечается [9], что этот механизм недостаточно подтвержден экспериментальными данными, в частности, ввиду ограниченной применимости спектроскопических методов для идентификации интермеdiатов и изучения маршрута реакции. Применение методов формаль-

ной кинетики к процессу превращения пиридиниевых солей в присутствии гидроксидов щелочных металлов может привести к экспериментальному подтверждению его ассоциативного характера. До настоящего времени кинетические исследования расщепления гетероароматического цикла проводились [3; 10] без учета последующей рециклизации.

В качестве модельного объекта нами был выбран 3,5-диацетил-N,2,6-триметилпиридиний перхлорат (далее – PP). Это вещество обладает высокой реакционной способностью ввиду наличия двух ацетильных групп. Субстрат PP количественно (96,7 %) превращается в соответствующий амин, причем превращение, проходящее по приведенной ниже схеме, не осложнено побочными реакциями.



Известно, что кинетику любых процессов лучше изучать, непосредственно определяя конечный продукт реакции. Конечный продукт превращения РР – дизамещенное производное анилина – имеет низкую растворимость в воде ( $4 \cdot 10^{-4}$  моль/л), его легко определять гравиметрическим методом. Таким образом, РР удовлетворяет всем основным требовани-



Превращение субстрата РР во вторичный амин проводили при 30, 40 и 50° С ( $\pm 0,1$  °С), причем температуру поддерживали с точностью до 0,1 °С. Начальное соотношение молярных концентраций субстрата  $C_{12}H_{18}NO_7Cl$  и реагента NaOH варьировали от 1:1,5 до 1:5, причем исходная концентрация субстрата во всех случаях была равна 0,0476 моль/л. Гомогенность реакционной смеси достигалась за счет использования в качестве растворителя бинарной смеси этанола и пиридина в объемном отношении 3:1. Массу конечного продукта реакции определяли, отбирая в ходе реакции пробы объемом 2,0 мл и разбавляя их 5 %-ой уксусной кислотой до 10 мл, что приводило к выпадению продукта в осадок и обеспечивало возможность его последующего взвешивания.

Полученные данные позволяли рассчитывать функцию  $y = -\ln(1 - [C]/[C]_0)$ , где  $[C]$  и  $[C]_0$  – текущая и начальная концентрация реагента. Кинетические кривые (полулогарифмические анаморфозы) строили в координатах  $y = f(t)$ . В таких координатах кинетические кривые прямолинейны (рис. 1–3) и аппроксимируются уравнением  $y = ax + b$ , причем величина  $b$  статистически незначима. Коэффициенты линейной корреляции ( $R$ ) во всех случаях превышали 0,97, т. е. корреляция статистически достоверна. Возникает лишь вопрос о допустимости приравнивания концентрации реагента  $OH^-$

ям, которые надо учитывать при выборе объекта кинетических исследований.

### 3. Экспериментальная часть

Исходный 3,5-диацетил-N,2,6-триметилпиридиний перхлорат (РР) синтезировали в соответствии с приведенной ниже схемой по методике, предложенной в работе [11]:

и экспериментально измеренной концентрации продукта. Однако, как показано в работе [12], стадии 4 и 5 протекают значительно быстрее, чем стадия 3. Удаление гидроксильного иона на нелимитирующей стадии процесса делает нашу трактовку кинетических зависимостей корректной. По кинетическим данным рассчитывали константы скорости реакции. Сходимость результатов для констант первого порядка характеризуется отклонениями от среднего порядка 5–8 %.

### 4. Полученные результаты и их обсуждение

При изучении кинетики процесса прежде всего необходимо установить функциональную зависимость, существующую между скоростью реакции и концентрацией компонентов в реакционной системе. Для этого использовали интегральный подход [13], т. е. в ряде точек одной и той же кинетической кривой рассчитывали константу скорости. Во всех случаях константа при адекватности уравнения кинетической кривой экспериментальным данным должна сохранять постоянное значение (в пределах ошибки измерений), иными словами, не испытывать «дрейфа».

Мы предположили, что исследуемая реакция описывается кинетическим уравнением первого порядка по реагенту:

$$d[C]/dt = -k[C].$$

Тогда после интегрирования в интервале от  $[C]$  до  $[C]_0$  константа скорости может быть рассчитана по уравнению:

$$k_{\text{эфф}} = 1/t \ln [C]_0 / ([C]_0 - [C]) = y / t.$$

В этом случае в эксперименте должна наблюдаться линейная зависимость

функции  $y$  от времени, что и было подтверждено в ходе наших исследований при всех температурах (рис. 1). Угловой коэффициент соответствующих кинетических кривых численно равен константе скорости реакции ( $k_{\text{эфф}}$ ).

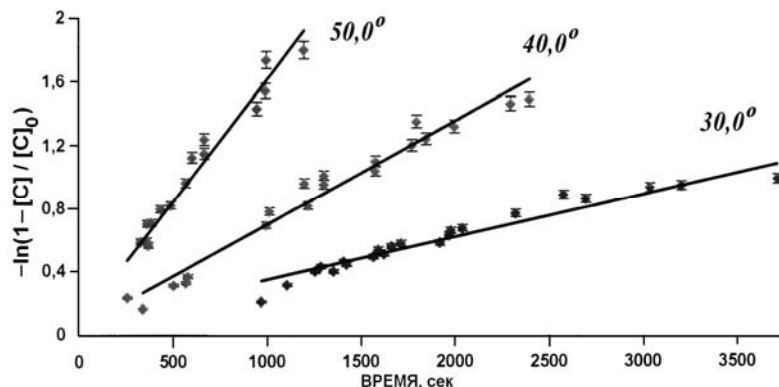


Рис. 1. Полулогарифмические анаморфозы кинетических кривых при разных температурах: соотношение реагентов – 1:2

Таким образом, реакция изомеризационной рециклизации субстрата РР описывается кинетическим уравнением первого порядка по реагенту. Корректность этого вывода подтверждается расчетом коэффициента линейной корреляции ( $R$ ) с использованием параметров  $y - t$ . Его величина близка к единице (0,941–0,999) только в случае использования кинетических данных, полученных на основе уравнения первого порядка. В случае же расчетов по второму или третьему порядку линейная корреляция статистически недостоверна: значения  $R$  лежат в интервалах (0,432–0,677) и (0,261–0,625) соответственно. В каждом интервале значение  $R$  варьирует в зависимости от температуры.

Для понимания механизма рециклизации определение порядка реакции имеет принципиальную важность, поэтому мы использовали еще один метод его рас-

чета: сопоставляли отношения характеристических времен, найденных в эксперименте (например,  $\tau_{1/2} : \tau_{1/3}$ ), и теоретических значений этих отношений, взятых для реакций первого порядка, или отношения концентраций компонентов для других типов кинетических зависимостей [14]. В этом случае нижний индекс соответствует глубине превращения реагента. Как видно из таблицы 1, соответствие наблюдается только в отношении данных, полученных для реакции первого порядка. Отношения, теоретически характерные для реакций второго или третьего порядка, не соответствуют экспериментальным данным.

Достоверно установленный характер изменения концентрации реагента во времени позволил провести температурное исследование реакции в интервале 20–50 °С (табл. 2).

Таблица 1  
Теоретические и экспериментально найденные соотношения характеристических времен реакции

Характеристическое отношение	1-й порядок		2-й порядок		3-й порядок	
	теория	эксперимент	теория	эксперимент	теория	эксперимент
$\tau_{1/2} / \tau_{1/3}$	1,70	1,83	2,00	1,28	2,40	1,21
$\tau_{1/2} / \tau_{1/4}$	2,40	2,44	3,00	1,54	3,86	1,34

Таблица 2

Результаты расчета коэффициента Вант-Гоффа ( $\gamma$ ), энергии ( $\Delta H^\ddagger$ ) и энтропии ( $\Delta S^\ddagger$ ) активации при двух соотношениях субстрат-реагент

Температура, °С	Константа скорости, $k_{эфф} \cdot 10^4, c^{-1}$	$\Delta H^\ddagger$ , кДж/моль	$\Delta S^\ddagger$ , Дж/моль·К	$\gamma$
<b>Субстрат-реагент 1:2</b>				
20	1,76	120±22	57±12	6,5
25	4,48			4,4
30	9,44			
<b>Субстрат-реагент 1:4</b>				
30	3,05	67±9	89±11	2,2
40	6,88			
50	16,4			2,5

Резкое различие экспериментально найденных коэффициентов Вант-Гоффа в крайних точках концентрационного соотношения реагент-субстрат нельзя приписать изменению в  $\delta_R \Delta \partial \ln Q / \partial T$  за счет внешнего вклада, поскольку он обычно пренебрежимо мал [15]. Целесообразно предположить, что наблюдаемый эффект обусловлен сменой лимитирующей стадии в сложном процессе изомеризационной рециклизации. Это объяснило бы существенное изменение температурного коэффициента, энергии и энтропии активации при переходе к другому соотношению реагентов. Очевидно, механизм перегруппировки должен включать, по крайней мере, две существенно важные стадии, различающиеся внутренним вкладом в температурный коэффициент  $\delta_R \Delta \partial \ln Q / \partial T$ .

Расширить и обосновать этот вывод удалось, исследуя влияние соотношения субстрат-реагент на константу скорости при постоянной температуре. Серии линей-

аризованных кинетических кривых, полученные при температуре 30 °С при разном соотношении реагентов (рис. 2–3), показывают, что соотношение реагентов влияет на константу скорости реакции преимущественно при небольшом избытке щелочи. При большом ее избытке константа скорости перестает зависеть от начальной концентрации щелочи (рис. 4). Численные значения рассчитанных констант скорости и соответствующие им стандартные отклонения (s) приведены в таблице 3. Коэффициенты вариации соответствующих констант невелики 5–9 %, т. е. наблюдаемая в эксперименте (рис. 4) зависимость константы от соотношения реагентов не может быть объяснена случайными погрешностями измерений. «Кривые с насыщением» типичны для процессов, в которых эффективная константа скорости является мультипликативной величиной, включающей ряд сомножителей, в том числе и констант равновесий [16].

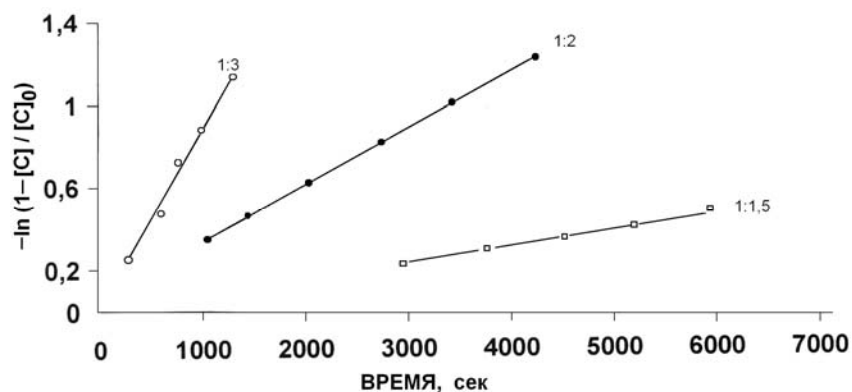


Рис. 2. Полулогарифмические анаморфозы кинетических кривых при низких соотношениях  $[PP] / [NaOH]$



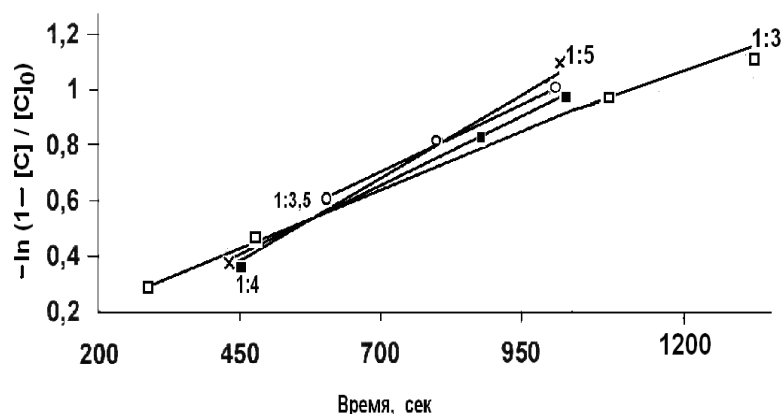


Рис. 3. Полулогарифмические анаморфозы кинетических кривых при высоких соотношениях  $[PP] / [NaOH]$

Таблица 3

Изменение константы скорости реакции при варьировании начального соотношения реагентов

Соотношение реагентов	$k_{эфф} \cdot 10^4, c^{-1}$	$s \cdot 10^5$	$\Delta k_{эфф} \cdot 10^4, c^{-1}$
1,50	0,78	0,05	0,0841
2,00	3,07	0,21	0,336
3,00	8,93	0,59	0,937
3,50	9,45	0,74	1,18
4,00	9,46	0,83	1,33
5,00	9,56	0,52	1,29

Сдвиг равновесия, достигаемый изменением концентрации одного из реагентов, может привести в конечном итоге к полному включению другого компонента в продукт взаимодействия, причем его образование нелинейно зависит от избытка первого. Мы предполагаем, что именно этот эффект объясняет экспериментальную зависимость  $k_{эфф}$  от начальной концентрации щелочи (рис. 4).

Очевидно, кроме двух простых односторонних последовательных стадий, о наличии которых свидетельствуют разные значения температурных коэффициентов (табл. 2), механизм процесса должен включать, по крайней мере, одну стадию равновесия между субстратом и реагентом [16].

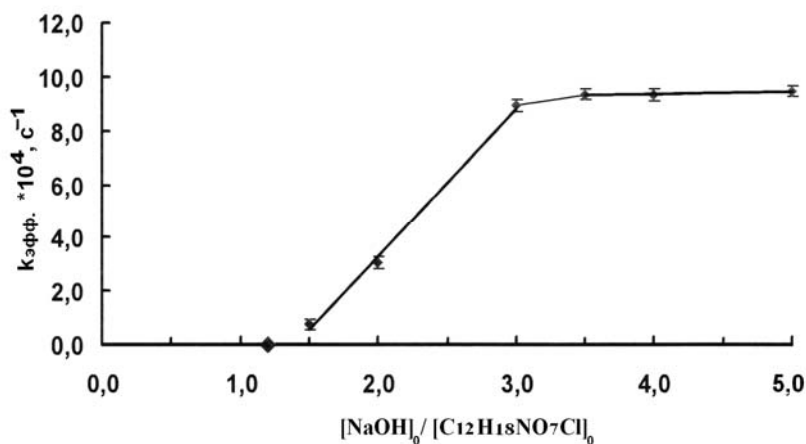
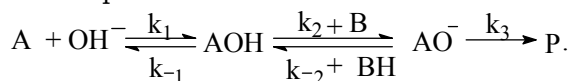


Рис. 4. Влияние концентрации щелочи на константу скорости изучаемого процесса

Кинетическая схема изомеризационной рециклизации, получив экспериментальные подтверждения, тем не менее, не может ограничиться только этим, а вследствие существования дополнительных данных нуждается в расширении. Последнее обусловлено превращением первого интермедиата под действием основных катализаторов, например, аминов, которые в этой роли могут заменить гидроксидный ион [17]. И хотя количественная связь  $k_{эфф}$  с параметром уравнения Бренстеда не установлена, следует сразу за первой стадией ввести дополнительный равновесный процесс образования второго интермедиата, последующее расщепление которого будет лимитирующей стадией. Поэтому общая кинетическая схема сформирована в трехстадийном варианте:



Чтобы получить уравнение для скорости на основе принципа стационарности, третья стадия рассматривается как лимитирующая:

$$d [AO^-] / dt \approx 0$$

С учетом выражения для константы равновесия первой стадии

$$K_1 = k_1 / k_{-1} = [AOH] / [A] [OH^-]$$

Общая скорость процесса определяется превращением второго интермедиата:

$$v = k_3 [AO^-] = \frac{k_2 k_3 [AOH] [B]}{k_3 + k_{-2} [BH]}.$$

Считая вследствие малого возмущения равновесия на первой стадии  $[AOH] \approx \text{const}$  и обращая числитель и знаменатель в последнем уравнении, находим линейную зависимость для обратного значения эффективной константы скорости:

$$\frac{1}{k_{эфф}} = \frac{1}{k_2 [B]} + \frac{[OH^-]}{k_2 k_3 [B]}, \quad \text{где: } \frac{1}{k_{эфф}} = \frac{[AOH]}{v}.$$

Именно эту зависимость для случая  $B = OH^-$  демонстрирует линейный график (рис. 5), построенный для широкого диапазона начальных концентраций щелочи на основе данных таблицы 3. Это является экспериментальным доказательством обоснованности вышеизложенной кинетической схемы, а следовательно, и такого механизма изомеризационной рециклизации, который включает две предравновесные стадии взаимодействия субстрата с реагентом и в качестве лимитирующей стадии —

превращение второго интермедиата в конечный продукт.

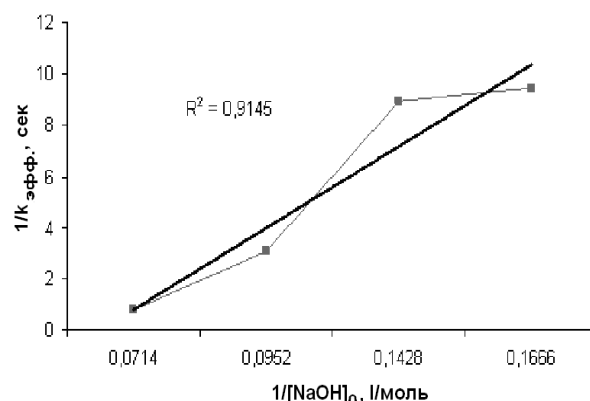


Рис. 5. Зависимость константы скорости изомеризационной рециклизации PP от концентрации NaOH (в координатах  $1/k_{эфф}$  –  $1/[NaOH]_0$ )

Выполненное в рамках формальной кинетики исследование не дает ответа на естественные вопросы, связанные со строением активированных комплексов и характером распределения зарядов в них. Но использованные нами методы оказались вполне пригодны для установления общего заряда и стехиометрического состава переходного состояния. Применение методов формальной кинетики является необходимым этапом в изучении превращения солей пиридиния под действием оснований, так как получаемые с их помощью количественные параметры нужны для оценки реакционной способности субстрата, влияния растворителя, солевых эффектов и расчета активационных параметров. Такое перечисление — это программа будущих исследований. Залогом её успешного воплощения должна стать не химическая интуиция, а корректный анализ числовых величин, рассчитанных с помощью уравнений формальной кинетики для адекватных экспериментальных условий.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Van der Plas H.C. Ring Transformations of Heterocycles. L.; N. Y., 1973. V. 1,2.
- [2] Ibidem. С. 68–76.
- [3] Kosover E.M., Patton J.W. The Products and Kinetics of Hydrolysis of Cyanopyridinium Ions // Tetrahedron. 1966. V. 22. P. 2081.
- [4] Цит. по: Неницеску К.Д. Органическая химия. М., 1963. Т. 2. 717 с.
- [5] Кост А.Н., Сагитуллин Р.С., Громов С.П. Рециклизация электронодефицитных азотистых гетероароматических соединений // Химия ге-

- тероциклических соединений. 1978. № 8. С. 1141.
- [6] *Кост А.Н., Сагитуллин Р.С.* Новые перегруппировки азотистых гетероароматических соединений // Журн. орг. хим. 1980. Т. XVI. Вып. 3. С. 667.
- [7] *Атавин Е.Г., Тихоненко В.О., Сагитуллин Р.С.* Изучение механизма изомеризационной рециклизации методом молекулярной механики // Вестн. Ом. ун-та. 1998. № 1. С. 41–43.
- [8] *Их же.* О механизме изомеризационной рециклизации диацетильных производных пиридиниевых солей // Химия гетероциклических соединений. 2001. С. 923.
- [9] *Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П.* Органическая химия. М., 2004. Часть 2. С. 613–615.
- [10] *Eisenthal R., Katritzky A.R.* The Ring-opening of N-Methoxy-pyridinium Perchlorate by Hydroxide // Tetrahedron. 1965. V. 21. P.2 205.
- [11] *Шкиль Г.П., Сагитуллин Р.С., Муцениец Д., Лусис В.* О рециклизации солей 3,5-диацетил- и 3,5-дицианопиридиния под действием оснований // Химия гетероциклических соединений. 1990. С. 848.
- [12] *Damji S. W.H., Fyfi C.A.* Flow Nuclear Magnetic Resonance Investigation of the Intermediates Formed by the Attack of Alkoxide Ions on Substituted Pyridinium Ions // Journal of Organic Chemistry. 1979. V. 44. № 11. P. 1757–1761.
- [13] *Лейдлер К.* Кинетика органических реакций. М., 1966. 19 с.
- [14] *Панченков Г.М., Лебедев В.П.* Химическая кинетика и катализ. М., 1974. С 28–29.
- [15] *Гаммет Л.* Основы физической органической химии. М., 1972. 518 с.
- [16] *Дженкс В.* Катализ в химии и энзимологии. М., 1972. С. 427–428.
- [17] *Kunugi S., Okubo T., Ise N.* A Study on the Mechanism of the reaction of N-(2,4-Dinitrophenyl)-3-carbomoylpyridinium Chloride with Amines and Amino Acides with Reference to Effect of Polyelectrolyte Addition // J. Am. Chem. Soc. 1976. V. 98. P. 2282.

Вестн. Ом. ун-та. 2009. № 2. С. 172–176.

УДК 543.422

**А.С. Шелпакова**

*Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского*

**Е.Н. Масякова**

*ГНУ «Сибирский НИИ птицеводства РАСХН»*

### **ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МНОЖЕСТВЕННОЙ ЛИНЕЙНОЙ РЕГРЕССИИ В СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОМ АНАЛИЗЕ СМЕСЕЙ ВИТАМИНОВ**

Применение метода множественной линейной регрессии в спектрофотометрическом анализе неразделенных смесей витаминов позволяет одновременно определять 4-6 компонентов с перекрывающимися спектрами. Оптимизация спектральных диапазонов ведет к снижению погрешностей и коэффициентов вариации до уровня 5% отн. и менее.

*Ключевые слова:* спектрофотометрический анализ, метод множественной линейной регрессии, органические вещества.

Традиционно для молекулярного анализа многокомпонентных смесей органических веществ применяют различные хроматографические методы. Так, многокомпонентные смеси водорастворимых витаминов обычно разделяют методом высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) [1–3]. Применительно к рутинным анализам спектрофотометрия неразделенных смесей является более экономичным и экспрессным методом, чем ВЭЖХ. Для спектрофотометрического анализа требуется более простое и доступное оборудование, не нужны дорогие и токсичные растворители. Это весьма важно при проведении технического контроля. Однако для количественного определения витаминов в многокомпонентных смесях, например в поливитаминных препаратах (премиксах), спектрофотометрию практически не используют из-за наложения спектров поглощения разных витаминов. Известно, что применение метода множественной линейной регрессии (МЛР) и других хемометрических алгоритмов расширяет возможности спектрофотометрии и позволяет анализировать некоторые смеси без разделения компонентов [4–5]. Для спектрофотометрического анализа поливитаминных препаратов метод МЛР ранее не применялся. Не ясно, какой может быть точность соответствующих методик анализа, особенно при не вполне аддитивном светопоглощении компонентов. Спектрофотометрический анализ премиксов осложняется и тем, что содержание разных витаминов в одном и том же образце может сильно различаться (на порядок и более).

Целью настоящего исследования была разработка методик спектрофотометрического определения витаминов в многокомпонентных смесях с использованием МЛР, а также оценка аналитических возможностей соответствующих методик. Объекты исследования – четырех-, пяти- и шестикомпонентные модельные смеси витаминов В1,

B2, B3, B5, B6 и K3 (химически чистые реактивы производства фирмы Supelko, США). Качественный и количественный состав всех смесей примерно соответствовал реальному составу премиксов. Кроме «номинальных» смесей, состав которых точно соответствовал рецептуре какого-либо премикса (табл. 1), было приготовлено несколько десятков других модельных

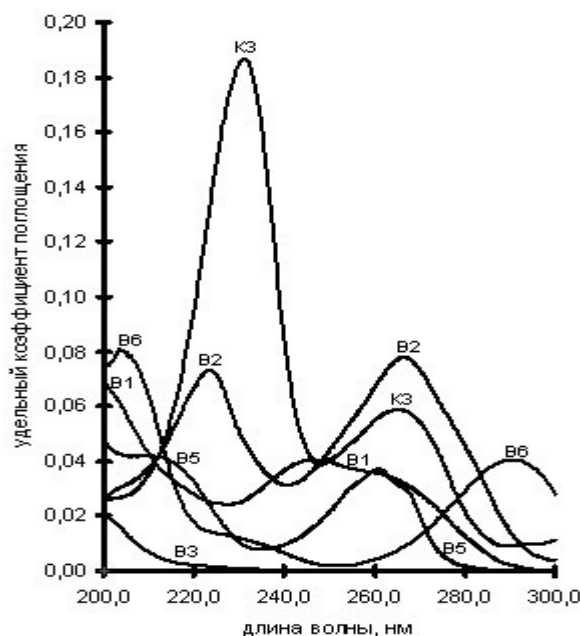
смесей, где содержание одного или нескольких витаминов отличалось на  $\pm 10\%$  отн. или  $\pm 20\%$  отн. от содержания того же витамина в растворе соответствующей «номинальной» смеси. Растворы витаминов и их модельных смесей готовили, используя в качестве растворителя 0,01 М водный раствор соляной кислоты.

Таблица 1  
Качественный и количественный состав растворов «номинальных» смесей

Моделируемый премикс	Количество компонентов	Концентрация витаминов, мкг/мл					
		B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	B <sub>3</sub>	B <sub>5</sub>	B <sub>6</sub>	K <sub>3</sub>
–	4	–	2,0	3,4	10,0	1,3	–
Премикс 0,1 % на цеолите	5	0,5	2,0	10,0	15,0	2,0	–
Премикс 0,25 % на цеолите	6	1,1	2,6	4,4	13,2	1,8	0,9

Спектры поглощения растворов индивидуальных витаминов (рис.) и их смесей регистрировали на компьютеризированном спектрофотометре СФ-2000 в кварцевых кюветах толщиной  $l = 1,0$  см, в диапазоне 200–500 нм с шагом 0,2 нм. Для вычисления удельных ( $k_{уд}$ ) коэффициентов поглощения снимали спектры растворов индивидуальных витаминов для трех разных concentra-

ций ( $C$ , мкг/мл), проводя на каждом концентрационном уровне не менее 5 повторных измерений оптической плотности ( $A$ ). Расчет удельных коэффициентов вели по формуле  $k_{уд} = A / l \cdot C$ . Полученные результаты усредняли. Сходимость вычисленных коэффициентов поглощения характеризуется относительным стандартным отклонением  $S_r = 0,005-0,01$ .



Спектры поглощения индивидуальных витаминов

Алгоритм МЛР предусматривает решение переопределенной системы алгебраических уравнений. Расчеты концентраций по методу МЛР выполняли с применением пакета Microsoft Excel (опция «Анализ дан-

ных», подфункция «Регрессия»). В нашем случае каждая система содержала несколько сот линейных уравнений вида

$$A^i = \sum_{j=1}^n k_j^i \cdot l \cdot c_j, \quad (1)$$

где  $A^i$  – оптическая плотность раствора смеси на  $i$ -ой длине волны,  $k_j^i$  – удельный коэффициент поглощения  $j$ -го витамина на той же длине волны, а  $c_j$  – концентрация этого витамина в растворе. Величина  $n$  (число компонентов) равна 4–6.

Перед применением МАР необходимо было проверить аддитивность светопоглощения растворенных смесей. Оказалось, что спектры всех исследованных 4-компонентных смесей практически аддитивны, а в спектрах 5–6-компонентных смесей имеются небольшие участки со статистически значимыми ( $\alpha = 0,05$ ) отклонениями от аддитивности (обычно положительными).

Выполнение условия аддитивности в случае 4-компонентной смеси витаминов позволило провести предварительный компьютерный эксперимент, целью которого было оптимизировать условия анализа соответствующих смесей. Вначале, используя найденные в эксперименте коэффициенты поглощения и задавая концентрации витаминов, моделировали идеальный спектр соответствующей смеси, затем «возмущали» его с помощью подфункции пакета Excel «Генерация случайных чисел», моделируя случайные погрешности измерений. При этом учитывали сходимость соответствующих коэффициентов поглощения:

$$A^{*i} = A^i + \sum_{j=1}^n k_j^i \cdot l \cdot S_j^i \cdot C_j \cdot P, \quad (2)$$

где  $A^{*i}$  – «возмущенная» оптическая плотность смеси при  $i$ -ой длине волны,  $A^i$  – «идеальная» оптическая плотность той же смеси на той же длине волны, вычисленная по уравнению (1),  $S_j^i$  – стандартное отклонение коэффициента поглощения  $j$ -го компонента на  $i$ -ой длине волны,  $P$  – положительное или отрицательное случайное число, получаемое с помощью нормально распределенной генерации случайных чисел (среднее=0, S=0.1). Таким способом получали по три «возмущенных» спектра каждой смеси. Обработка этих данных в широком диапазоне длин волн стандартным методом МАР приводила к неудовлетворительным результатам – погрешности

определения некоторых витаминов иногда достигали 15% отн. и более. Методики анализа оптимизировали путем подбора для каждого витамина своего спектрального диапазона, который, как правило, соответствовал максимумам поглощения компонентов. Например, для витамина В<sub>2</sub> это области 282–301, 367–375 нм, для В<sub>5</sub> 210–232 нм, для В<sub>6</sub> – 200–230 и 260–301 нм. Что касается В<sub>3</sub>, ввиду его наименьшего вклада в оптическую плотность смесей (5–6-компонентных), подобрать для него оптимальный спектральный диапазон удается только с применением разностного спектра, т. е. после вычитания из оптической плотности смеси вклада основного компонента – витамина В<sub>5</sub>. В итоге для определения витамина В<sub>3</sub> это получились области 200–230 и 260–301 нм.

Найденные в компьютерном эксперименте спектральные диапазоны затем были использованы для анализа реальных смесей (расчет концентраций в этом случае вели при трехкратном повторении всех операций). Из результатов, представленных в таблице 2, видно, что оптимизированная методика анализа 4-компонентной смеси по методу МАР дает довольно точные результаты. Как правило, относительные погрешности и коэффициенты вариации для всех компонентов не превышают 5 % отн. (по модулю). Отметим, что изложенный выше способ подбора условий анализа, основанный на проведении компьютерного эксперимента, в известной нам литературе не описан.

Таблица 2  
Анализ реальной смеси

Витамин	Введено, мкг/мл	Реальная смесь		
		Найдено, мкг/мл	$\delta$ , %	W, %
В <sub>2</sub>	2,4	2,53	5,5	0,1
В <sub>5</sub>	12,0	11,72	-2,3	4,9
В <sub>6</sub>	1,6	1,57	-2,1	0,1
В <sub>3</sub>	3,4	3,49	2,7	4,7

В спектрах 5–6-компонентных смесей имеются отдельные участки, где были выявлены статистически значимые отклонения от аддитивности, например, область 200–220 нм. В подобных случаях компьютерное моделирование спектров смесей невозможно. Для оптимизации условий анализа соответствующих смесей из общего спектрального диапазона исключали «неад-

дитивные» участки, а также те участки спектра, на которых погрешности определения компонентов превышали 20 % отн.

Затем рассчитывали содержание компонентов по методу МЛР. Оказалось, что результаты определения трех витаминов – В<sub>2</sub>, В<sub>5</sub> и В<sub>6</sub> – вполне удовлетворительны при использовании одного и того же широкого спектрального диапазона 220–500 нм. Еще два витамина – К<sub>3</sub> и В<sub>1</sub> – хорошо определяются только по разностному спектру (после исключения вклада ранее найденного витамина В<sub>5</sub>) и ограничения спектрального диапазона. Витамин В<sub>3</sub> в подобных смесях точно определить не удастся. Независимо от выбранного спектрального диапазона относительная погрешность определения слабопоглощающего в УФ-области витамина В<sub>3</sub> в

6-компонентных смесях достигала 40 %. Вероятно, это обусловлено небольшим вкладом данного витамина в оптическую плотность смеси, поэтому для его определения необходимо проводить дериватизацию, т. е. переводить его в интенсивно поглощающее соединение.

В таблице 3 приведены результаты определения витаминов в 6-компонентной «модельной» смеси с использованием выбранных спектральных диапазонов. Смеси, состав которых отличался от номинальных на 10 или 20 %, также были исследованы по данной методике. Если спектральные диапазоны заранее выбраны, а коэффициенты поглощения компонентов на соответствующих длинах волн определены, время анализа одной смеси не превышает 20 минут.

Таблица 3

Результаты определения витаминов в 6-компонентной «модельной» смеси

Витамин	Введено, мкг/мл	Диапазон длин волн, нм	Найдено, мкг/мл	$\delta$ , %	W, %
В2	2,4	220-500	2,30	-3,4	0,2
В5	12,0	220-500	12,10	0,8	0,3
В6	1,6	220-500	1,52	-5,1	0,6
К3	0,8	220–245, 254–265 *	0,85	6,2	0,7
В1	1,0	230-274*	1,02	4,1	2,2
В3	4,0	220-500	5,56	38,9	1,9

\*Примечание. По разностному спектру.

Разработанная методика была применена к анализу реальных объектов – премиксов. Как видно из таблицы 4, результаты по содержанию витаминов, по-

лученные методом МЛР, отличаются от рецептуры премиксов, что подтверждает необходимость аналитического контроля этой продукции.

Таблица 4

Результаты определения витаминов методом МЛР в премиксах

Премикс 0,1 % на цеолите			Премикс 0,25 % на цеолите		
Витамин	Содержание по рецепту, мкг/г	Найдено МЛР, мкг/г	Витамин	Содержание по рецепту, мкг/г	Найдено МЛР, мкг/г
В1	1000	810	В1	800	680
В2	4000	3350	В2	2400	2050
В3	20000	16300	В3	4000	3400
В5	30000	26400	В5	16000	13550
В6	4000	3400	В6	1200	1000
			К3	800	690

Таким образом, если рассчитывать содержание компонентов методом МАР, можно достаточно точно и быстро определять все витамины в 4–5-компонентных смесях, состав которых близок ( $\pm 20\%$ ) составу реально используемых поливитаминных препаратов. Без дериватизации удастся таким же способом определить 5 витаминов и в 6-компонентных смесях, даже если содержание компонентов различается на порядок и более, а условие аддитивности выполняется не на всех длинах волн. Более простые алгоритмы расчета (например, классический вариант метода Фирордта) вообще не позволяют анализировать такие сложные смеси с требуемой точностью [6]. Однако чтобы снизить относительные погрешности и коэффициенты вариации соответствующих методик до приемлемого уровня (до 5–6 % отн.), надо заранее оптимизировать спектральные диапазоны, которые будут использованы при расчете содержания каждого компонента.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Кожанова Л.А., Федорова Г.А., Барам Г.И. Определение водо- и жирорастворимых витаминов в поливитаминных препаратах методом ВЭЖХ // ЖАХ. 2002. Т. 57. С. 49–54.
- [2] Арбатский А.П., Афоньшин Г.Н., Востоков В.М. Определение витаминов в кормовых и пищевых продуктах методом высокоэффективной жидкостной хроматографии // ЖАХ. 2004. Т. 59. № 12. С. 1304–1307.
- [3] Власова И.В., Масыкова Е.Н., Богданова Л.А., Пермязова Н.Ю. Определение водорастворимых витаминов в премиксах методом высокоэффективной жидкостной хроматографии // Заводская лаборатория. 2007. Т. 73. № 9. С. 25–27.
- [4] Масыкова Е.Н., Шелпакова А.С., Феллер А.В., Власова И.В. Определение водорастворимых витаминов группы В в неразделенных смесях // Разработка, исследование и маркетинг новой фармацевтической продукции: сб. науч. тр. Вып. 63. Пятигорск, 2008. С. 303–304.
- [5] Dinc Erdal, Baleanu Dumitru. Spectrophotometric quantitative determination of cilazapril and hydrochlorothiazide in tablets by chemometric methods // J. Pharm. and Biomed. Anal. 2002. V. 30. № 3.
- [6] Власова И.В., Шилова А.В. Повышение точности определения компонентов в двухкомпонентных смесях по методу Фирордта // Вестник Омского университета. 2006. № 2. С. 53–55.



Вестн. Ом. ун-та. 2009. № 2. С. 177–182.

УДК 544.653.2:537.52:544.542.1

**А.В. Сырьева, Т.А. Калинина, В.Ф. Борбат**

*Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского*

**А.М. Сизиков**

*Сибирская государственная автомобильно-дорожная академия*

### **ВЛИЯНИЕ СОСТАВА ЭЛЕКТРОЛИТА НА ОБРАЗОВАНИЕ ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА И ВЫБРОС МЕТАЛЛА ПРИ МИКРОРАЗРЯДЕ НА АЛЮМИНИЕВОМ АНОДЕ**

Изучены характеристики анодных микроразрядов в тетраборатных и карбонатных растворах. При использовании алюминиевого анода наблюдается выброс металла в раствор, а также накопление пероксида водорода. Содержание вторичных продуктов разряда зависит от состава электролита, в частности от концентрации  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  или  $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$  в растворе. В тетраборатных растворах количества образующихся продуктов определяются энергетическими параметрами микроразрядов, которые зависят от концентрации электролита. В карбонатных растворах образуется меньшее количество пероксида водорода, поскольку карбонат-ион – акцептор ОН-радикалов. Растворение пористой части оксидной пленки в карбонатных растворах приводит к большему накоплению в растворе ионов алюминия, чем при пробое.

*Ключевые слова:* анодный микроразряд, пробой, газо-плазменный пузырек, алюминий, пероксид водорода.

При положительной поляризации вентильного металла (Al, Ti, Ta, Nb, Zr, W) на его поверхности образуется оксидная пленка. С ростом подводимой энергии толщина пленки увеличивается, и при достижении некоторой пороговой толщины наступает пробой. Напряжение, при котором наблюдается пробой диэлектрического оксидного слоя, зависит в основном от природы анодируемого металла и используемого электролита. В результате этого пробоя пленки образуется газовая полость, в которой инициируется разряд. В газовом пузырьке и в припузырьковом слое электролита происходят разнообразные реакции с участием радикалов, ионов и молекул, приводящие к образованию продуктов разложения воды и электролита. В приразрядных слоях пленки происходят фазовые превращения и реакции с компонентами электролита. При отсутствии условий для поддержания разряда гаснет, место пробоя зарастает свежим оксидом, и затем уже возникает следующий микроразряд.

Протекание анодного микроразряда сопровождается различными физико-химическими эффектами, прежде всего сверхфарадеевским выделением  $\text{H}_2$  и  $\text{O}_2$  и образованием пероксида водорода [1]. Считают, что пероксид водорода образуется в результате квадратичной рекомбинации ОН-радикалов. Возникновение этих первичных радикалов

связано с внедрением в раствор электролита ионов, ускоренных в катодном падении потенциала разряда до энергий порядка 100 эВ [2]. В этой же работе была выявлена зависимость выхода  $H_2O_2$  от концентрации акцептора радикалов, что подтверждает гипотезу о радиолитическом воздействии разрядов на раствор электролита. В другой работе тех же авторов [3] были получены немонотонные зависимости выхода разложения воды, а также выхода захвата электронов акцептором от концентрации электролита. Полученные зависимости объясняют увеличением доли анионного тока, идущего через межфазную границу, по мере возрастания концентрации электролита. Кроме пероксида водорода, в продуктах анодного микрозаряда был обнаружен алюминий [4]. Появление ионов металла в растворе связывают с пробоем диэлектрической оксидной пленки в результате анодного активирования при локальном нарушении пассивности и питтингообразовании. В этих процессах принимают участие карбоксилат-ионы.

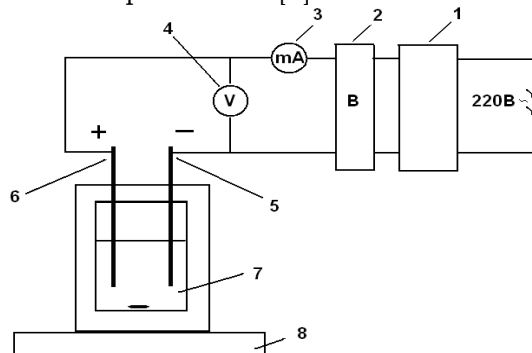
Целью нашей работы явилось изучение влияния природы и концентрации электролита на количество пероксида водорода и ионов алюминия в растворе, обработанном анодными микрозарядами. В качестве электролитов использовали  $Na_2CO_3$  и  $Na_2B_4O_7$ . Важно, что карбонат натрия является акцептором ОН-радикалов ( $k = 3,5 \cdot 10^8 \text{ л} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$  [5]), а у тетрабората акцепторные свойства отсутствуют [6]. Параллельно мы определяли такие параметры микрозарядов, как время существования газо-плазменного пузырька (ГПП) и его размер.

**Методика эксперимента.** Анодом служила проволока из алюминиевого сплава АМг6 (площадь рабочей поверхности – 0,7 см<sup>2</sup>), катодом – стержень из графита (площадь – 3,1 см<sup>2</sup>). В качестве электролитов использовали растворы  $Na_2CO_3$  и  $Na_2B_4O_7$  (0,02 М – 0,1 М). Раствор постоянно перемешивался.

Принципиальная схема установки приведена на рисунке 1.

Перед началом каждого эксперимента поверхность анода зачищали наждачной бумагой и наращивали оксидную пленку в режиме горения микрозарядов в течение 3-х минут в исследуемом электролите. Эксперименты проводили в гальваностатическом режиме при силе тока 50, 70 и

90 мА, время обработки варьировали от 2 до 8 минут. При этом напряжение составляло 420-500 В, в зависимости от состава раствора. После завершения обработки раствор анализировали на содержание пероксида водорода и ионов алюминия по известным методикам. Пероксид определяли фотометрически по реакции с йодидом калия [7], ионы алюминия – по образованию окрашенного комплекса с ксилеоловым оранжевым [8].



**Рис. 1.** Принципиальная схема установки: 1 – источник регулируемого переменного напряжения TST 280/6, 2 – выпрямитель, 3 – миллиамперметр М-903, 4 – вольтметр В7-16А, 5 – катод (графит), 6 – анод (АМг6), 7 – раствор электролита, 8 – магнитная мешалка

В экспериментах по определению параметров микрозарядов анод фотографировали фотоаппаратом Canon EOS 350D DIGITAL в течение первых минут после появления разрядов. Выдержка – 1/320 секунды. В каждом эксперименте получали не менее 30 цифровых фотографий. Расчет времени жизни ( $t_{ж}$ ) газо-плазменного пузырька вели по формуле:  $t_{ж} = t / (2n - n_{бок})$ , где  $t$  – время экспозиции,  $n$  – число всех разрядов на снимке,  $n_{бок}$  – число боковых разрядов [9]. Для определения размеров газо-плазменных пузырьков полученные изображения обрабатывали, используя программу ENVI® (The Environment for Visualizing Images). Зная линейные размеры анода, переходили от пикселей к миллиметрам, а затем вычисляли площади изображений пузырьков ( $S$ , мм<sup>2</sup>). Изображения боковых разрядов не обрабатывали. Считая изображение газо-плазменного пузырька правильной окружностью, рассчитывали его радиус по формуле  $r = (S/\pi)^{1/2}$ . Наиболее вероятный радиус ГПП в соответствующих экспериментальных условиях определяли с помощью гистограмм.

**Результаты и их обсуждение.** В таблице 1 приведены данные по време-

нам жизни и размерам газо-плазменных пузырьков при силе тока 50 мА.

Т а б л и ц а 1

Время жизни и наиболее вероятный радиус газо-плазменного пузырька,  $I = 50$  мА

C, моль/л	$t_{ж}$ , мкс	r (ГПП), мм
<b>Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub></b>		
0,02	170 ± 30	0,12 ± 0,02
0,05	240 ± 20	0,32 ± 0,02
0,08	280 ± 30	0,32 ± 0,08
0,1	260 ± 20	0,32 ± 0,02
<b>Na<sub>2</sub>B<sub>4</sub>O<sub>7</sub></b>		
0,02	170 ± 10	0,29 ± 0,01
0,05	280 ± 30	0,45 ± 0,01
0,08	310 ± 30	0,45 ± 0,01
0,1	310 ± 30	0,45 ± 0,01

Как видно из таблицы 1, при переходе от 0,02 к 0,05 М растворам наблюдается значительное изменение характеристик микроразрядов (растут и времена жизни, и размеры ГПП), причем в тетраборатных растворах наиболее вероятный радиус пузырька больше, чем в карбонатных. Газо-плазменный пузырек достигает своего максимального размера в 0,05 М растворах. При дальнейшем увеличении концентрации электролита размер ГПП не изменяется, что связано, по-видимому, с достижением оптимальной для поддержания разряда концентрации переносчиков тока.

При  $I = 50$  мА отличие времен жизни ГПП в разных электролитах статистически незначимо. При более высоких силах тока – 70 и 90 мА – времена жизни ГПП в тетраборатном и карбонатном электролитах достоверно отличаются (табл. 2). Наблюдаемые различия времен жизни микроразрядов можно объяснить влиянием природы аниона на инициирование и поддержание разряда. Тенденция к уменьшению времени жизни разряда при высокой силе тока, вероятно, обусловлена более быстрым обеднением припузырькового слоя переносчиками тока.

Таким образом, при изменении состава электролита меняются энергетические характеристики микроразрядов: время и интенсивность воздействия, поверхность контакта. В зависимости от того, где и на какой стадии протекает рассматриваемый процесс – при пробое пленки или в газо-плазменном пузырьке, параметры микроразряда будут по-разному оказы-

вать на него влияние. О степени этого влияния можно судить по закономерностям образования продуктов.

Т а б л и ц а 2

Время жизни газо-плазменного пузырька при высоких силах тока

C, моль/л	$t_{ж}$ , мкс	
	70 мА	90 мА
<b>Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub></b>		
0,02	130 ± 13	110 ± 13
0,05	140 ± 20	110 ± 10
0,08	170 ± 20	140 ± 20
0,1	160 ± 20	130 ± 20
<b>Na<sub>2</sub>B<sub>4</sub>O<sub>7</sub></b>		
0,02	160 ± 14	130 ± 13
0,05	240 ± 20	190 ± 40
0,08	260 ± 20	210 ± 40
0,1	210 ± 30	190 ± 50

В таблице 3 приведены данные о количестве пероксида водорода и ионов алюминия в обработанных микроразрядами растворах, а также среднее напряжение стационарного горения микроразрядов.

Поскольку выброс алюминия в раствор возможен только при пробое оксидной пленки, а не при горении разряда в газовом пузырьке, то количество ионов алюминия в растворе должно зависеть от числа пробоев пленки, а не от размера ГПП. Число пробоев обратно пропорционально времени жизни микроразряда. Поэтому нами было рассчитано количество ионов алюминия в растворе, приходящееся на один пробой, –  $n_0$  (табл. 4). Расчет вели по формуле:  $n_0 = (n \cdot t_{ж}) / t_{обр}$ , где  $n$  – количество ионов алюминия (моль) в растворе, накопившееся за время обработки  $t_{обр}$ . Как видно из полученных данных, в тетраборатных растворах количество ионов алюминия, попадающего в раствор в результате одного пробоя, практически не зависит от концентрации электролита. В случае с карбонатом натрия такой вывод сделать нельзя. Зависимость количества ионов алюминия в растворе от концентрации карбоната для всех времен обработки микроразрядами имеет экстремальный вид (рис. 2).

Известно, что в растворах Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> не удается получить сплошные бездефектные пленки [10]. На рисунке 3 а представлена фотография части поверхности анода, на которой заметна неоднородность покрытия.

Таблица 3

Количество пероксида водорода и ионов алюминия в растворе в зависимости от состава электролита и времени обработки,  $I = 50$  мА

С, моль/л	Время обработки, с	Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>		Na <sub>2</sub> B <sub>4</sub> O <sub>7</sub>			
		U <sub>ср</sub> , В	n (H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ), 10 <sup>-6</sup> моль	n (Al), 10 <sup>-6</sup> моль	U <sub>ср</sub> , В	n (H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ), 10 <sup>-6</sup> моль	n (Al), 10 <sup>-6</sup> моль
0,02	120	492	42 ± 3	10 ± 1	498	79 ± 3	3 ± 1
	240		85 ± 10	22 ± 1		160 ± 3	5 ± 1
	360		106 ± 7	39 ± 2		226 ± 4	6 ± 1
	480		151 ± 2	53 ± 2		301 ± 3	7 ± 1
0,05	120	458	41 ± 1	4 ± 1	464	66 ± 2	3 ± 1
	240		83 ± 8	6 ± 1		127 ± 4	4 ± 1
	360		115 ± 4	9 ± 1		189 ± 1	5 ± 1
	480		155 ± 4	20 ± 1		244 ± 3	7 ± 1
0,08	120	439	27 ± 3	3 ± 1	451	62 ± 3	2 ± 1
	240		51 ± 3	5 ± 1		119 ± 3	3 ± 1
	360		74 ± 2	8 ± 1		180 ± 1	5 ± 1
	480		94 ± 3	17 ± 1		235 ± 5	7 ± 1
0,1	120	421	14 ± 6	6 ± 1	442	60 ± 3	2 ± 1
	240		33 ± 10	10 ± 1		114 ± 1	3 ± 1
	360		50 ± 7	15 ± 1		172 ± 3	5 ± 1
	480		67 ± 4	27 ± 1		225 ± 5	6 ± 1

Таблица 4

Количество ионов алюминия, приходящееся на один разряд

С, моль/л	n <sub>0</sub> , 10 <sup>-12</sup> моль	
	Na <sub>2</sub> B <sub>4</sub> O <sub>7</sub>	Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>
0,02	3,3 ± 1,2	16,7 ± 3,5
0,05	4,9 ± 2,3	7,5 ± 3,0
0,08	4,5 ± 0,9	7,2 ± 2,9
0,1	4,3 ± 1,0	12,3 ± 2,9

Поскольку происходит растворение пористой части пленки, то алюминия переходит в раствор несколько больше, чем при пробе. С увеличением концентрации электролита дефектность пленки уменьшается (рис. 3 б), количество растворенного алюминия при этом падает. Для 0,1 М раствора наблюдается некоторое увеличение количества ионов алюминия, хотя количество дефектов на пленке не возрастает. Зависимости количества пероксида водорода от концентрации электролита не имеют минимумов, как это наблюдается в случае с алюминием, но все же качественно отличаются для разных электролитов. Как известно, пероксид водорода образуется в результате рекомбинации ОН-радикалов, источником которых является газо-плазменный пузырек. Тетраборат натрия не является акцептором ОН-радикалов, поэтому и количество

образовавшегося пероксида водорода значительно выше, чем в растворах карбоната натрия.

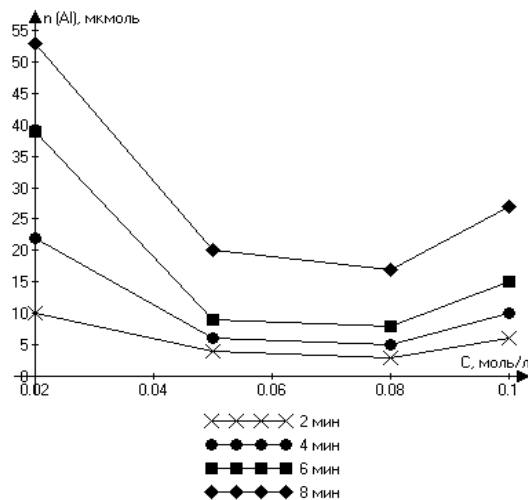
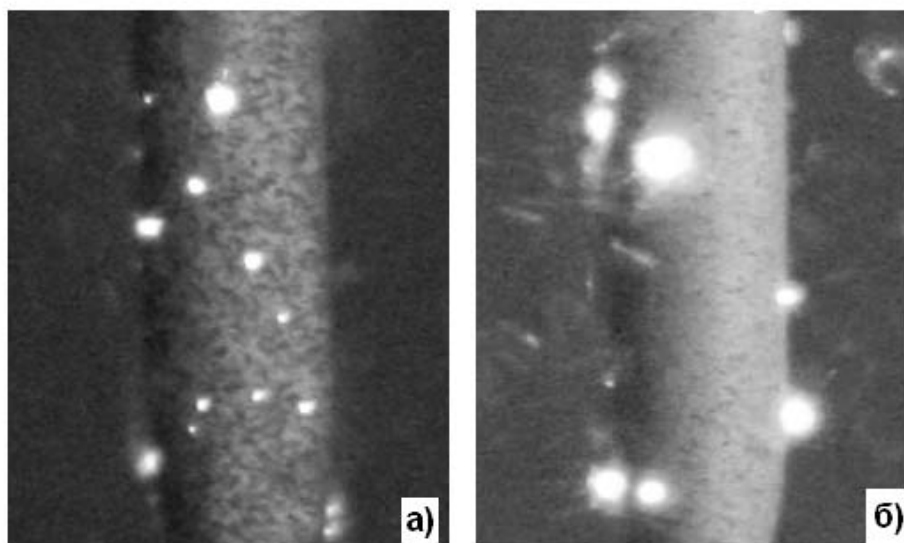
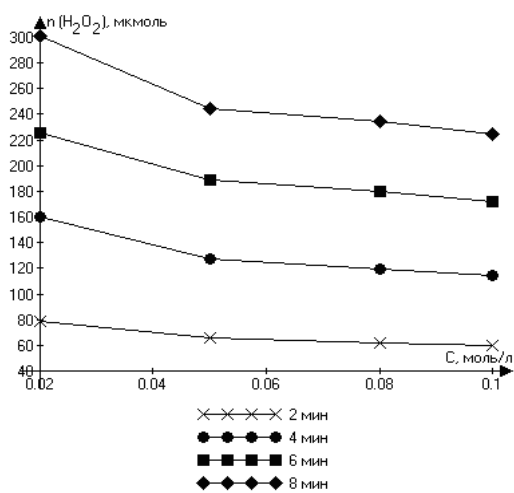


Рис. 2. Зависимость количества ионов алюминия в растворе от концентрации раствора Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> при разных временах обработки

Снижение этого количества с концентрацией электролита (рис. 4) может быть связано только с уменьшением подводимой электрической энергии, поскольку снижается напряжение стационарного горения микроразрядов (табл. 1), их число и плотность тока в пузырьке.

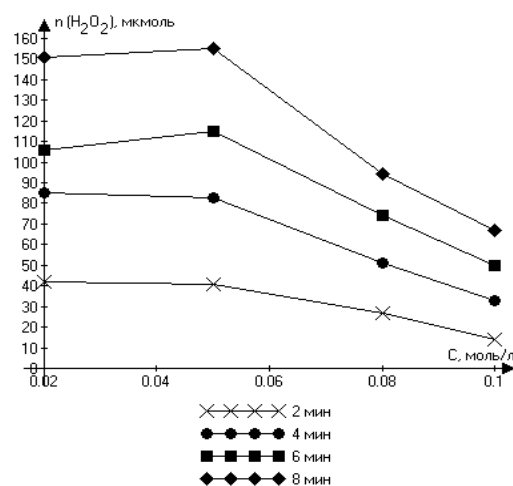


**Рис. 3.** Фотографии поверхности анода с горящими на ней микроразрядами в растворе карбоната натрия при разных концентрациях: а) 0,02 М; б) 0,08 М



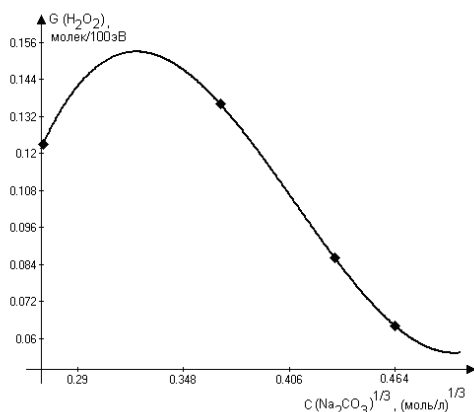
**Рис. 4.** Зависимость количества пероксида водорода от концентрации раствора  $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$  при разных временах обработки

В случае с раствором карбоната натрия (акцептор ОН-радикалов) зависимость количества пероксида водорода от концентрации электролита имеет более сложный вид (рис. 5). Если подобный вид зависимости вызван акцепторными свойствами карбонат-иона по отношению к ОН-радикалам, то согласно рекомбинационно-диффузионной модели [2] энергетический выход молекулярного продукта –  $\text{H}_2\text{O}_2$  – должен линейно уменьшаться с ростом корня кубического



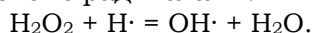
**Рис. 5.** Зависимость количества пероксида водорода от концентрации раствора  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  при разных временах обработки

из концентрации акцептора, что и наблюдалось в нашем эксперименте при концентрации карбоната, большей 0,05 моль/л (рис. 6). При переходе от 0,02 к 0,05 М энергетический выход пероксида должен проходить через максимум, что можно объяснить следующим образом [11]. В области низких концентраций акцептор реагирует с радикалами, распределенными в объеме раствора, и захватывает часть из них.



**Рис. 6.** Зависимость энергетического выхода пероксида водорода от корня кубического из концентрации карбоната натрия (время обработки – 8 мин.)

При этом с ростом концентрации происходит подавление обратной реакции молекулярного продукта с распределенными в объеме радикалами:



Вследствие этого выход пероксида водорода при увеличении концентрации акцептора возрастает. Когда в растворе присутствует достаточно вещества для полного захвата всех радикалов, распределенных в объеме, то в некоторой области концентраций выход молекулярного продукта остается неизменным. При дальнейшем повышении концентрации акцептора создается возможность его взаимодействия с радикалами вблизи от места их образования, что снижает выход пероксида.

Таким образом, в случае тетрабората натрия и количество алюминия, и количество пероксида водорода определяются параметрами микроразрядов, зависящими от концентрации электролита. В случае карбоната ситуация осложняется его

способностью растворять пористую часть оксидной пленки и захватывать ОН-радикалы, выступая в роли акцептора.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Гюнтершульце А., Бетц Г. Электролитические конденсаторы. М.; Л., 1938. 200 с.
- [2] Поляков О.В., Баковец В.В. Некоторые особенности воздействия микроразрядов на электролит // Химия высоких энергий. 1983. № 4. С. 291–295.
- [3] Поляков О.В., Бадалян А.М., Бахтурова Л.Ф. Роль концентрации электролита при разложении воды и генерации электронов в условиях анодных микроразрядов // Химия высоких энергий. 2005. № 2. С. 140–142.
- [4] Булыгин Е.В., Полищук А.П. Питтингообразование и пробой оксидной пленки на алюминии в процессе анодирования в растворе малеината триэтиламмония в диметилформамиде // Журнал прикладной химии. 1990. № 8. С. 1727–1731.
- [5] Пикаев А.К., Кабакчи С.А. Реакционная способность первичных продуктов радиолиза воды. М., 1982. 202 с.
- [6] Поляков О.В., Бадалян А.М., Бахтурова Л.Ф. Влияние минерализации раствора на разложение его компонентов в условиях разрядного электролиза // Химия в интересах устойчивого развития. 2005. № 5. С. 633–639.
- [7] Hochanadel C. J. Effects of cobalt  $\gamma$ -radiation on water and aqueous solutions // The Journal of Physical Chemistry. 1952. № 5. P. 587–594.
- [8] ГОСТ 26485-85. Почвы: Определение обменного (подвижного) алюминия по методу ЦИНАО. Введ. 01.07.86 до 01.07.96. М.: Изд-во стандартов, 2005. 5 с.
- [9] Вольф Е.Г., Сизиков А.М., Бугаенко Л.Т. Определение среднего времени жизни пароплазменных пузырьков при микроразряде на алюминиевом вентильном аноде в водном растворе электролита // Химия высоких энергий. 1998. № 6. С. 450–453.
- [10] Черненко В.И., Снежко Л.А., Папанова И.И. Получение покрытий анодно-искровым электролизом. Л., 1991. 128 с.
- [11] Верещинский И.В., Пикаев А.К. Введение в радиационную химию. М., 1963. 407 с.

Вестн. Ом. ун-та. 2009. № 2. С. 183–186.

УДК 543.0

**Н.А. Ждан, Н.А. Белан**

*Институт развития образования Омской области*

**В.И. Вершинин**

*Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского*

### **ФОРМИРОВАНИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ О ХИМИЧЕСКОМ АНАЛИЗЕ В ШКОЛЬНОМ КУРСЕ ХИМИИ**

Авторами статьи представлены отличия новой концепции химического образования. Даны рекомендации для формирования представлений о химическом анализе в школьном курсе химии.

*Ключевые слова:* методика преподавания, школьный курс химии, химический анализ, формирование понятий.

---

Представления о зависимости свойств веществ от их состава и строения являются важнейшим интегративным результатом общеобразовательной подготовки по химии и составляют основу целостной химической картины мира [1; 2]. Еще М.В. Ломоносов говорил, что «для познания частных качеств тел и их изменений обязательно требуется познание их состава». У школьников должны быть сформированы представления о химическом анализе как основном источнике наших знаний о составе веществ. Но в ходе методической подготовки будущего учителя вопросы, связанные с химическим анализом, практически не рассматриваются [3]. Не уделяется должного внимания этим вопросам и в системе дополнительного профессионального образования. Анкетирование на курсах повышения квалификации показывает, что учителя соотносят вопросы химического анализа в основном с внеурочной деятельностью. Некоторые даже высказывают мнение о том, что «химический анализ в школе не изучают». Одной из причин этого является то, что в структуре школьного курса химии аналитическая химия (в отличие от химии неорганической или органической) не представлена в качестве самостоятельного раздела. Есть и другая причина: составители программ и авторы учебников ранее не уделяли достаточного внимания вопросам, связанным с химическим анализом. Лишь в последние годы стандарты школьного образования и соответствующие учебники существенно изменились, и теперь формирование представлений о химическом анализе становится актуальной задачей. К сожалению, далеко не все школьные учителя готовы решать ее на уроках химии.

**Химический анализ в новых стандартах и учебниках.** Принципиальным отличием новой концепции химического образования является то, что за четыре года обучения учащиеся имеют возможность изучать состав веществ дважды – в основной и в старшей школе. Доля времени

на его изучение существенно увеличена. Появилась реальная возможность рассказать школьникам, каким образом когда-то был установлен состав веществ, как и зачем анализируют вещества сегодня. В обязательный минимум основных общеобразовательных программ дополнительно введены такие элементы содержания, как методы познания и экспериментальные основы химии [4; 5]. Их появление в структуре общего образования по химии позволяет усилить прикладной характер химических знаний, создает условия для реализации личностно ориентированной модели обучения, способствует достижению нового качества общеобразовательной подготовки по химии. Поэтому дидактическая ценность представлений о химическом анализе, формируемых в школьном курсе химии, существенно возрастает.

Внимание к химическому анализу усилено и в новых учебниках. Так, в учебники О.С. Габриеляна и соавторов включены качественные реакции на ионы  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ , реакции на углекислый газ, на крахмал и многоатомные спирты. В аналитическом аспекте рассматриваются свойства индикаторов, аминокислот, взаимодействие этилена с бромной водой и перманганатом калия, реакция глюкозы с аммиачным раствором оксида серебра и даже цветные реакции белков. В старшей школе к ним добавляются аналитические свойства непредельных соединений, фенолов и других веществ. Предусматривается выполнение экспериментальных задач по распознаванию индивидуальных веществ сложного состава (смесей). Впрочем, в рамках профильного обучения иногда рекомендуются такие задачи, которые достаточно трудны даже для профессионального аналитика, обоснованность их включения в школьные учебники вызывает серьезные сомнения.

К сожалению, в методической литературе трудно найти ответы на вопросы, что именно должны знать школьники о химическом анализе, как лучше формировать и использовать эти знания при изучении различных разделов школьного курса химии, для профессиональной ориентации выпускников, для воспитания необходимых личностных качеств?

Анализ обязательного минимума содержания основных общеобразователь-

ных программ по химии [4; 6] позволяет выделить следующие знания и умения аналитической направленности, которые можно и нужно формировать в процессе обучения химии в основной и старшей школе (на базовом уровне):

- знание понятий: «химический анализ», «качественный анализ», «количественный анализ»;
- знания о простейших способах (методах) химического анализа;
- знания об объектах обнаружения: элементах, функциональных группах (группах атомов), молекулах, ионах;
- умение разделять смеси, определять качественный состав вещества опытным путем, решать экспериментальные задачи аналитической направленности, исследовать состав некоторых природных объектов;
- умение определять формулу химического соединения по результатам его анализа и, наоборот, рассчитывать количественное содержание элемента в чистом веществе по формуле соответствующего соединения.

Совершенно иной набор знаний и умений химико-аналитического характера<sup>1</sup> должен быть сформирован при изучении факультативных и элективных дисциплин, а также на внеклассных (учебно-исследовательских) занятиях.

**Методика формирования понятия «химический анализ».** Целесообразно начинать формировать это понятие еще в основной школе, одновременно с понятиями «чистое вещество» и «смесь». Раскрывая содержание понятия «чистое вещество», имеет смысл ввести представление о качественных реакциях как о реакциях, с помощью которых распознают химические вещества [5; 6]. При изучении состава и свойств кислот и оснований примером будет распознавание кислот и оснований с помощью индикаторов. То есть вначале закладывается представление о химическом анализе как о способе установления качественного состава химических объектов.

Следующий этап в формировании понятия «химический анализ» может быть реализован в основной школе при введении понятия «смесь». Отмечая, что в природе вещества в чистом виде практически не встречаются, учитель определяет смесь как совокупность нескольких чистых ве-



ществ, сохраняющих свою химическую индивидуальность. Он называет примеры наиболее распространенных и известных смесей: воздух, водные растворы, сплавы и т. д. Характеризуя свойства смесей, состоящих из одних и тех же чистых веществ (компонентов), важно отметить, что свойства смесей зависят не только от качественного состава, но и от количественного соотношения компонентов. Это соотношение может быть установлено с помощью химического анализа. Здесь должны быть использованы вводимые в основной школе понятия «массовая» и «объемная доля» компонента в смеси. Таким образом, понятие «химический анализ» теперь рассматривается шире – как способ установления качественного и количественного состава химических объектов.

В старшей школе по мере усвоения знаний об основных классах неорганических и органических соединений, а также о количественных характеристиках смесей и различных химических процессов – понятие «химический анализ» должно быть углублено и конкретизировано на основе представлений о двух его видах: качественном и количественном анализе. Так, учащиеся должны осознать, что количественному анализу подвергают не только смеси, но и чистые вещества (химические соединения), и результаты такого анализа позволяют вывести формулы соединений.

Отметим, что поэтапное формирование понятия «химический анализ» в основной школе соответствует логике возникновения и развития этого понятия в истории аналитической химии [7]. В обоих случаях формирование представлений о химическом анализе было бы невозможно без эксперимента. В школе химический эксперимент позволяет реально продемонстрировать причинно-следственную связь состава вещества и его свойств, а также усилить прикладной характер получаемых химических знаний [8; 9]. Так, наблюдая изменение окраски индикатора или образование характерных осадков, учащиеся способны сделать выводы о природе (качественном составе) того или иного химического объекта. Это позволит им прогнозировать свойства объекта, понять особенности обращения с ним, способы его применения в практике, последствия его воздействия на окружающую среду.

Естественно, качество знаний учащихся будет выше, если параллельно формированию понятия «химический анализ» учитель будет использовать теоретические представления об атомах, группах атомов, молекулах, ионах как об объектах обнаружения и количественного определения. Однако не следует стремиться к формированию этих понятий, выделять множество видов анализа по этим и другим классификационным основаниям (например, по объектам анализа, по точности и продолжительности анализа). Объем фактических знаний, которыми располагают учащиеся, и временные рамки обязательных занятий недостаточны для такого углубленного изучения. Сам же учитель должен понимать, что при освоении содержания неорганической и органической химии учащиеся реально знакомятся с результатами разных видов анализа – элементного, молекулярного и структурно-группового.

**Формирование представлений о методах и результатах анализа.** Важной составляющей представлений, формируемых в основной и старшей школе на уроках химии, являются знания о способах изучения состава веществ. В обязательном минимуме содержания предусмотрено знакомство с некоторыми методами анализа, а именно методами идентификации, разделения и даже концентрирования [4; 5]. Основное внимание обычно уделяется проведению качественных реакций, что вполне логично. Однако, говоря о них, надо подчеркивать, что выполнение качественных реакций – лишь один из многих методов качественного анализа, самый простой, самый старый, но далеко не самый важный. Иначе у учащихся сложится ошибочное мнение, что любой химический анализ сводится к использованию пробирок, реагентов и индикаторов. Преодолеть этот ошибочный стереотип потом будет трудно.

Методы количественного анализа в школьном курсе представлены (на профильном уровне) лишь одним примером – определением pH водных растворов кислот, щелочей, солей с помощью универсальной индикаторной бумаги. С точки зрения логики формирования представлений желательно знакомство старшеклассников еще с одним-двумя методами количественного анализа, особенно с гравиметрией. Гравиметрическое определение содержания воды

в каких-либо материалах (по результатам взвешивания до и после прокаливания) – более наглядный пример количественного анализа, чем определение рН. При нехватке времени на уроках химии соответствующий эксперимент можно провести в ходе изучения элективных и факультативных дисциплин.

Школа должна знакомить учащихся и с применением отдельных методов анализа в практике. В старшей школе учителю необходимо подчеркивать, что результаты химического анализа важны для изучения природных и техногенных смесей, состояния окружающей среды и техногенных выбросов, что вся информация о химических реакциях (стехиометрия, равновесия, кинетика, механизм) получена в ходе анализа соответствующих реакционных смесей. Надо указывать, что результаты количественного анализа сегодня позволяют контролировать технологические процессы и оценивать качество продукции [6]. На результаты химического анализа нужно ссылаться и при изучении смежных курсов, например, на уроках биологии. Вместе с тем, следует подчеркивать, что данные о качественном и количественном составе веществ необходимы, но не достаточны для полного объяснения свойств веществ. Самый очевидный пример – различия физических свойств ряда веществ с одинаковым качественным и количественным составом. Следовательно, для прогнозирования свойств веществ, кроме результатов их анализа, нужно знать строение соответствующих молекул.

Подведем итоги. В современных образовательных программах по химии присутствует относительно самостоятельное содержание аналитической направленности, которое обобщенно можно представить следующим образом: *химический анализ – виды анализа – методы анализа – использование результатов анализа*. Поэтапное формирование представлений о химическом анализе по такой схеме будет способствовать повышению качества усвоения всех разделов программы, полноценному раскрытию причинно-следственных связей типа *состав веществ – свойства веществ*, а также *состав – строение* и *строение – свойства*.

Безусловно, усиление внимания школьников к химическому анализу потребует определенных изменений в мето-

дике подготовки учителей химии. Этот вопрос рассмотрен нами в предисловии и приложении к новому учебнику по аналитической химии для педагогических вузов [10].

#### ПРИМЕЧАНИЯ

Этот набор знаний и умений авторы намерены рассмотреть в своей следующей статье.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Макареня А.А., Обухов В.Л. Методология химии: Пособие для учителя. М.: Просвещение, 1985.
- [2] Кузнецова Н.Е. Формирование систем понятий при обучении химии. М.: Просвещение, 1989.
- [3] Чернобельская Г.М. Основы методики обучения химии: учеб. пособие для студентов пед. интов. М.: Просвещение, 2001.
- [4] Сборник нормативных документов. Химия / сост. Э.Д. Днепров, А.Г. Аркадьев. М.: Дрофа, 2000.
- [5] Габриелян О.С. Химия. 8 класс. М.: Дрофа, 2005.
- [6] Программа курса химии для 8–11 классов общеобразовательных учреждений / О.С. Габриелян. М.: Дрофа, 2007.
- [7] Золотов Ю.А., Вершинин В.И. История и методология аналитической химии. М.: Академия, 2007.
- [8] Назарова Т.С., Грабецкий А.А., Лаврова В.Н. Химический эксперимент в школе. М.: Просвещение, 1987.
- [9] Зueva М.В., Гара Н.Н. Школьный практикум. Химия 8–9 класс. М.: Дрофа, 2001.
- [10] Вершинин В.И., Власова И.В., Никифорова И.А. Основы аналитической химии. Омск: Изд-во ОмГУ, 2007. 594 с.

■  
***НАУЧНАЯ ЖИЗНЬ***

■  
***ЛИТЕРАТУРНАЯ СТРАНИЦА***

■  
***СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ***

■  
***КНИЖНЫЕ НОВИНКИ***

Вестн. Ом. ун-та. 2009. № 2. С. 188–190.

### Памяти Надежды Александровны Семиколеновой

16 марта 2009 г. после тяжелой болезни ушла из жизни Надежда Александровна Семиколенова – замечательный ученый, доктор физико-математических наук, профессор, заведующая кафедрой микроэлектроники и медицинской физики Омского государственного университета им. Ф.М. Достоевского.



Н.А. Семиколенова в 1960 г. окончила физико-математический факультет Иркутского государственного университета. В 1965 г. она поступила в аспирантуру Иркутского политехнического института. Диссертационная работа выполнялась ею на экспериментальной базе научно-исследовательских лабораторий Ленинградского физико-технического института. В это время в ЛФТИ сформировалась научная школа международного уровня – Д.Н. Наследов, Н.А. Горюнова, Ж.И. Алферов, Э.Н. Хабаров, А. Радауцан (принимали и направляли физиков со всей территории Советского Союза, Германии, Франции, Англии). Успешно решались технологические и исследовательские задачи получения сверхчистых полупроводников, полупроводниковых соединений с программируемыми свойствами, гетероструктур. Именно эти исследования, в

свою очередь, сформировали научные «полупроводниковые» школы в Киеве и Минске, Москве, Казани, Свердловске, Омске, Иркутске, Ашхабаде, Тбилиси и Баку. И именно за эти работы Ж.И. Алферов с группой сотрудников получил Ленинскую премию, престижную премию США и, наконец, Нобелевскую премию 2001 г.

Кандидатскую диссертацию «Исследование энергетической структуры полупроводниковых твердых растворов» Н.А. Семиколенова защитила в 1971 г. С 1975 г. она работала в Омском государственном университете. Диссертацию на соискание ученой степени доктора физико-математических наук «Корреляционные эффекты в сильно легированных полупроводниковых соединениях типа  $A^{III}B^V$  и твердых растворах на их основе» она защитила в специализированном совете Института физики полупроводников СО АН (г. Новосибирск) в 1990 г. Доктор физико-математических наук Н.А. Семиколенова являлась ведущим специалистом в области физики полупроводников. Исследования корреляционных взаимодействий в конденсированных системах привели к открытию эффекта самоупорядочения примесей в легированных полупроводниках, что является фундаментальным вкладом в физику твердого тела.

Н.А. Семиколенова принимала непосредственное участие в создании и развитии учебных и научных направлений кафедры физики твердого тела (сейчас кафедра микроэлектроники и медицинской физики), создании аспирантуры по физике твердого тела (специализация 01.04.10 физика полупроводников и диэлектриков). Надежда Александровна являлась заместителем председателя диссертационного совета по защите кандидатских диссертаций по этой специальности.

Под руководством Н.А. Семиколеновой начало развиваться новое направление исследований – исследование функционального порядка в биологических системах. В настоящее время исследовательские работы по изучению фундаментальных структурных переходов в гемоглобине ведутся параллельно с работой по оптимизации параметров полупроводни-

ковых датчиков для многопараметрических медицинских мониторов. По инициативе Надежды Александровны и под ее руководством на факультете была организована аспирантура по специальности «Биофизика», открыта новая специальность «Медицинская физика». Н.А. Семиколеновой опубликовано более 180 работ в республиканских, союзных и международных изданиях. Она являлась одним из авторов коллектива монографического издания «Системы особых температурных точек твердых тел» (М.: Наука, 1986), ряда тематических сборников и сборников методических пособий по физике и оптике полупроводников (1980–2003 гг.).

Под ее руководством на кафедре сформирован квалифицированный коллектив, работающий на высоком научном и научно-методическом уровне, защищено 6 кандидатских диссертаций. За время работы на кафедре микроэлектроники и медицинской физики ОмГУ с 1975 по 2008 гг. Н.А. Семиколеновой читались курсы лекций «Физика конденсированного состояния», «Физика полупроводников», «Оптика полупроводников», «Оптоэлектроника», «Интегральная оптика», «Физика тонких пленок», «Термодинамика твердого состояния». Надежда Александровна являлась ведущим специалистом по указанным направлениям, экспертом научной и научно-технической продукции Государственного республиканского исследовательского центра экспертизы Министерства промышленности, науки и технологий, заслуженным работником высшей школы Российской Федерации.

Энергия, целеустремленность, способность создавать уникальную творческую атмосферу, широкий кругозор обеспечили Надежде Александровне авторитет и уважение среди коллег и учеников. Ее мудрость, готовность оказать помощь, обаяние всегда привлекали людей.

Светлая память о Надежде Александровне Семиколеновой навсегда останется в наших сердцах.

Коллеги, ученики, друзья, редколлегия журнала «Вестник Омского университета»

## **6-й Сибирский семинар по сверхпроводимости и смежным проблемам ОКНО–2008**

Прежде немного истории. В 2002 г. по случаю работы диссертационного совета в Омске собрались профессор Л.А. Боярский из Новосибирского госуниверситета, профессор С.Г. Овчинников из Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН (Красноярск) и автор этих строк. На встрече и возникла идея проведения Сибирского семинара по сверхпроводимости. Идея семинара была поддержана научным советом РАН по проблеме «Физика низких температур» (председатель совета – вице-президент РАН академик А.Ф. Андреев). Слова «смежные проблемы» появились в названии семинара через год, т. е. 2003 г., а «ОКНО» – это аббревиатура из названий наших городов Омск – Красноярск – Новосибирск.

Постепенно география участников стала расширяться. Начиная с 3-го Семинара, проведенного в Омске, к нам присоединились екатеринбуржцы из Института физики металлов и Института электрофизики УрО РАН, на 5-м Семинаре в Красноярске в работе ОКНО принимал участие представитель из Германии. Семинары проводятся поочередно в Новосибирске, Красноярске, Омске.

Семинар объединяет тех, кто в Сибирском регионе занимается сверхпроводимостью. Расширение тематики семинара «смежными проблемами» привело к тому, что в последние годы всё чаще обсуждаются работы по нанофизике. С самого начала поощрялось участие в семинарах молодёжи – студентов старших курсов, магистрантов, аспирантов. Они выступают с докладами наряду со старшими коллегами, и к их выступлениям предъявляются такие же высокие требования по качеству сообщаемого материала по результатам собственных исследований. Об эффективности работы семинара говорит тот факт, что за время его работы «оконцами» было защищено 10 кандидатских диссертаций, причём пять из них – аспирантами и сотрудниками физического факультета Омского госуниверситета. В работе семинара принимают участие сотрудники из разных Институтов СО РАН и университетов. В Новосибирске – это сотрудники Института неор-

ганической химии СО РАН, Института полупроводников СО РАН, Новосибирского технического университета: Э.В. Матизен, Е.Б. Амитин, В.Р. Белослудов, Е.В. Холопов, Т.И. Батурина, Э.Г. Батыев и многие другие; в Красноярске – сотрудники Сибирского федерального университета, Аэрокосмической академии.

6-й Сибирский семинар ОКНО–2008 был проведён в Омске 16–17 сентября 2008 г. на университетской базе отдыха «Аэлита». Это подходящее место для проведения научных мероприятий. Однако удалённость от университета не позволила принять участие более широкому кругу заинтересованных лиц, в первую очередь студентам-физикам.

Тематика докладов 6-го Семинара было достаточно традиционной: это теория сверхпроводимости (С.Г. Овчинников, А.А. Головня, Д.М. Дзедзисашвили), электронная структура (Л.А. Боярский), спиновые поляроны (В.В. Вальков), фазовые переходы (В.А. Гавричков) в сильно коррелированных системах, новые высокотемпературные сверхпроводники (И.А. Некрасов), природа двумерной сверхпроводимости (К.Н. Югай), сверхпроводники 2-го рода, в частности, замкнутые вихри Абрикосова (С.М. Подгорных, И.В. Тихомиров), сверхпроводящая нанопроволока и наночастица (С.В. Николаев, О.Ю. Смоленкина). Традиционность тематики в первую очередь касалась исследований сверхпроводимости на основе модели Хаббарда,  $t$ - $J$ -модели, в чём особенно сильно продвинулись в красноярской группе (С.Г. Овчинников, В.В. Вальков). Однако есть данные о

том, что сильно коррелированная модель, в частности Хаббарда, непригодна для описания высокотемпературной сверхпроводимости (см., например: *Aimi T., Imada M. J. Phys. Soc. Jpn., 76, 113708 (2007)*). Поэтому предпринимаются попытки построения теории сверхпроводимости на некоторой альтернативной основе, в которой главную роль играют двумерность системы и связанные состояния носителей (К.Н. Югай).

«Смежные проблемы» были представлены интересными экспериментальными работами новосибирцев: А.Ю. Мироновым, П.Ю. Гатиловым. Вообще следует сказать, что эти работы вызвали большой интерес участников семинара не только потому, что были получены нетривиальные результаты, а ещё и потому, что мы все, не только участники семинара, но в России вообще, соскучились по хорошему эксперименту, сделанному на хорошем оборудовании. Таких экспериментальных работ на семинаре было представлено мало.

Нанопроблемам были посвящены две работы – Н.В. Тиховской и А.М. Соколова.

Вечером 16 сентября перед участниками семинара выступила известная в Омске исполнительница романсов Елизавета Витман. Её чудесный голос, романсы, к которым в России особо трепетное отношение, никого не оставили равнодушными.

Профессор К.Н. Югай

Вестн. Ом. ун-та. 2009. № 2. С. 191.

## Дмитрий Соснов

### Лирическая нота

Ты – нота моего лирического голоса,  
Сошедшая с возвышенных октав.  
Благодарю, благодарю я Господа,  
Что волею своей донельзя прав.

С тобой прекрасно каждое мгновение –  
Оно достойно вечности своей  
В грядущем стихотворном откровении,  
Что снизойдёт в один из светлых дней.

\*\*\*

Август – время метеоров,  
Время сбывшихся желаний.  
Не беда, что осень скоро  
Лес обложит жёлтой данью.

Это время подведенья  
Промежуточных итогов.  
Ниспошли нам, Провиденье,  
Милосердье Воли Бога.

\*\*\*

### О. Чертову

Ясный взгляд и добрая улыбка  
Вновь с надгробья смотрят на меня...  
Быть поэтом в мире этом зыбком  
Можно лишь большой огонь храня.

В сердце.  
Он хранил такое пламя,  
Что и смерть не в силах затушить.  
Жил он просто, жил он рядом с нами  
Не жалея сил своей души

На стихи и смелые проекты  
Жаль, что пуля их оборвала...  
Но приносит память, словно ветер,  
Сделанные им в миру дела...

«Стол накрой, зажги огонь в камине,  
Ожидай в смирении друзей».  
...Для поэта смерти нет в помине,  
Есть бессмертье всех его идей.

\*\*\*

С тобой мне удивительно светло,  
Как будто в храме – первым утром Пасхи.  
И то, что душу нестерпимо жгло  
Тоскою надоедливо опасной,

Теряет власть былую надо мной.  
И больше ни к чему петлять строкою –  
С небес спустился в сердце мне покой  
И нет светлее этого покоя.

### Вечерняя лирика

Луна тонула в океане розовом  
Встречавших вечер нежностью небес.  
В такой-то час не скажешь строгой прозою –  
Она теряет свой обычный вес.

Я говорю под это вдохновение  
Из строчки выгнав всяческую ложь –  
В такие вот великие мгновения  
Душой по-настоящему живёшь.

### Ростовка

Ростовка, мной любимая Ростовка,  
С тобой свиданья хочется мне вновь.  
Хоть ты строкой моей воспета столько  
В недавнем прошлом,  
Что к тебе любовь

Кому-то кажется весьма нелепой –  
(Кому пейзаж милее городской),  
Но я, лишь вспомнив над тобою небо,  
Как лирик, становлюсь самим собой.

И так живу надеждами на встречу  
С тобой, деревня милая моя,  
Где петухов заутреннее вече  
Моим стихам – надёжнейший маяк.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

- Адеева Людмила Никифоровна** – д-р техн. наук, проф. кафедры неорганической химии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, adeeva@omsu.ru
- Амаглобели Михаил Георгиевич** – д-р физ.-мат. наук, проф. Тбилисского государственного университета им. Ивана Джавахишвили
- Атавин Евгений Георгиевич** – д-р хим. наук, доцент, декан химического факультета ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, Atavin@univer.omsk.su
- Белан Наталья Алексеевна** – декан естественного факультета Омского Института повышения квалификации работников образования, natabelan@rambler.ru
- Блинов Василий Иванович** – канд. физ.-мат. наук, доц. кафедры физики твердого тела ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, blinov@univer.omsk.su
- Богданова Вера Александровна** – канд. физ.-мат. наук, доц. кафедры микроэлектроники и медицинской физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, dna@omsu.ru
- Бокелавадзе Т.З.** – канд. физ.-мат. наук, доцент Кутаисского государственного университета им. А. Церетели, bokel71@yahoo.com
- Борбат Владимир Федорович** – д-р техн. наук, проф., зав. кафедрой неорганической химии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского borbat@univer.omsk.su
- Бухбиндер Геннадий Львович** – канд. физ.-мат. наук, доц. кафедры теоретической ОмГУ им. Ф.М. Достоевского glb@omsu.ru
- Вершинин Вячеслав Исаакович** – д-р хим. наук, проф., зав. кафедрой аналитической химии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, vershinin@univer.omsk.su
- Вилков Лев Васильевич** – д-р хим. наук, проф., лаб. газовой электронографии, химический факультет Московского государственного университета, LVVilkov@phys.chem.msu.ru
- Давлеткельдиев Надим Анварович** – канд. физ.-мат. наук, доц. кафедры микроэлектроники и медицинской физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, dna@omsu.ru
- Ждан Наталья Александровна** – канд. пед. наук, доц., проректор по учебной работе Омского института повышения квалификации работников образования dekan@igoou.ru
- Ильин Алексей Николаевич** – ассистент кафедры философии Омского государственного педагогического университета, ilin1983@yandex.ru
- Кабанов Александр Николаевич** – аспирант ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, m01kab@mail.ru
- Калинина Татьяна Николаевна** – канд. хим. наук, доц. кафедры аналитической химии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, kalinina@mail.ru
- Кадола Елена Владимировна** – преподаватель кафедры английского языка ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, lkto@rambler.ru
- Калайтан Ольга Александровна** – аспирант ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, kalajtan@omsu.ru
- Калайшиков Иван Анатольевич** – аспирант кафедры теоретической физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, cluster@univer.omsk.su.
- Климов Сергей Петрович** – аспирант кафедры теоретической физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, cluster@univer.omsk.su.
- Коваленко Татьяна Александровна** – аспирант кафедры неорганической химии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, kovalenko\_85@list.ru
- Колесников Вячеслав Юрьевич** – аспирант кафедры теоретической физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, cluster@univer.omsk.su.
- Логинов Константин Константинович** – аспирант, Омский филиал Института Математики им. С.Л. Соболева СО РАН, kloginov85@mail.ru
- Мамонов Александр Владимирович** – ЗАО Проектный институт реконструкции и строительства объектов нефти и газа, начальник департамента информационных систем Проектного института реконструкции и строительства объектов нефти и газа (ЗАО ПИРС), amamonov@pirs.omsknet.ru
- Мамонова Марина Владимировна** – канд. физ.-мат. наук, доц., доцент кафедры теоретической физики Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского mamonova@univer.omsk.su
- Марталлер Павел Николаевич** – аспирант кафедры теоретической физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, outimer@mail.ru
- Масякова Елена Николаевна** – аспирант кафедры аналитической химии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, vlaso-iri@yandex.ru
- Мельшин Андрей Олегович** – аспирант кафедры микроэлектроники и медицинской физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, dna@omsu.ru
- Морозов Алексей Алексеевич** – д-р хим. наук, проф. кафедры органической химии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, morozov@univer.omsk.su
- Морозов Николай Сергеевич** – аспирант кафедры теоретической физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского cluster@univer.omsk.su.
- Николаев Сергей Викторович** – канд. физ.-мат. наук, ОмГУ им. Ф.М. Достоевского 25sergeyn@mail.ru
- Нукенов Марат Мухамедкаримович** – инженер кафедры микроэлектроники и медицинской физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, nmm@mail



**Перцев Николай Викторович** – ведущий научный сотрудник Омского филиала Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, homlab@ya.ru

**Пичугина Анна Николаевна** – аспирант Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, homlab@ya.ru

**Прудников Владимир Владимирович** – д-р физ.-мат. наук, проф., зав. кафедрой теоретической физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, prudnikv@univer.omsk.su;

**Прудников Павел Владимирович** – канд. физ.-мат. наук, доц. кафедры теоретической физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, prudnikp@univer.omsk.su;

**Семенова Ольга Николаевна** – канд. техн. наук, науч. сотрудник Института проблем переработки углеводов СО РАН

**Сагитуллина Галина Павловна** – канд. хим. наук, доц. кафедры органической химии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, sagitullina@orgchem.univer.omsk.su

**Сагитуллин Рева Сафорович** – д-р хим. наук, проф., зав. кафедрой органической химии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, sagitullina@orgchem.univer.omsk.su

**Семиколенова Н.А.** – д-р физ.-мат. наук, проф., зав. кафедрой микроэлектроники и медицинской физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского

**Сидоров Евгений Николаевич** – аспирант кафедры микроэлектроники и медицинской физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, dna@omsu.ru

**Сизиков Анатолий Михайлович** – канд. хим. наук, проф., зав. кафедрой инженерной экологии и химии Сибирской автомобильно-дорожной академии, тел: 8-950-330-25-48

**Сологуб Николай Викторович** – аспирант кафедры микроэлектроники и медицинской физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, dna@omsu.ru

**Сыррева Анна Викторовна** – инженер кафедры аналитической химии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, syrreva@mail.ru

**Стасюк Анастасия Яковлевна** – аспирант кафедры органической ОмГУ Ф.М. Достоевского, atavin@univer.omsk.su

**Титухин Вениамин Николаевич** – д-р филос. наук, проф. кафедры философии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, shkarupa@nm.ru

**Тиховская Наталья Валерьевна** – канд. физ.-мат. наук, ассистент кафедры общей физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, tihovsk@omsu.ru

**Тихомиров Илья Валерьевич** – канд. физ.-мат. наук ОмГУ им. Ф.М. Достоевского,

**Царегородцева Галина Евгеньевна** – аспирант, Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН galinatsar@ya.ru

**Чупахина Татьяна Ивановна** – доц. кафедры оркестрового дирижирования и народных инструментов, ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, fki@cult.omsu.omskreg.ru

**Шелпакова Анна Сергеевна** – аспирант кафедры аналитической химии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, vlaso-iri@yandex.ru

**Шкарупа Владимир Михайлович** – канд, филос. наук, доц. кафедры философии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского,, shkarupa@nm.ru

**Югай Климентий Николаевич** – д-р физ.-мат. наук, проф., зав. кафедрой общей физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, yugay\_klimenty@mail.ru

## НИЖНИЕ НОВИНКИ



Приобрести книги вы можете:

- непосредственно в издательстве ОмГУ;
- в книжном киоске ЦДПП (2 корпус ОмГУ, 1 этаж);
- в магазинах «Академкнига»;
- наложенным платежом по почте, направив заказ по e-mail: [skv@adm.omsu.omskreg.ru](mailto:skv@adm.omsu.omskreg.ru);
- по предоплате, безналичным перечислением, направив заказ по e-mail: [skv@adm.omsu.omskreg.ru](mailto:skv@adm.omsu.omskreg.ru) и указав реквизиты своей организации.

*В этом случае книги будут отправлены по почте заказной бандеролью после поступления средств на счет ОмГУ.*

## Учебные издания

**Мухин, В.А. Окислительно-восстановительные процессы:** учебное пособие / В.А. Мухин. – Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2009. – 184 с.

Пособие составлено в соответствии с утвержденными учебными планами, разработанными на основании Государственного образовательного стандарта. Приведены основные понятия и сведения об окислительно-восстановительных реакциях. По основным темам приведены контрольные вопросы, задания и тесты. Большое внимание уделено применению окислительно-восстановительных реакций в науке и технике: электролизу растворов и расплавов, коррозии и защите металлов, химическим источникам тока, электрохимическим методам анализа. Приводятся сведения о химотронике и биоэлектрохимии.

Для студентов I–IV курсов химического факультета ОмГУ специальностей 020101.65 «Химия» и 240403.65 «Химическая технология».



**Купченко, В.Е. Психология малой группы:** учебно-методическое пособие / В.Е. Купченко. – Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2009. – 92 с.

Пособие представляет собой курс лекций по дисциплине «Психология малой группы». Содержание пособия включает описание понятия, признаков и видов малой группы, основных теоретических подходов к ее изучению в зарубежной и отечественной психологии, рассматривается образование, управление, функционирование и развитие малой группы.

Для студентов факультета психологии, практикующих психологов.

**Монина, Н.П. Мировая художественная культура:** учебно-методическое пособие / Н.П. Монина. – Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2009. – 192 с.

Рассматриваются основные темы изучаемого в высшей школе курса мировой художественной культуры с привлечением наглядных схем, таблиц, изображений для лучшего усвоения учебного материала и создания целостной системы представлений о развитии мировой художественной культуры.

Для студентов специальности «Народное художественное творчество».



## Научная литература

**Ковалёв, А.И.** Информационное обеспечение управления маркетингом: монография / А.И. Ковалёв, Е.В. Исаева. – Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2009. – 256 с.

Монография посвящена проблемам информационного обеспечения деятельности руководителей и специалистов в области маркетинга. Рассмотрены теоретические и методические вопросы построения маркетинговой информационной системы (МИС). Детально анализируются показатели оценки внешней и внутренней среды компании посредством маркетингового аудита. Описанные технологии создания МИС сопровождаются изложением методов сбора и анализа информации.

Для специалистов в области маркетинга и управления, аспирантов, студентов и преподавателей вузов.



**Рыбаков, В.А.** Рецепция права: общетеоретические вопросы: монография / В.А. Рыбаков. – Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2009. – 276 с.

Книга посвящена одной из актуальных и недостаточно раскрытых в отечественной юридической литературе проблем – рецепции права. В работе содержится анализ объективных основ и характерных черт данного явления, который позволяет выделить рецепцию в основной способ модернизации национального права. Определяются роль рецепции в правотворческом процессе, пределы заимствования норм иностранного права. Ряд разделов посвящен рецепции в отечественном праве.

Для ученых-юристов, социологов, преподавателей, аспирантов и студентов юридических вузов.

## Готовятся к изданию

**Лаврова Л.А.** Экономический рост и человеческий капитал: монография / Л.А. Лаврова. – Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2009.

**Лаврова Л.А.** Бухгалтерская (финансовая) отчетность: уч. пособие / Л.А. Лаврова. – Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2009.

Получить дополнительную информацию о наших книгах, журналах и планах, высказать свои пожелания и задать интересующие вас вопросы вы можете, посетив сайт издательства в сети Интернет: <http://www.omsu.ru>.

*Издательство Омского государственного университета приглашает к сотрудничеству авторов образовательной и научной литературы.*

По всем вопросам обращаться:  
Издательство Омского государственного университета  
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а  
тел.: (3812) 67-32-55, 64-30-61  
факс: (3812) 22-36-41 (с пометкой: для издательства)  
e-mail: [skv@adm.omsu.omskreg.ru](mailto:skv@adm.omsu.omskreg.ru)

**Научные учреждения, получающие  
«Вестник Омского университета»**

Государственная публичная историческая библиотека (Москва)  
Библиотека Академии наук (Санкт-Петербург)  
Российская национальная библиотека (Санкт-Петербург)  
Санкт-Петербургский государственный университет  
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова  
Алтайский государственный университет (Барнаул)  
Дальневосточный государственный университет (Владивосток)  
Иркутский государственный университет  
Казанский государственный университет  
Кемеровский государственный университет  
Красноярский государственный университет  
Нижегородский государственный университет  
Новосибирский государственный университет  
Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН (Новосибирск)  
Пермский государственный университет  
Саратовский государственный университет  
Удмуртский государственный университет (Ижевск)  
Уральский государственный университет (Екатеринбург)  
Челябинский государственный университет  
Томский государственный университет  
Тюменский государственный университет

## Информация для авторов

### 1. Общие положения

Журнал «Вестник Омского университета» существует с 1996 г. Периодичность выхода журнала – 4 раза в год (1 раз в квартал). Журнал распространяется согласно обязательной рассылке издательств, собственному списку рассылки, а с 2004 г. является и подписным изданием, внесенным в каталоги Роспечати.

Редколлегия принимает статьи по следующим научным направлениям: *математика, физика, медицинская биофизика, химия, философия, политология, социология, теология, история, книговедение, филология, искусство и культура, экономика, юридические науки, педагогика и методика преподавания.*

К публикации в журнале принимаются научные статьи, рецензии, сообщения о научных форумах, работе диссертационных советов и т. д. Имеется литературная страница, куда принимаются небольшие рассказы, эссе, стихи.

**Автор статьи обязан заключить с Омским государственным университетом им. Ф.М. Достоевского лицензионный договор о передаче неисключительных прав на использование произведения, включенного в «Вестник Омского университета», и предоставить договор, подписанный автором, вместе со статьей в редакцию журнала. Ознакомиться с договором и методическими рекомендациями по его заполнению можно на сайте: <http://www.omsu.ru/page.php?id=1043>.**

**ВНИМАНИЕ! Без договора статьи к публикации приниматься редакцией не будут.**

Соискатели, аспиранты, студенты обязаны получить рекомендацию к публикации научного руководителя или другого ученого, имеющего степень доктора или кандидата наук.

Статья должна быть подписана автором (а при наличии нескольких авторов – всеми соавторами) и редактором по направлению.

Статья должна быть тщательно выверена автором. За достоверность и точность приведенных фактов, цитат, географических названий, собственных имен и прочих сведений несет ответственность автор.

Рукописи статей подвергаются редакционной обработке, при необходимости отдельные замечания редактора согласуются с автором.

**Рецензирование.** Каждая статья проходит обязательное рецензирование двумя специалистами той отрасли знания, по которой предложена. Редакция направляет материалы на рецензирование самостоятельно. Рецензентами являются доктора и кандидаты наук из ведущих научных центров и вузов России.

Редакция не ставит в известность авторов об изменениях и сокращениях рукописи, имеющих редакционный характер и не затрагивающих содержание статьи.

**Статьи, оформленные не в соответствии с настоящими требованиями, приниматься к публикации не будут.** Рукописи и дискеты авторам не возвращаются.

Отступления в оформлении рукописи от указанных требований и большое количество технических погрешностей и ошибок позволяют редколлегии принять решение об отклонении статьи или переносе ее публикации в следующий номер.

В случае отказа в публикации редакция направляет автору мотивированный отказ.

**Плата с авторов за публикацию рукописей не взимается.**

### 2. Правила оформления научной статьи

**Требования к публикациям:** актуальность, высокий научный уровень, хороший стиль изложения, без длинных введений и повторений. Сокращения слов не допускаются, кроме общепринятых. Аббревиатуры включаются в текст лишь после их первого упоминания с полной расшифровкой (например, Уголовный кодекс Российской Федерации – УК РФ).

Материалы предоставляются в печатном и электронном виде (на носителях – дискета 3,5А, CD) либо по электронной почте E-mail: [vestnik@omsu.omskreg.ru](mailto:vestnik@omsu.omskreg.ru)

**Объем статьи** – до 1,5 п. л. (30 000 знаков), научного сообщения, рецензии – до 0,5 п. л. (10 000 знаков), литературных трудов – до 0,25 п. л. (5000 знаков). Превышение объема допускается в индивидуальном порядке по решению редколлегии.

**Оформление статьи:** поля сверху, снизу, слева и справа – по 2,5 см. В верхнем левом углу листа ставится УДК. Ниже обычным шрифтом (11 пт.) – инициалы, фамилия автора, строкой ниже – полное название организации. Далее по центру жирным шрифтом (Ж) Times New Roman Cyr размером 11 пт. прописными буквами печатается название статьи. Ниже через строку помещается аннотация на русском языке (3–5 предложений 10 пт), раскрывающая основное содержание статьи. Ещё через строку помещают основной текст статьи, набранный шрифтом Times New Roman Cyr 11 пт. Абзацный отступ 0,7 см. Межстрочный интервал одинарный. В конце статьи курсивом – краткое название статьи для колонтитула. На отдельной странице – фамилия и инициалы автора название статьи на русском и английском языках, а также аннотация и ключевые слова на русском и английском языках, реферат статьи.

К статье прилагается информация об авторе: фамилия, полные имя и отчество, ученая степень и звание, должность, полный рабочий адрес (с указанием почтового индекса), E-mail, номер служебного, домашнего и мобильного телефона.

*Рисунки* должны быть четкими, фотографии – контрастными. Все иллюстрации должны иметь сквозную нумерацию, подрисуночную подпись. Не рекомендуется загромождать иллюстрации ненужными деталями: большинство надписей выносится в подпись, а на рисунке заменяется цифрами или буквами. Подрисуночная подпись должна быть лаконичной, но емкой по содержанию (10 пт).

*Таблицы* должны быть наглядными, иметь название, порядковый номер. Заголовки должны точно соответствовать содержанию граф. Все данные внутри таблицы – 10 пт, головка таблицы выделяется жирным шрифтом.

Размеры рисунков и таблиц – не более 80×80 мм (на одну колонку), 170×170 мм (на две колонки) в начале или конце полосы. Не нумеруются таблица или рисунок, если они в тексте единственные. На все таблицы и рисунки должны быть ссылки в тексте. *Рисунки и таблицы вставляются в тексте в нужное место.*

*Формулы* простые внутристрочные и однострочные могут быть набраны без использования специальных редакторов – символами (допускается использование специальных символов из шрифтов Symbol, Greek Math Symbols, Math-PS Mathematica ВТТ). Сложные и многострочные формулы должны быть набраны в редакторе формул Microsoft Equation 2.0, 3.0. Смешение символов из текстовых редакторов с символами из редактора формул не допускается. В распечатанном варианте должны быть подчеркнуты простым карандашом прописные буквы двумя чертами снизу, строчные буквы – двумя чертами сверху – в случаях, когда написание строчных и прописных букв совпадает и отличается только величиной. Индексы и показатели степени должны быть четко ниже или выше строки. Нумерация формул дается справа в круглых скобках, а сама такая формула размещается отдельной строкой по центру. Если на конкретную формулу нет дополнительных ссылок в тексте или она в единственном числе, то нумерация не нужна. Длина формулы – не более 70 мм.

*Сноски* на литературу оформляются цифрами в квадратных скобках (например, [1]) и приводятся в конце статьи в разделе «Литература» в порядке их упоминания в тексте. Все библиографические данные должны быть тщательно выверены.

*Примечания* оформляются числами в виде верхнего индекса и должны быть последовательно пронумерованы. Тексты примечаний относят в конец статьи в раздел ПРИМЕЧАНИЯ и нумеруют числом в виде верхнего индекса. *Подстрочные сноски в тексте не допускаются.*

Если в статье есть и ПРИМЕЧАНИЯ, и ЛИТЕРАТУРА, то сначала идет раздел ПРИМЕЧАНИЯ.

**Правильное оформление статей значительно облегчит труд редакторов и ускорит публикацию вашего материала.**

После выхода очередного номера из печати каждому автору выдается 1 экземпляр бесплатно.

Адрес редакции журнала: 644077, Омск-77, пр. Мира, 55-а, I корпус ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, каб. 240. Тел. (3812) 64-44-92, e-mail [vestnik@omsu.omskreg.ru](mailto:vestnik@omsu.omskreg.ru)

**Приглашаем к активному сотрудничеству с нашим журналом!**