

თბილისის უნივერსიტეტის შრომები

ТРУДЫ ТБИЛИССКОГО УНИВЕРСИТЕТА

PROCEEDINGS OF TBILISI UNIVERSITY

271

290/5  
1987

ISSN 0376—2637

ფიზიკა  
ФИЗИКА  
PHYSICS

23

თბილისი Тбилиси Tbilisi

1987

თბილისის უნივერსიტეტის გამომცემლობა  
Издательство Тбилисского университета  
TBILISI UNIVERSITY PRESS

თბილისის უნივერსიტეტის შრომები

PROCEEDINGS OF TBILISI UNIVERSITY

ფიზიკა

PHYSICS

თბილისი 1987 TBILISI

ТРУДЫ ТБИЛИССКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Ф И З И К А

Тбилиси 1987



საზოგადოებრივი მეცნიერებების  
საქართველოს ენციკლოპედია

ბ, აბაღლოძე, ი, ვაშაკიძე, ზ, კაჭლიშვილი  
(რედაქტორი), ზ, სანაძე, მ, ქაჩიშვილი, ი, შა-  
ვაშვილი (მდივანი), ა, ხელაშვილი

Редакционная коллегия

Н.С.Амаглобели, И.Ш.Вашакидзе, З.С.Качлишвили  
Т.И.Копалейшвили (редактор), Т.И.Санадзе,  
Т.М.Шавишвили (секретарь), А.А.Хелашвили

EDITORIAL BOARD

N.Amaglobeli, Z.Kachlishvili, A.Khelashvili, T.Kopaleishvili (editor),  
T.Sanadze, T.Shavishvili (Secretary), I.Vashakidze

© Издательство Тбилисского университета, 1987



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
государственного университета

საქართველოს სახელმწიფო უნივერსიტეტის  
უბიკუბოვავთბ დებბებბ

271, 1987

О ЗАКОНЕ ДИСПЕРСИИ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНОВ В СОЕДИНЕНИЯХ  
 $InP$  и  $InAs$

Н.П.Кекелидзе, В.А.Гогмашвили  
З.В.Квиникадзе, З.Ф.Давитая

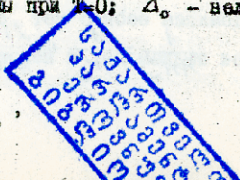
Знание зонной структуры кристаллической решетки твердого тела, т.е. характера зависимости энергии электрона  $E$  от волнового вектора  $\vec{k}$  имеет принципиальное значение, так как этой зависимостью определяются почти все основные физические свойства твердых тел. Удачной моделью для описания зонной структуры соединений типа  $A^3B^5$ , неоднократно подтвержденной результатами экспериментальных исследований, является модель, предложенная Кейном [1].

При учете взаимодействия зоны проводимости с валентными подзонами энергетический спектр по Кейну описывается выражением:

$$E'(E'+E_g)(E'+E_g+\Delta_0) - k^2 P^2 (E'+E_g + \frac{2}{3}\Delta_0) = 0, \quad (I)$$

где  $E_g$  - ширина запрещенной зоны при  $T=0$ ;  $\Delta_0$  - величина спин-орбитального расщепления;

$$E' = E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = E - E_0, \quad (2)$$



$m_0$  — масса покоя свободного электрона;  $P$  — постоянная, учитывающая связь между зоной проводимости и валентной зоной и определяемая с помощью энергетического параметра

$$E_P = \left( \frac{2m_0}{\hbar^2} \right) P^2$$

Когда ширина запрещенной зоны  $E_g$  гораздо больше величины спин-орбитального расщепления  $\Delta_0$  (например, в случае  $\text{InP}$   $E_g = 1,37$  эВ и  $\Delta_0 = 0,16$  эВ), из кубического уравнения (1) следует, что решение для электронов проводимости имеет вид:

$$E' = -\frac{E_g}{2} + \sqrt{\frac{E_g^2}{4} + \kappa^2 P^2} = \frac{E_g}{2} \left[ \left( 1 + \frac{4P^2 \kappa^2}{E_g^2} \right)^{1/2} - 1 \right]$$

или, согласно (2):

$$E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_0} + \frac{E_g}{2} \left[ \left( 1 + \frac{4\kappa^2 P^2}{E_g^2} \right)^{1/2} - 1 \right]. \quad (3)$$

Данное выражение представляет собой закон дисперсии энергии электронов в решетке для нестандартной зоны проводимости в двухзонном (нижняя зона проводимости и верхняя валентная зона) приближении модели Кейна. Из (3) следует, что когда  $E_g \gg \kappa P$ ,

$$E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_0} + \frac{\kappa^2 P^2}{E_g} = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2} \left[ \frac{1}{m_0} + \frac{2P^2}{\hbar^2 E_g} \right] = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_n^*},$$

где

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2P^2}{\hbar^2 E_g} \quad (4)$$

- значения эффективной массы электронов для стандартной зоны, или на дне непараболической зоны (когда эффективную массу можно считать скалярной величиной). При таких допущениях выражение (3) переходит в обычный квадратичный закон дисперсии энергии электронов в решетке. С другой стороны, допуская, что  $m_0 \gg m_n^*$  (это совершенно справедливо для всех материалов системы типа А<sup>3</sup>В<sup>5</sup>) из соотношения (4) следует, что  $P^2 = \frac{\hbar^2 \epsilon_g}{2m_n^*}$ . Если принять во внимание, что в данном случае энергией свободного электрона  $\epsilon_0$  также можно пренебречь по сравнению с энергией электрона в решетке  $\epsilon$ , то (3) дает

$$\epsilon = \frac{\epsilon_g}{2} \left[ \left( 1 + 2 \frac{\hbar^2 k^2}{m_n^* \epsilon_g} \right)^{1/2} - 1 \right]. \quad (5)$$

Отсюда следует, что когда  $m_n^*$  и  $\epsilon_g$  принимают сравнительно большие значения, к квадратичному закону дисперсии энергии электронов добавляется очень малая поправка. Действительно, если корень в выражении (5) разложить в ряд и остановиться на третьем члене, получается

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} - \frac{\hbar^4 k^4}{4m_n^{*2} \epsilon_g} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \left( 1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^* \epsilon_g} \right) \quad (6)$$

и, следовательно, отклонение зоны проводимости соответствующего материала (в нашем случае  $\text{InP}$ ) от параболического вида незначительно. Непараболичность может играть заметную роль только при очень больших значениях  $\vec{k}$ . Отсюда вытекает также следующее важное заключение: чем больше ширина запрещенной зоны полупроводника, тем слабее взаимодействие зоны проводимости с валентной зоной и тем меньше величина





спин-орбитального расщепления, вызванного этим взаимодействием. Сформулированный вывод с физической точки зрения вполне оправдан.

Противоположный случай, когда  $\Delta_0 \gg \epsilon_g$  на примере антимонида индия ( $\epsilon_g = 0,23$  эВ,  $\Delta_0 = 0,9$  эВ), рассмотрен в /2/ и автор приходит к заключению, что непараболичность и в этом случае незначительна. Этот вывод является физически явно неверным, так как именно в антимониде индия непараболичность очень существенна. Причиной такого ошибочного вывода является тот факт, что при допущении  $\Delta_0 \gg \epsilon_g$  в уравнении (1) выпадает именно тот параметр ( $\Delta_0$ ), который и вызывает отклонение от параболичности и нигде в дальнейших рассуждениях уже не фигурирует.

В случае же, когда величина спин-орбитального расщепления порядка (соизмерима) ширины запрещенной зоны материала (например, в случае  $InAs$ , где  $\epsilon_g = 0,39$  эВ и  $\Delta_0 = 0,43$  эВ) и в формуле (1) нельзя отбросить  $\epsilon_0$  и  $\epsilon_g$  по сравнению с энергией  $\epsilon$ , следует решать кубическое уравнение (1) относительно  $\epsilon' = \epsilon - \epsilon_0$ , что не всегда представляется возможным. Однако, надо отметить, что для вычисления кинетических коэффициентов достаточно знать только зависимость  $\vec{k}$  от  $\epsilon$ . Если в данном случае выполняется также условие  $m_n^* \ll m_0$ , то получается закон дисперсии, который называется трехзонной моделью Кейна /2/.

Тем не менее, следует отметить, что, несмотря на вышесказанное, зона проводимости арсенида индия (так же, как и других соединений типа  $A^3B^5$ ), как следует, например, из наших экспериментальных исследований /3,4/, с достаточной

точностью описывается двухзонным приближением модели Кейна.

При этом, как показал проведенный нами анализ механизмов рассеяния электронов, для образцов с концентрациями выше  $10^{17} \text{ см}^{-3}$  неучет отклонения зоны проводимости арсенида индия от параболичности приводит к ошибочным заключениям.

С целью подтверждения приведенных выше теоретических выводов для соединений  $\text{InP}$  и  $\text{InAs}$  нами была вычислена также концентрационная зависимость параметра непараболичности зоны проводимости  $\gamma$ , введенного Колодзейчаком и Соновским [5] следующим образом:

$$\gamma = 3 \frac{n}{m_n^*} \frac{dm_n^*}{dn} = \frac{2\hbar^2 m_n^* (3g_n^2)^{2/3}}{\epsilon_g m_n^{*2}}, \quad (7)$$

где  $m_n^*$  - эффективная масса электронов на уровне Ферми.

Как видно из (7), параметр  $\gamma$  дает единичное изменение эффективной массы электронов при единичном изменении их концентрации, или, что то же самое, единичное изменение кривизны зоны проводимости в зависимости от волнового вектора  $\vec{k}$ . При квадратичном законе дисперсии энергии электронов  $\gamma = 0$ .

Значения  $m_n^*$  определялись по нашим данным на основе электрических и термоэлектрических измерений [3, 4]. Результаты наших вычислений приведены на рисунке. Полученные кривые подтверждают тот факт, что в  $\text{InP}$  практически во всем концентрационном интервале непараболичность зоны проводимости незначительна, а в случае  $\text{InAs}$  уже при концентрациях электронов выше  $10^{17} \text{ см}^{-3}$  при расчетах квантовых параметров необходимо ее учитывать. Физически это означает,



что чем уже ширина запрещенной зоны материала, тем при меньшей заселенности зоны проводимости проявляется отклонение закона дисперсии энергии электронов от простой квадратичной зависимости.

Поступила 9.VI.1986

Научно-исследовательская лаборатория полупроводников материаловедения ТГУ

Литература

1. E.O.Kane, Phys. Chem.Sol. v.1, 1957, 249.
2. Б.М.Аскеров. Кинетические эффекты в полупроводниках. Л., 1970.
3. N.P.Kekelidze, Z.V.Kvinikadze, J. Phys., v.36, 1975, 133.
4. В.А.Тогиашвили. Канд.дисс., ТГУ, Тбилиси, 1975.
5. J.Kolodziejczak, L.Sosnowski, Acta Phys. Polon., v.21, 1962, 399.

5. ჟუკოძე, ვ.გოგიაშვილი, ვ.კვინიკაძე, მ.ბაგრატიანი  
ვრეჯონიანის ენციკლოპედიის ინსპირაციის კონსტრუქციის  
შედეგად

*In P* და *In As* - ის შედეგად

რეზიუმე

საფარველთა ვრეჯონიანის ენციკლოპედიის კონსტრუქციის  
კონსტრუქციის გამოყენებით შეიქმნა ანალიზი, სადა ვრეჯონიანის  
კონსტრუქციის აკრძალული მონის სიდიდისა და მინიმალური კონსტრუქციის  
ფორმების შიგნით დამოკიდებულებისა, რომლებმაც ინსპირაციის კონსტრუქციის  
არამარტივებული ხეობა.



N.Kekelidze, V.Gogiashvili, Z.Kvinikadze, Z.Davitaya

# ON THE ELECTRON ENERGY DISPERSION LAW IN $InP$ AND $InAs$ COMPOUNDS

## Summary

A detailed theoretical analysis of the Kane's general expression for the electron energy dispersion law has been carried out. The regularity of the dependence between the band gap and minimal electron concentration at which the dispersion law becomes nonparabolic has been established.

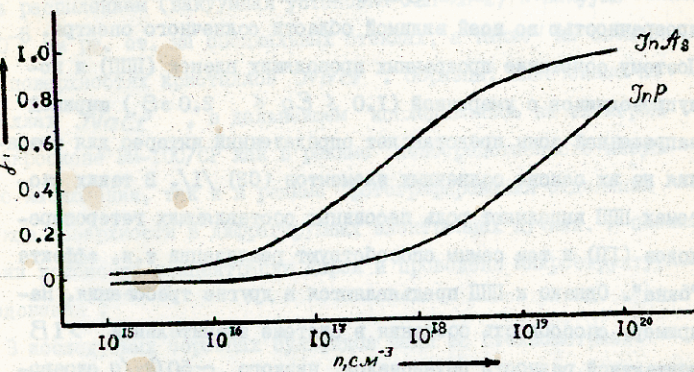


Рис.

Зависимость параметра непараболичности  $\gamma$  от концентрации носителей тока.



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
 государственного университета  
 შობრისი შრომის ნიჭი რჩება მრავალსაბუნების საბუნების  
 უბიძგისთვის შრომის

271, 1987

ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СИЛЬНОУПРОЖДЕННЫХ  
 ТОНКИХ СЛОЕВ СУЛЬФИДА МЕДИ

Р.В.Кантария, Т.И.Курчишвили

Различные окислы с большой  $E_g > 2,5 \text{ эВ}$  шириной за-  
 прещенной зоны, например  $\text{In}_2\text{O}_3$ ,  $\text{SnO}_2$  и др., наряду с  
 удельной проводимостью  $\sigma \leq 10^{-3} \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$  обладают высокой  
 прозрачностью во всей видимой области солнечного спектра.  
 Поэтому сочетание прозрачных проводящих пленок (ППП) и по-  
 лупроводников с умеренной ( $1.0 \leq E_g \leq 2.0 \text{ эВ}$ ) шириной  
 запрещенной зоны представляет определенный интерес для созда-  
 ния на их основе солнечных элементов (СЭ) /1/. В таких сис-  
 темах ППП выполняют роль пассивных составляющих гетеропере-  
 ходов (ГП) и тем самым способствуют реализации т.н. эффекта  
 "окна". Однако к ППП предъявляются и другие требования. На-  
 пример, способность создания в системе значительной  $> 1 \text{ В}$   
 контактной разности потенциалов, низкого  $\sim 50 \text{ Ом/к}$  поверхно-  
 го сопротивления и др.

В этом плане, согласно имеющимся экспериментальным  
 результатам /2 - 4/, сульфид меди в качестве  $P^+$  - сос-  
 тавляющего ГП в ряде случаев в наибольшей степени удовлет-  
 воряет требованиям, предъявляемым к материалам "окна" ГП/5/.



Вместе с тем, именно оптические свойства тонких  $d \leq 500 \text{ \AA}$  и сильновырожденных пленок сульфидов меди в области спектра  $0,25 + 1,25 \text{ мкм}$  исследованы в меньшей степени / 6+8/, что и составляет цель нашей работы.

Сульфид меди принадлежит к сложным, многофазным и саморегулируемым полупроводникам /9,10/, электрические и оптические свойства которых зависят от стехиометрии /6+10/.

Иными словами: сульфид меди представляет собой твердый раствор различных сульфидов меди. Существующая зависимость параметров сульфида меди от стехиометрии характеризуется несколькими узкими гомогенными областями, учет которых, в основном, и определяет правильную постановку задачи исследований.

Экспериментальные образцы пленок сульфида меди изготавливались распылением (вакуумная установка УВН-2Н-1) в вакууме  $2 \cdot 10^{-5} \text{ мм рт. ст.}$  на специальных стеклах, а также на свежеколотых поверхностях кристаллов *Nace*. Образцы, нанесенные на кристаллах *Nace*, в дальнейшем исследовались на электронном микроскопе ЭМ-10С/СР как в режиме непосредственного визуального наблюдения, так и в режиме фотографирования отдельных участков поверхности в дифрагирующих электронных пучках. В пленках оценены холловские концентрации дырок и проведены микроструктурные исследования.

В исследуемых образцах сульфидов меди со стехиометрией  $\text{Cu/S} = 1,765 + 1,79$  концентрация дырок в пленках составляла  $p > 10^{20} \text{ см}^{-3}$ , при плотности состояний дырок в валентной зоне  $N_v = 6 + 9 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  ( $m^* = (1,7 + 1,8) m_e$  согласно /11/). Так что минимальная энергия кванта, соот-



ветствующая "зона-зона" поглощению в полупроводнике, определялась соотношением  $\hbar\omega \geq \epsilon_g^0 + \epsilon_\phi + \Delta\epsilon_g$ , где  $\epsilon_g^0$  - оптическая ширина запрещенной зоны стехиометрического  $Cu_2S$  /12/;  $\epsilon_\phi$  - смещение уровня Ферми вглубь  $\epsilon_v$ -зоны полупроводника, а  $\Delta\epsilon_g$  - соответствующее фазовым превращениям изменение величины  $\epsilon_g^0$  при перестройке параметров решетки элементарных ячеек.

На рис. 1 представлены кривые (а, б, в) пропускания тонких пленок сульфида меди различных составов. Характерно, что коэффициенты пропускания пленок зависят не только от толщины  $d$ , но и регулируются поглощением на свободных носителях зарядов. Последнее, как известно, визуализирует истинную зависимость  $T_\lambda \sim f(d)$ . Соответствующие экспериментальные кривые отражения пленок характеризовались двумя областями: область  $1,0 + 0,7$  мкм относительного постоянства, в которой  $R_\lambda \approx 0,1$ , и область  $0,6 + 0,25$  мкм относительного резкого роста  $R_\lambda$  до величин  $\sim 0,35$ .

Коэффициенты спектрального поглощения  $\alpha_\lambda$  пленок сульфидов меди рассчитывались с учетом многократного отражения и преломления излучения в пленках /13/ и представлены на рис. 2. Согласно экспериментальным результатам в исследуемой области спектра составы пленок  $Cu/S = 1,765 + 1,79$  характеризуются довольно высокими коэффициентами поглощения  $\alpha_\lambda \geq 10^4 \text{ см}^{-1}$  и имеют широкий минимум на длине волны  $\lambda \approx 0,65 \pm 0,05$  мкм. Причем, сильное поглощение света на свободных носителях зарядов, полностью размывает край поглощения и в значительной степени затрудняет определение красной границы полупроводника.



Итак: впервые рассчитан коэффициент поглощения сильновырожденных тонких  $d \leq 500 \text{ \AA}$  пленок сульфида меди в оптическом диапазоне  $0,25 + 1,25 \text{ мкм}$  с составами  $Cu/S = 1,765 + 1,79$ . Изложенные результаты отличны от аналогичных, полученных для слабовырожденных пленок толщиной  $\sim 1,0 \text{ мкм}$  /14/, и подтверждают данные /15/ о сильной зависимости основных параметров сульфида меди от состава материала;

сильновырожденные пленки сульфида меди обладают значительной величиной коэффициента поглощения, что ограничивает их применение в качестве "окна" ГП с толщинами  $d > 550 \text{ \AA}$ ;

существует сложная зависимость между коэффициентом поглощения и степенью вырождения сульфида меди, определяемой составом полупроводника. Последнее необходимо учитывать в каждом отдельном случае при расчетах фотоэлектрических параметров СЭ на основе  $P^+$  - сульфидов меди и  $n$  - полупроводников с умеренной шириной запрещенной зоны.

В заключение авторы выражают признательность доценту Чиковани Н. за полезное обсуждение полученных результатов.

Поступила 12.VI.1986

Кафедра  
твёрдого тела

### Литература

1. I.Shewchun, J.Dubow, A.Myszkowski, Singh. J. Appl. Phys. 49, 855 (1978).
2. В.Н.Комашенко. Новые методы получения электроэнергии. АН СССР, 2 (8), 56 (1980).
3. О.Д.Борковская и др. Письма в ЖТФ, 6, 24, 1490 (1980).
4. С.Ю.Павелец. Радиотехника, 4, 3 (1982).





5. P.V. Kantaria, S.Yu. Pavelec, G.A. Fedorus. Структура и физические свойства тонких пленок. Тез. докл. Ужгород, 44(1977).
6. Г.П. Сорокин, Ю.М. Папшев, П.Т. Оуш. ФТП, 7, 7 (1965).
7. B.Selle, J.Maeger. Phys.Stat. Sol. 30, K 153 (1968).
8. B.Mulder, Phys.Stat. Sol(a) 5, 409 (1973).
9. S.Djurle, Acta Chem. Scand. 12, 1415 (1958).
10. F.Guastavino, H.Luquet, J.Bougnot, M.Savelli. J. Phys. Chem. Sol. 36, 621 (1975).
11. О.Р. Астахов. Неорг. материалы. II, 1506 (1975).
12. P.V. Kantaria, S.Yu. Pavelec, G.A. Fedorus. ФТП, 13, 1183 (1979).
13. В.И. Фистуль. Введение в физику полупроводников, 134, М., Высшая школа (1984).
14. И.А. Власенко, Я.Ф. Кононец. Укр. физ.ж. 16, 2 (1971).
15. Г.П. Сорокин, А.П. Паденко. Известия ВУЗ, физика, 5 (1966).

რ. კანტარია, ს. ქუჩიძევილი

ძირითადი ბარათების სპექტრის მახასიათებლების მკვლევარი

ფიზიკის ინსტიტუტი

თბილისი

შეზღვეულია ძირითადი ბარათების  $N_0 > 5 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  სპიკრის მახასიათებლის მკვლევარი  $d < 500 \text{ \AA}$  ფიზიკის ინსტიტუტი (R; T;  $\alpha$ ) მკვლევარი  $Cu/S = 1,6 \pm 0,05$  სტრუქტურული მკვლევარი.

R.Kantaria, T.Kurchishvili

### OPTICAL CHARACTERISTICS OF STRONGLY DEGENERATE THIN FILMS OF CUPRIC SULPHIDE

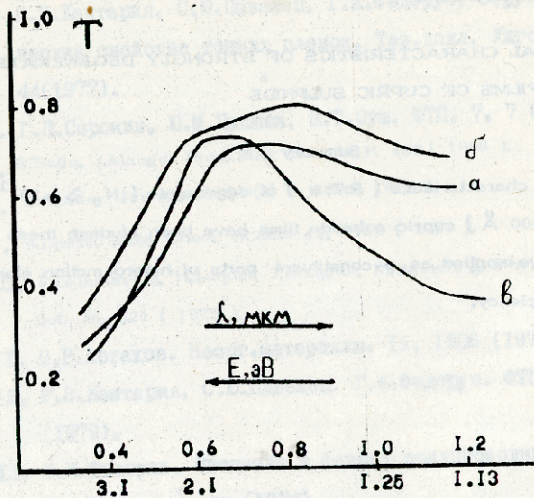
#### Summary

Optical characteristics ( R;T;α ) of degenerate (  $N_0 \geq 5 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  ) thin (  $d \leq 500 \text{ \AA}$  ) cupric sulphide films have been studied; these compounds are applied as p-constituent parts of heterojunction elements with high efficiency.

23796



65356083306  
 2235582606  
 2235582606  
 3088303030



ՐԻՏ. 1. Սպեկտրալնե կրիվե քոքուսիլննալնոն տոնկի քլեմոք  
սուլֆիդա մեդի նա Օբլաստի ստեխիոմեթրի

$$\mu/S = 1,8 \pm 0,05:$$

- ա)  $d \approx 500 \text{ \AA}$ ;  $\rho_p \approx 8 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ;  
 օ)  $d \approx 400 \text{ \AA}$ ;  $\rho_p \approx 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ ;  
 Վ)  $d \approx 450 \text{ \AA}$ ;  $\rho_p \approx 10^{21} \text{ cm}^{-3}$

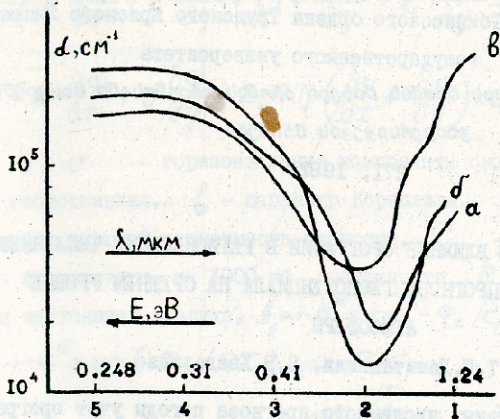


Рис. 2. Зависимость спектральных коэффициентов поглощения нестехиометричных  $\text{Cu/S} = 1,8 \pm 0,05$  составов тонких пленок сульфида меди от длины волны (энергии) падающего излучения (обозначения те же, что и на рис. 1).



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
 государственного университета  
 თბილისის შრომის ნობელი რჩობის თბილისის სახელმწიფო  
 უნივერსიტეტის შრომები  
 271, 1987

ОБ УЧЕТЕ ВЛИЯНИЯ ОРОГРАФИИ В РЕГИОНАЛЬНЫХ ЧИСЛЕННЫХ  
 МОДЕЛЯХ ПРОГНОЗА ГЕОПОТЕНЦИАЛА НА СРЕДНЕМ УРОВНЕ  
 АТМОСФЕРЫ

Т.П. Давиашвили, З.В. Хведелидзе

1. В задачах численного прогноза погоды учет орографических эффектов в основном осуществляется путем замены краевого условия на нижней границе атмосферы. Однако следует отметить, что в случае высоких горных массивов, какими обладает, к примеру, интересующая нас орография Кавказа, такой метод учета орографических эффектов является довольно приближенным.

Более точный метод учета влияния орографии на динамическое воздействие поля метеорологических элементов заключается в использовании  $\sigma = P/P_3$  - системы координат, где  $P_3$  - давление на уровне горы. Ясно, что в этой системе координат поверхность Земли является координатной поверхностью.

Будем исходить из системы полных уравнений гидродинамики, которые в рамках квазистатичности и неизменности скорости ветра с высотой в адиабатическом приближении для баротропной атмосферы в  $\sigma$  - системе координат имеют следующий вид

(1.5):

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} - f v + \frac{\partial \Phi}{\partial x} + A_1 \frac{\partial \Phi_s}{\partial x} = 0, \quad (1)$$



$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \ell u + \frac{\partial \Phi}{\partial y} + A_1 \frac{\partial \Phi_s}{\partial y} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} + v \frac{\partial \Phi}{\partial y} + B_1 R \bar{T}_1 \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0, \quad (3)$$

где  $u, v$  - горизонтальные компоненты скорости ветра;  
 $\Phi$  - геопотенциал,  $\ell$  - параметр Кориолиса,  $c^2 = RT_1$  -  
 параметр, имеющий размерность скорости,  $\bar{T}_1$  - среднее зна-  
 чение температуры, на 1000 мб. поверхности,  $R$  - сухая га-  
 зовая постоянная воздуха,  $A_1 = -\sigma^\alpha \exp(-\Phi_s / c_p T)$ ,  
 $B_1 = 1 - \sigma^\alpha \exp(-\Phi_s / RT_1)$ ,  $\alpha = R / c_p$ .

Используя обозначения  $E = \frac{u^2 + v^2}{2} + \Phi$ ,  $\Omega = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} + \ell$ ,

уравнения движения (1) и (2) приведем к форме Громеко-Лэмба:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} - u\Omega + A_1 \frac{\partial \Phi_s}{\partial x} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial y} + v\Omega + A_1 \frac{\partial \Phi_s}{\partial y} = 0. \quad (5)$$

Для системы (1) - (3) решается краевая задача с началь-  
 ными и граничными условиями в области  $\Omega_1 = \Omega_1 \cup \Gamma_1$ , с  
 границей  $\Gamma_1$ .

В начальный момент времени в области  $\Omega_1$  задаются зна-  
 чения геопотенциала и составляющую скорости ветра, определяе-  
 мые по геострофическим соотношениям:

$$\Phi|_{t=0} = \Phi_0, \quad u|_{t=0} = -\frac{1}{\ell} \left( \frac{\partial \Phi_0}{\partial y} + A_1 \frac{\partial \Phi_s}{\partial y} \right), \quad (6)$$

$$v|_{t=0} = \frac{1}{\ell} \left( \frac{\partial \Phi_0}{\partial x} + A_1 \frac{\partial \Phi_s}{\partial x} \right).$$

Граничные условия для системы (I) - (3) формулируются следующим образом: на границе  $\Gamma_1$  везде задается нормальная составляющая скорости ветра; там, где имеется вток, задается и потенциальный вихрь скорости. Граничные условия по заданной части границы  $\Gamma_1$  суть /2,3,9/:

если  $u > 0$ , тогда  $q = \Omega / P_3$  - потенциальный вихрь задается и значения  $v$  определяются из соотношения

$$\frac{\partial v}{\partial t} + uq + \frac{\partial E}{\partial y} + H_1 \frac{\partial \Phi_3}{\partial y} = 0; \quad (7)$$

если  $u < 0$ , то  $v$  определяется из соотношения

$$\frac{\partial v}{\partial t} = 0. \quad (8)$$

Значение геопотенциала для обоих случаев находим с помощью экстраполяции изнутри области  $\Omega_1$ , по соотношению

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \Phi + \frac{u^2}{2} \right) + H_1 \frac{\partial \Phi_3}{\partial x} = - \frac{\partial u}{\partial t} + v \left( \rho - \frac{\partial u}{\partial y} \right). \quad (9)$$

Аналогичные соотношения имеем и для других сторон границы  $\Gamma_1$ .

Конечно-разностная аппроксимация по времени системы уравнений (I) - (3) производится при помощи схемы Адамса-Башфорта (на первом шаге по времени применяется метод Эйлера). Пространственная аппроксимация осуществляется по схеме Шумана.

Для проведения контрольных расчетов были выбраны четыре синоптические ситуации, характерные для Кавказа: западный и восточный процесс, область высокого давления, прохождение оклюдированных волновых возмущений с запада. Два из этих процессов характеризовались большой изменчивостью поля давления.



Задача программировалась на языке Фортран и реализовалась на ЭВМ БЭСМ-6. Параметры задачи и физические константы принимали следующие значения:  $\ell = 1.2 \times 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ ,  $\Delta t = 4500 \text{ с}$ ,  $\Delta L = 3 \times 10^5 \text{ м}$ ,  $R = 287,05 \text{ м}^2/\text{с}^2 \cdot \text{К}$ ,  $c^2 = 66 \cdot 10^3 \text{ м}^2/\text{с}^2$ ,  $c_1 = 11.5 \times 10^3 \text{ м}^2/\text{с}^2$ .

Значения основных параметров вычислялись для центрального района области  $\bar{\Omega}_1$ , содержащего 100 точек, и их осредненные по 8 случаям значения приведены в таблице 1.

Таблица 1.

Вариант	$\epsilon$	$\epsilon_1$	$\rho$	$\rho_x$	$\rho_y$	$\kappa$	$\lambda$
Без учета орографии	0,98	0,91	0,45	0,6	0,69	0,55	1,06
С учетом орографии	0,83	0,8	0,49	0,65	0,73	0,61	0,98

Примечание:  $\epsilon$  - средняя относительная ошибка прогноза;

$\epsilon_1$  - средняя квадратическая относительная ошибка прогноза;

$\rho$  - оценка совпадений знака полей фактических и прогностических изменений;  $\rho_x, \rho_y$  - оценка совпадения знака полей фактических и прогностических изменений градиентов, соответственно, по направлениям  $x$  и  $y$ ;  $\kappa$  - коэффициент корреляции между прогностическими и фактическими изменениями;

$\lambda$  - отношение средней абсолютной прогностической изменчивости к фактической.

Анализ основных статико-синоптических оценок прогнозов показал, что учет орографии в численной модели для всех рассмотренных случаев улучшает качество прогнозов. Для западного процесса это улучшение максимальное и равняется 15%, а для области высокого давления является минимальным и равня-





ется 2%. Среднее улучшение этих оценок по всем типам синоптических ситуаций равняется 9%.

С целью исследования возникновения нелинейной вычислительной устойчивости в течение прогнозируемого времени в численной модели, учитывающей орографические эффекты, изучается сохранение величины  $ЭК = \frac{u^2 + v^2}{2}$  и  $\Omega^2 = \left( \frac{\partial v}{\partial t} - \frac{\partial u}{\partial y} + f \right)^2$ . Для всех контрольных экспериментов изменение  $\Omega^2$  составляло 1,9%, а ЭК - 5,4%. Полученные значения изменчивости величин  $\Omega^2$  и ЭК свидетельствуют о пригодности численной схемы для краткосрочного прогноза геопотенциала в горных условиях.

2. В данной работе изучается еще один из возможных подходов к учету влияния орографии Кавказа в численной модели по полным уравнениям гидродинамики, записанным в  $\rho$ -координатной системе. В качестве исходной выбрана полная система баротропной атмосферы, более корректно, чем в  $\sigma$ -системе координат учитывающая влияние орографии /4/:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} - fv + \frac{\partial \Phi'}{\partial x} + \frac{\partial q\gamma}{\partial x} = 0, \quad (10)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + fu + \frac{\partial \Phi'}{\partial y} + \frac{\partial q\gamma}{\partial y} = 0, \quad (11)$$

$$\frac{\partial \Phi'}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi'}{\partial x} + v \frac{\partial \Phi'}{\partial y} + R(T - T_s) \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0. \quad (12)$$

Здесь  $\Phi'$  - относительная геопотенциальная высота,  $\gamma$  описывает неровности подстилающей поверхности Земли.

Система уравнений (10)-(12) решается в области  $\bar{\Omega}$  с аналогичными (6)-(9) начальными и граничными условиями. Задача численно решается при помощи одного из вариантов ко-



нечно разной схемы Лакса-Вендроффа /8/.

Из сопоставления прогностических карт, полученных по исходным данным АТ 500 от 5.6.XI.81 (западный процесс), с фактическими картами выяснилось, что на прогностических картах, как с учетом влияния рельефа, так и без него, центр циклонического образования прогнозировался довольно точно. Однако фронт, связанный с этим циклоном, проходящим над Кавказом, прогнозировался, более точно при учете влияния орографии. Помимо этого, различие результатов расчетов с учетом и без учета орографии в европейской части связано в основном с изменением ориентации барических образований. Если траектория перемещения центра циклона с учетом влияния рельефа прогнозировалась довольно точно, то без учета влияния орографии она отклонялась юго-восточнее от фактического. По-видимому, изменению ориентации центра циклона способствовал учет влияния орографии в численной модели.

При прогнозе прохождения над Кавказом оклюдированных волновых возмущений с запада важно уловить конфигурацию изолиний геопотенциальных высот. Сопоставление прогностических карт с фактическими показало, что общая ситуация, как с учетом влияния орографии, так и без нее, прогнозировалась удачно. Однако учет орографических эффектов и численной модели способствовал улучшению ориентации оси ложбины и гребня антициклона.

Сравнение прогностических карт, полученных от 1-2.III.81 г. (восточный процесс), с фактическими картами показало, что барические образования и их перемещения без учета влияния рельефа прогнозировались хуже, чем с учетом орографии. Верти-



кальные разрез изобарических поверхностей выявили, что прогностические значения геопотенциальных высот в обоих случаях (как с учетом орографии, так и без ее учета) были преувеличены, однако система ложбин и гребней лучше прогнозировалась при помощи модели, учитывающей влияние орографии. Хотя следует отметить, что в районе Кавказских гор на прогностических картах (учитывающих орографию местности) наблюдалось нереальное барическое образование.

Для оценки качества прогнозов и сравнения результатов прогноза с учетом орографии и без нее вычислялись стандартные статико-синоптические показатели оправдываемости прогнозов. Анализ этих оценок показал, что учет влияния подстилающей поверхности Земли в численной модели максимально проявляется в прогнозе западного процесса, а минимально - при прогнозе области высокого давления над Кавказом. Среднее относительное улучшение оценок прогноза в западном процессе равняется 19%, а в прогнозе области высокого давления - 5%. Следует отметить, что во всех случаях учет влияния рельефа Кавказа (таблица 2) улучшает показатели успешности прогноза. Относительное улучшение оценок, осредненное по всем случаям, равняется 10%.

Таблица 2

Вариант	$\epsilon$	$\epsilon_1$	$\rho$	$\rho_x$	$\rho_y$	$\kappa$	$\lambda$
Без учета орографии	0,97	0,91	0,43	0,7	0,75	0,58	0,95
С учетом орографии	0,8	0,79	0,48	0,73	0,78	0,65	0,88

Нами была исследована возможность сохранения значений ЭК и  $\Omega^2$  в течение прогнозируемого времени в рамках настоящей модели, учитывающей орографию местности. Результаты численных экспериментов, показали, что изменение  $\Omega^2$  за 24 часа счета в среднем не превосходит 1,6%, а изменчивость ЭК за тот же промежуток времени равняется 4,3% (относительно, большое изменение величины ЭК можно приписать не проявлению нелинейной неустойчивости, а скорее всего ограниченности размеров области счета).

Значение изменчивости  $\Omega^2$  и ЭК позволяет сделать вывод о пригодности численной схемы для краткосрочного прогноза геопотенциальной высоты в горных условиях.

3. При разработке численных прогностических моделей над горными районами со сложной орографией необходимо детально учитывать все неоднородности подстилающей поверхности. При этом обычный крупномасштабный подход мало эффективен, так как на горизонтальных сетках с шагом в несколько сотен километров топография земли описывается неудовлетворительно. Поэтому, в задачах такого рода следует измельчать сетку так, чтобы шаг сетки равнялся нескольким десяткам километров. Однако измельчение шага пространственной сетки требует уменьшения шага по времени, что приводит к увеличению счетного времени на ЭВМ. Для сохранения счетного времени в разумных пределах необходимо уменьшать размеры области прогноза. Но в этом случае на боковых границах такого района затрудняется выбор физически оправданных граничных условий.

С целью преодоления таких трудностей, встречающихся в задачах регионального численного прогноза, используется ме-



тод вложенных сеток (метод телескопизации). Суть метода теле-  
скопизации (МТ) заключается в проведении вычислений по двум  
или нескольким вложенным друг в друга сеткам с уменьшающимися  
пространственно-временными шагами и использованием при решении  
задачи на густой сетке в качестве граничных условий информа-  
ции, полученной при крупно-сеточном фоновом расчете /2-3,  
6-7/.

В данной работе предлагается основанная на МТ численная  
модель прогноза геопотенциала на среднем уровне для террито-  
рии Кавказа.

Решение системы (10)-(12) будем искать в квадратных обла-  
стях с границами  $\Gamma_i$ ,  $i = \overline{1, 3}$ . Предположим, что части  
границы  $\Gamma_2$  и  $\Gamma_3$  параллельны  $\Gamma_1$ , южная и северная части  
границы  $\Gamma_1$  параллельны оси  $x$ , а западная и восточная -  
оси  $y$ ;

$$\overline{\Omega}_3 = \Omega_3 \cup \Gamma_3 = \overline{\Omega}_2 = \Omega_2 \cup \Gamma_2 = \overline{\Omega}_1 = \Omega_1 \cup \Gamma_1.$$

Система уравнений (10)-(12) в области  $\overline{\Omega}_i$  интегриру-  
ется с начальными (6) и граничными (7)-(9) условиями.

При переходе к разностной задаче в областях  $\overline{\Omega}_i$  зада-  
ются соответствующие сетки  $\overline{\omega}_i$ :

$$\omega_i = \omega_i + 2_i = \{(\alpha-1)h_i, (\beta-1)h_i\}$$

$$(\alpha = 1, 2, \dots, N; \beta = 1, 2, \dots, N; i = \overline{1, 3}),$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  - номера узлов, соответственно, по координатам  $x$  и  $y$ ,  $\overline{\omega}_i$  - количество внутренних, а  $2_i$  - количество граничных точек для сеток  $\overline{\omega}_i$ ; шаги сеток  $h_i$  удовлетворяют соотношению  $h_1/h_2 = h_2/h_3 = K$ , где  $K$  -



коэффициент вложения сеток.

Для устойчивости счета на густых сетках выполняются соотношения для временных шагов  $\Delta t / \Delta t_1 = \Delta t_1 / \Delta t_2 = \kappa$ .

Конкретные задачи с телескопизацией различаются способами постановок граничных условий и задания исходных полей во вложенных областях. В работе для областей  $\bar{\Omega}_2$  и  $\bar{\Omega}_3$  применяются идентичные способы задания граничных и начальных условий, поэтому для краткости сформулируем постановку задачи только для области  $\bar{\Omega}_2$ .

Решение задачи на сетке  $\bar{\omega}_2$  осуществляется с помощью переменных по времени граничных условий. Для задания краевых условий в точках  $\lambda_2$  на каждом временном шаге используется информация, полученная от крупносеточного расчета в опорных точках  $\omega_1 \Pi \Gamma_1$  сетки  $\bar{\omega}_1$ . Граничные значения искомых функций на промежуточных шагах  $\Delta t / \kappa$  и узлах  $h_1 / \kappa$  сетки  $\bar{\omega}_2$  не имеющих адекватных значений на редкой сетке  $\bar{\omega}_1$ , находят-ся с помощью линейной интерполяции.

При расчете с двусторонним взаимодействием решений на разных сетках для вычисления начальных данных перед каждым новым шагом по времени в крупносеточном расчете употребляется оператор Шумана /6/.

Для выявления вклада детализации орографий при вычислениях на густых сетках были проведены численные эксперименты с использованием методики вложенных сеток на основе реальных исходных данных АТ 500 от 5-7.XI.81 г. Анализ прогностических карт и их сравнение с фактическими картами показали, что барическое образование и его перемещение лучше прогнозируется на измельченной сетке  $\bar{\omega}_2$ . Однако следовало выяснить, какой



вклад при этом принадлежит применению метода телескопизации и какой - детализации горных массивов Кавказа. С этой целью был проведен численный эксперимент, отличающийся от предыдущего лишь тем, что при вычислениях на сетке  $\bar{\omega}_2$  значения функции  $\lambda(x, y)$  были те же самые, что и на сетке  $\bar{\omega}_1$ .

Результаты счета показали, что при вычислениях на сетке без детализированного учета влияния орографии общая картина прогнозировалась довольно точно, но перемещение центра циклона предвычислялось менее удачно - уменьшалась как интенсивность перемещения, так и точность направления движения. По сравнению с фактическим перемещением центр циклона отклонялся к юго-западу.

Помимо этого, для сравнения численных экспериментов, выполненных на сетке  $\bar{\omega}_2$ , вычислялись стандартные статико-синоптические оценки. Анализ показал, что вычисления на густой сетке с детализацией орографии дают лучшие результаты.

Для проведения следующего эксперимента используется густая сетка  $\bar{\omega}_3$ . Целью этого эксперимента является выявление новых особенностей в решении на  $\bar{\omega}_3$ , проявляющихся в силу эффекта конкретизации орографии Кавказа. Вычисления на сетках  $\bar{\omega}_i$  ( $i=1,3$ ) выполняются обычным МТ. Отметим, что для преодоления орографических вычислительных высокочастотных возмущений, имеющих место при вычислениях, рельеф Кавказа несколько сглаживался.

Из сопоставления результатов прогноза, полученных на сетках  $\bar{\omega}_2$  и  $\bar{\omega}_3$ , выяснилось, что почти никаких новых существенных особенностей при прогнозе на  $\bar{\omega}_3$  не наблюдалось. Это объясняется тем, что для такого малого региона, каким

041936330  
2025090933

является область  $\Omega_3$ , граничные условия обуславливают в основном динамику крупномасштабных синоптических процессов, а для крупномасштабных движений высокая детализация топографии уже не является столь существенной.

Далее исследовались результаты численных экспериментов, проведенных по методике телескопизации с использованием результатов счета на густых сетках. Сравнение прогностических карт, полученных при одностороннем и двустороннем взаимодействии, показали, что при двустороннем взаимодействии барические образования в последнем случае заметно активизировались, и перемещение центра циклона предвычислялось более точно. Помимо этого, был апробирован комбинированный вариант интегрирования по времени /3/, а именно, в начальной стадии прогноза (в период приспособления решения на разных сетках). Вычисление на вложенных сетках осуществлялось при одностороннем взаимодействии, далее же подключался "механизм" обратного влияния. В результате использования комбинированного варианта прогноз для некоторых случаев был гораздо успешнее, чем при двустороннем взаимодействии решений на разных сетках.

4. В настоящей работе в основном решается задача регионального краткосрочного прогноза поля геопотенциала на среднем уровне с учетом влияния топографии Кавказа. При этом исходная система прогностических уравнений берется в двух вариантах: в первом случае - в  $\sigma$ -системе координат и во втором случае - в изобарической системе координат. В таблицах I и 2 приведены результаты прогнозов для этих вариантов, соответственно. Из анализа этих таблиц видно, что учет топографических эффектов в изобарической системе улучшает



показатели оценок ( за исключением  $\rho$  ) по сравнению с  $\epsilon$ -  
системой координат. Среднее относительное улучшение про-  
гнозов, вычисляемое по выражениям

$$\frac{a_1 - a_2}{a_1} 100\%, \quad \frac{b_2 - b_1}{b_1} 100\%$$

(индексы при  $a$  и  $b$  указывают на номер таблицы,  
 $a = \{\epsilon, \epsilon_1\}$ ,  $b = \{\rho, \rho_x, \rho_y, \kappa\}$ ), для  $\epsilon, \epsilon_1, \rho_x, \rho_y$  и  $\kappa$   
соответственно, равняются 3,6%, 1,2%, 12,3%, 6,8%, 6,5%.  
Среднее улучшение для всех этих оценок равняется 6%. Ухудше-  
ние для значения  $\rho$  сравнительно небольшое и равняется  
2%.

Помимо этого сравнение прогностических карт показало, что  
барические образования и их перемещения лучше прогнозируются  
в изобарической системе координат.

В заключение отметим, что разработанная нами оперативная  
схема краткосрочного прогноза поля геопотенциала с учетом  
влияния орोगрафии в настоящее время проходит оперативно-про-  
изводственное испытание в Гидрометцентре им. В.П.Ломоносова ГССР.  
ГССР. По предварительным результатам для оценок  $\epsilon$  и  $\rho$   
среднее относительное улучшение прогнозов по нашей методике  
равняется  $8 + 10\%$ . Этот результат лучше, чем результат, полу-  
ченный по схеме САНИИ-ГМЦ СССР, используемой в ежедневной  
оперативной практике.

Поступила 9.IX.1986

Кафедра  
геофизики

Литература

1. Т.П.Давиташвили. Тр. ИИМ ТГУ, 1983, т.13, 308-321.
2. Т.П.Давиташвили. Телескопированный численный прогноз геопотенциала с учетом орографии. Сборник докладов Республиканской конференции молодых ученых и специалистов по актуальным проблемам прикладной математики и механики, Тбилиси, 1983, 30-37.
3. Т.П.Давиташвили. Тр.ИИМ ТГУ, 1985, т.15, 94-112.
4. Т.П.Давиташвили. Тр.ИИМ ТГУ, 1985, т.15, 74-93.
5. Т.П.Давиташвили, З.В.Хведелидзе. Сообщения АН ГССР, 1978, № 3, 581-584.
6. А.И.Дегтярев. Метеорология и гидрология, 1980, № 11, 27-33.
7. В.М.Калышников. Метеорология и гидрология, 1981, № 2, 18-27.
8. Д.Я.Прессман. Тр.ММЦ, 1965, вып. 6, 33-40.
9. Дж.Г.Чарни. Интегрирование примитивных уравнений и уравнений баланса. - В кн.: Труды Токийского симпозиума по численным методам прогноза погоды, Л., Гидрометеоздат, 1967.

დავითაშვილი, ზ. ხვედელიძე

მონაცემების დამუშავების მეთოდების შესახებ მათემატიკური მოდელირების  
სამსახურის მიერ შედგენილი მონაცემების დამუშავების მეთოდების შესახებ  
დასაბუთებული მოხსენიება

რეზიუმე

კონკრეტულად ამოცანის სრულ განხილვაში სინთეზურად მონაცემ-  
ების დამუშავების მეთოდების შესახებ მოხსენიება მოხდება, ასევე P-საკორ-  
დინაციის სინთეზურად განხილვაში, რეცხვის მეთოდების ამოხსნილობა  
მონაცემების მატრიცის მიხედვით მონაცემების ამოცანა კავისების ფუნ-  
ქციონირების, შეიქმნა მონაცემების დამუშავების კავისების ამოცანა  
და მათი ამოცანების მათემატიკური სინთეზური სინთეზების ამოცანა.

T. Davitashvili, Z. Khvedelidze

THE INFLUENCE OF OROGRAPHY ON THE ATMOSPHERE  
MID-LEVEL IN REGIONAL NUMERICAL PREDICTION  
MODELS OF THE GEOPOTENTIAL

Summary

In  $\sigma$ - and p - coordinate systems the problem of the mid-level geopo-  
tential short-term prediction is posed and solved by numerical methods for  
the Caucasus area. The influence of orography on the four typical synoptic  
situations characteristic of the Caucasus area is studied.



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
 государственного университета  
 თბილისის შტაბის ნიშნის ორდენის მტკიცებაზე საბჭოებში  
 უნივერსიტეტის შტაბში

271, 1987

ВЗАИМОСВЯЗЬ МЕЖДУ ОТНОСИТЕЛЬНЫМИ ИЗМЕНЕНИЯМИ ОБЪЕМА  
 И ЭНТРОПИИ ПРИ ПЛАВЛЕНИИ МЕТАЛЛОВ  
 Д.Ш.Цагарейшвили, Т.Д.Абашидзе

В настоящее время для многих металлов отсутствуют экспериментальные данные по изменению объема при их плавлении. Однако сведения по энтропиям плавления менее ограничены. В данной работе мы задались целью получить уравнение, позволяющее рассчитать значения изменения объема при плавлении металлов по величинам их энтропии плавления и, тем самым, оценить плотность металлов в жидком состоянии.

Для установления взаимосвязи между относительными изменениями объема и энтропии при плавлении металлов воспользуемся описанным в /1/ квазитермодинамическим методом, сущность которого заключается в следующем: при помощи приведенных в /2,3/ вспомогательных таблиц определяется частное производное, выражающее искомую связь между данными термодинамическими величинами в дифференциальной форме при постоянном давлении для твердой фазы; так как изменение термодинамических функций при плавлении кристаллов обычно составляет незначительную величину, то в найденном уравнении дифференциала можно заменить конечными разностями, вследствие чего получаем искомую взаимосвязь между рассматриваемыми свойствами кристал-



ла в интегральной форме.

Сконструируем частную производную от объема  $V$  по энтропии  $S$  при постоянном давлении  $P$  с использованием метода Брайджмена и вспомогательной таблицы, приведенной в /2/:

$$\left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P = \frac{\alpha VT}{C_P}, \quad (I)$$

где  $\alpha$  - термический коэффициент объемного расширения,  $T$  - температура, К;  $C_P$  - изобарная теплоемкость. Формула (I) является точным термодинамическим соотношением.

Ограничимся рассмотрением металлов, объем которых возрастает при плавлении. Запишем уравнение (I) для твердой фазы при температуре  $T = T_m$ , где  $T_m$  - температура плавления металла, и заменим конечными разностями дифференциалы в его левой части, вследствие чего будем иметь

$$\frac{V_L - V_m}{S_L - S_m} = \frac{\Delta V_f}{\Delta S_f} = \frac{\alpha_m V_m T_m}{C_{Pm}}, \quad (2)$$

где символы термодинамических величин для твердой фазы имеют нижний индекс "m", а для жидкой фазы - индекс "L".

Воспользуемся введенными в /3,4/ следующими квазитермодинамическими соотношениями:

$$\gamma_m \alpha_m T_m = \frac{1}{4}, \quad (3)$$

$$\frac{\gamma_m C_{Pm}}{S_m} = \frac{3}{4}, \quad (4)$$

где  $\gamma_m$  - значение параметра Грюнайзена твердой фазы при  $T = T_m$ .



Комбинируя уравнения (2), (3) и (4), устанавливаем связь между относительными изменениями объема  $\Delta V_f / V_m$  и энтропии  $\Delta S_f / S_m$  металлов в виде соотношения

$$\eta = \frac{\Delta V_f / V_m}{\Delta S_f / S_m} = \frac{1}{3} \quad (5)$$

В таблице приведены результаты расчета константы  $\eta$  для некоторых металлов. При этом значения  $S_m$  для рассмотренных металлов определялись на основании стандартных энтропий  $S_{298}$ , величин  $S_m - S_{298}$  и функций  $C_p = f(T)$ , приведенных в /5-9/.

Таблица

Результаты расчета константы  $\eta$  по соотношению (5) для некоторых металлов

Металл	$\Delta S_f$	$S_m$	$\Delta S_f / S_m$	$\Delta V_f / V_m$	$\eta$	$\Delta$ %
	(9) кал/моль·К					
Li	1,58	9,43	0,168	0,028 /I0/	0,167	-99,4
Na	1,67	13,78	0,121	0,026 /I0/	0,215	-54,9
K	1,65	16,24	0,101	0,029 /I0/	0,287	-15,7
Rb	1,73	18,56	0,093	0,027 / I0/	0,290	-14,8
Cs	1,72	20,26	0,085	0,027 /I0/	0,318	-4,7
Al	2,80	14,27	0,196	0,060 /II/	0,306	-8,8
Cu	2,30	17,70	0,130	0,042 /II/	0,323	-3,1
Ag	2,31	19,53	0,118	0,038 /II/	0,322	-3,4
Au	2,21	21,09	0,105	0,051 /II/	0,489	+31,9
Ni	2,42	20,54	0,095	0,037 /II/	0,389	+14,4

I	2	3	4	5	6	
Pt	2,30	23,35	0,099	0,038 /II/	0,384	+13,3
Rh	2,30	22,58	0,102	0,039 /II/	0,382	+12,8
Pb	1,91	20,14	0,095	0,035 /II/	0,368	+9,5
Fe	1,82	22,04	0,083	0,032 /II/	0,366	+13,7
Tl	1,69	20,00	0,085	0,023 /II/	0,271	-22,9
Ba	2,25	11,89	0,189	0,070 /I2/	0,370	+10,0
Mg	2,32	15,35	0,151	0,041 /II/	0,272	-22,4
Zn	2,55	15,40	0,166	0,042 /II/	0,253	-31,6
Cd	2,49	16,91	0,147	0,047 /I3/	0,320	-4,1
In	1,82	16,29	0,112	0,027 /I3/	0,241	-38,2

В этой таблице приведены также величины относительных расхождений ( $\Delta$ , %) экспериментальных значений константы  $\eta$  от теоретически выведенной величины, равной 0,333 согласно формулы (5). Данные таблицы показывают, что для большинства рассмотренных металлов значения  $\Delta$  колеблются в допустимых пределах. При этом для ряда металлов (Cs, Cu, Al, Ag, Pb, Ba, Cd) согласие между теоретической и экспериментальными величинами  $\eta$  следует рассматривать как весьма хорошее. Значения  $\Delta$  для Li, Na, Au и In достигают значительных величин, что, по-видимому, обусловлено искажением экспериментальных величин  $\eta$  этих металлов, ошибками измерения параметров формулы (5), особенно величин  $\Delta V_f$ . Таким образом, можно заключить, что формула (5) с удовлетворительной точностью описывает существующие к настоящему времени экспериментальные данные по константе  $\eta$ . Сказанное дает основание сформулировать следующее правило: при плавлении



нии металлов относительное изменение объема приблизительно равно одной трети относительного изменения энтропии.

Определяя  $S_m$  из (4) и подставляя полученное выражение в (5), будем иметь

$$\Delta V_f / V_m = \Delta S_m / 4 \gamma_m C_{pm} \quad (6)$$

Если в выражении (6) для всех металлов принять  $V_m = 2,0$  /3/, а для  $C_{pm}$  брать усредненное значение, равное 7,5 кал/г-атом·К /3/, то получим соотношение, которое эмпирическим путем было найдено ранее Кубашевским /14/

$$\Delta S_f / (\Delta V_f / V_m) = 60 \text{ кал/г-атом·К} \quad (7)$$

Следовательно, соотношение (7) следует рассматривать как частный случай более общего выражения (6).

Поступила 20.I.1986

Институт металлургии  
им. 50-летия СССР  
АН СССР

#### Литература

1. Д.Ш.Цагарейшвили. Теплофизика высоких температур, 19, № 1, 75, 1981.
2. М.Х.Карапетьянц. Химическая термодинамика. Госхимиздат, М.-Л., 1953.
3. Д.Ш.Цагарейшвили. Методы расчета термических и упругих свойств кристаллических неорганических веществ, "Мецинереба", Тбилиси, 1977.
4. Д.Ш.Цагарейшвили, Т.Д.Абашидзе. Труды Тбилисского государственного университета, Физика, т.213, 57, 1980.





5. K.K.Kelley. U.S.Bur. Mines, Bull. 584, 1960.
6. K.K.Kelley, E.G.King. U.S.Bur. Mines, Bull. 592, 1961
7. O.Kubaschewski, E.L.Evans, C.B.Alcock. Metallurgical Thermochemistry, London, 1967.
8. Г.Б.Наумов, Б.Н.Рыженко, И.Л.Ходаковский. Справочник термодинамических величин. Атомиздат, М., 1971.
9. В.А.Киреев. Методы практических расчетов в термодинамике химических реакций, "Химия", М., 1975.
10. R.Vilcu, C.Misdolea. J.Chem. Phys. 49, N7, 3179, 1968.
11. В.Н.Жарков, В.А.Калинин. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах, "Наука", М., 1968.
12. П.П.Арсентьев, Л.А.Коледов. Металлические расплавы и их свойства, "Металлургия", М., 1976.
13. А.Уббелоде. Плавление и кристаллическая структура, "Мир", М., 1969.
14. O.Kubaschewski. Trans. Faraday Soc., 45, 931, 1949.

რ. ცაგარეიშვილი, თ. აბაშიძე

მთავრობისა და ენერჯეტიკის დარგებისათვის ცვლილებების

აღრიცხვითი ციფრების შედგენისას

რეზიუმე

კვანთაქარის მონიტორინგის მიზნების მიყრდნობით შედგენილია, რომელიც აკავშირებს მთავრობისა და ენერჯეტიკის დარგების ცვლილებებს ციფრების რეზიუმისას. ნაჩვენებია, რომ მთავრობის დარგების ცვლილება ციფრების რეზიუმისას დაახლოებით შეადგენს ენერჯეტიკის დარგების ცვლილების შესაძლებლობას,



D. Teugareishvili, T. Abashidze

# INTERCONNECTION BETWEEN RELATIVE VARIATIONS OF VOLUME AND ENTROPY DURING METAL SMELTING

## Summary

A formula relating the relative changes of volume and entropy during smelting of metals has been obtained by the quasithermodynamic method. It is shown that relative change of volume constitutes approximately a third part of the relative change of the entropy.



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
государственного университета

საბჭოთაო საზოგადოებრივი მეცნიერების აკადემიის  
თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი  
271, 1987

РАССЕЯНИЕ ПЛОСКИХ ВОЛН НА МНОГОЭЛЕМЕНТНЫХ РЕШЕТКАХ  
ИЗ КОАКСИАЛЬНЫХ ЦИЛИНДРОВ

Ф.Г.Богданов, Г.Ш.Кеваняшвили, М.Н.Чихладзе

Дифракционные решетки различного профиля широко приме-  
няются в различных областях физики и техники /1/. Наряду с  
одноэлементными решетками /2-4/ немалый интерес представля-  
ют многоэлементные решетки /5/, поскольку усложнение геомет-  
рии решетки позволяет лучше управлять ее дифракционными ха-  
рактеристиками.

В настоящей работе предложена строгая теория многоэле-  
ментных решеток из коаксиальных диэлектрических цилиндров, и,  
по-видимому, впервые исследуются некоторые численные результа-  
ты для двухэлементных решеток.

1. Постановка задачи. Рассмотрим дифракцию плоской элек-  
тромагнитной волны на  $N$ -элементной периодической решет-  
ке из бесконечно длинных коаксиальных диэлектрических цилин-  
дров различного радиуса, находящихся на произвольном расстоя-  
нии друг от друга (рис. 1).

Обозначим через  $d$  период решетки,  $\nu$  - номер группы  
цилиндров,  $n$  - номер цилиндра в группе,  $a_n$  и  $b_n$  - радиусы  
внешнего и внутреннего заполнения,  $\epsilon_n, \mu_n$  и  $\tilde{\epsilon}_n, \tilde{\mu}_n$  -  
их диэлектрические и магнитные проницаемости,  $r_{n, \nu}$  - рас-



стояние между  $\mu$ -ым и  $\mu'$ -ым цилиндрами в группе.

Предположим, что на исследуемую решетку наклонно (под углом  $\theta$  к оси  $x$ ) падает плоская E-поляризованная электромагнитная волна с составляющей

$$E_z = e^{ik(x \cos \theta + y \sin \theta)} \quad (1)$$

$$(\kappa = \omega \sqrt{\epsilon_0 \mu_0})$$

Поставим задачу о нахождении рассеянного поля в пространстве.

Поле рассеянной волны будем искать в виде

$$E_{z1} = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{\mu=1}^N T_m^{(\nu)} H_m^{(2)}(\kappa r_{\nu\mu}) e^{ik(\nu d + \rho_{\nu\mu}) \sin \theta + im \varphi_{\nu\mu}} \quad (2)$$

$$(\rho_{\nu\mu} \geq a_{\mu}),$$

$$E_{z2}^{(\nu, \mu)} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [C_m^{(\nu)} Y_m(\kappa r_{\nu\mu}) +$$

$$+ D_m^{(\nu)} N_m(\kappa r_{\nu\mu})] e^{ik(\nu d + \rho_{\nu\mu}) \sin \theta + im \varphi_{\nu\mu}} \quad (3)$$

$$(\rho_{\nu\mu} \leq a_{\mu} \leq d_{\mu}),$$

$$E_{z3}^{(\nu, \mu)} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} M_m^{(\nu)} J_m(\tilde{\kappa} r_{\nu\mu}) e^{ik(\nu d + \rho_{\nu\mu}) \sin \theta} \quad (4)$$

$$(0 \leq \rho_{\nu\mu} \leq \rho_{\mu}),$$

где  $\rho_{\nu\mu}$ ,  $\varphi_{\nu\mu}$  - локальные цилиндрические координаты точки наблюдения  $M$  в системе координат, связанной с  $\nu$ ,  $\mu$ -ым цилиндром,  $\kappa_{\mu} = \omega \sqrt{\epsilon_{\mu} \mu_{\mu}}$  и  $\tilde{\kappa}_{\mu} = \omega \sqrt{\tilde{\epsilon}_{\mu} \tilde{\mu}_{\mu}}$  - волновые числа внешнего и внутреннего заполнения  $\mu$ -го цилиндра.

Неизвестные коэффициенты  $T_m^{(\nu)}$ ,  $C_m^{(\nu)}$ ,  $D_m^{(\nu)}$  и  $M_m^{(\nu)}$  мультипольного спектра рассеянной волны подлежат определению.



2. Система функциональных уравнений. Для определения иско-  
мых неизвестных используем условия сшивания внутри цилинд-  
ров

$$\begin{cases} E_{z2}^{(\nu, \mu)} = E_{z3}^{(\nu, \mu)} \\ \frac{1}{i\omega\mu_\mu} \frac{\partial}{\partial r_\mu} E_{z2}^{(\nu, \mu)} = \frac{1}{i\omega\tilde{\mu}_\mu} \frac{\partial}{\partial r_\mu} E_{z3}^{(\nu, \mu)} \end{cases} \quad (\text{5a})$$

( $r_\mu = b_\mu, 0 \leq \varphi_\mu \leq 2\pi$ )  
( $\nu=0, \mu=1, 2, \dots, N$ )

и условия непрерывности на поверхностях  $\nu$ -ой группы ци-  
линдров

$$\begin{cases} E_z + E_{z1} = E_{z2}^{(\nu, \mu)} \\ \frac{1}{i\omega\mu_0} \frac{\partial}{\partial r_\mu} (E_z + E_{z1}) = \frac{1}{i\omega\mu_\mu} \frac{\partial}{\partial r_\mu} E_{z2}^{(\nu, \mu)} \end{cases} \quad (\text{5б})$$

( $r_\mu = a_\mu, 0 \leq \varphi_\mu \leq 2\pi$ )  
( $\nu=0, \mu=1, 2, \dots, N$ )

Выполняя граничное условие (5а), получаем

$$D_m^{(\nu)} = \xi_m(\beta_\mu, \tilde{\beta}_\mu) C_m^{(\nu)}, \quad (6)$$

где

$$\xi_m(\beta_\mu, \tilde{\beta}_\mu) = \frac{\tilde{\omega}_\mu / \omega_\mu Y_m'(\beta_\mu) Y_m(\tilde{\beta}_\mu) - Y_m(\beta_\mu) Y_m'(\tilde{\beta}_\mu)}{N_m(\beta_\mu) Y_m'(\tilde{\beta}_\mu) - \tilde{\omega}_\mu / \omega_\mu N_m'(\beta_\mu) Y_m(\tilde{\beta}_\mu)}, \quad (7)$$

$\omega_\mu = \sqrt{\mu_\mu / \epsilon_\mu}$  и  $\tilde{\omega}_\mu = \sqrt{\tilde{\mu}_\mu / \epsilon_\mu}$  - волновые сопротивления диэлектри-  
ческих заполнений, а штрих ( ' ) означает производную по

$\beta_\mu = k_\mu b_\mu$  и  $\tilde{\beta}_\mu = \tilde{k}_\mu b_\mu$  соответственно.

Удовлетворяя граничные условия (5б) на поверхностях цент-



ральной группы цилиндров ( $\nu = 0$ ) и учитывая теорему сложения для цилиндрических функций [6]

$$H_m^{(2)}(k\gamma_{pJ}) e^{im\varphi_{pJ}} = \begin{cases} \sum_{s=-\infty}^{\infty} i^{m-s} H_{m-s}^{(1)}(k\nu d + \delta_{pJ}) J_s(k\alpha_J) e^{is\varphi_J}, & \nu < 0 \\ \sum_{s=-\infty}^{\infty} (-i)^{m-s} H_{m-s}^{(2)}(k\nu d + \delta_{pJ}) J_s(k\alpha_J) e^{is\varphi_J}, & \nu > 0 \end{cases} \quad (8)$$

$$(\delta_{pJ} = k\ell_{pJ} \text{ при } p < J, \delta_{pJ} = -k\ell_{pJ} \text{ при } p > J),$$

приходим к системе функциональных уравнений относительно искомых неизвестных (0-ые индексы всюду опускаем)

$$f(\alpha_J, \varphi_J, \gamma_{pJ}, \theta) + \sum_{m=-\infty}^{\infty} X_m^{(J)} F_m^{(J)}(\alpha_J, \varphi_J, \theta) + \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq J}}^N \sum_{m=-\infty}^{\infty} X_m^{(p)} \tilde{F}_m^{(p)}(\alpha_J, \varphi_J, \gamma_{pJ}, \theta) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m^{(J)} \psi_m^{(J)}(\tilde{\alpha}_J, \beta_J, \tilde{\beta}_J) e^{i\gamma_{pJ} \sin \theta + im\varphi_J} \quad (9)$$

$$f'(\alpha_J, \varphi_J, \gamma_{pJ}, \theta) + \sum_{m=-\infty}^{\infty} X_m^{(J)} F_m^{(J)}(\alpha_J, \varphi_J, \theta) + \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq J}}^N \sum_{m=-\infty}^{\infty} X_m^{(p)} \tilde{F}_m^{(p)}(\alpha_J, \varphi_J, \gamma_{pJ}, \theta) = \omega_0 / \omega_J \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m^{(J)} \psi_m^{(J)}(\tilde{\alpha}_J, \beta_J, \tilde{\beta}_J) e^{i\gamma_{pJ} \sin \theta + im\varphi_J}$$

где  $(J=1, 2, \dots, N; 0 \leq \varphi_J \leq 2\pi)$ ,

$$\psi_m^{(J)}(\tilde{\alpha}_J, \beta_J, \tilde{\beta}_J) = J_m(\alpha_J) + E_m(\beta_J, \tilde{\beta}_J) N_m(\tilde{\alpha}_J),$$

$$f(\alpha_J, \varphi_J, \gamma_{pJ}, \theta) = e^{i\alpha_J \cos(\varphi_J - \theta)} e^{i\gamma_{pJ} \sin \theta}$$

$$F_m^{(j)}(\alpha_j, \varphi_j, \theta) = \left[ H_m^{(2)}(\alpha_j) e^{im\varphi_j} + \sum_{s=-\infty}^{\infty} J_s(\alpha_j) Z_{m-s}^{(j)}(\beta, \theta, 0) e^{is\varphi_j} \right] e^{i\varphi_j \sin\theta},$$

$$F_m^{(p)}(\alpha_j, \varphi_j, \gamma_{pj}, \theta) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} J_s(\alpha_j) Z_{m-s}^{(p)}(\beta, \theta, \gamma_{pj}) e^{is\varphi_j} e^{i\varphi_j \sin\theta},$$

$$Z_{m-s}^{(j)}(\beta, \theta, 0) = i^{m-s} \sum_{\nu=1}^{\infty} H_{m-s}^{(2)}(\nu\beta) \left[ e^{-i\nu\beta \sin\theta} + (-1)^{m-s} e^{i\nu\beta \sin\theta} \right],$$

$$Z_{m-s}^{(p)}(\beta, \theta, \gamma_{pj}) = i^{m-s} H_{m-s}^{(2)}(\gamma_{pj}) e^{-i\gamma_{pj} \sin\theta} + i^{m-s} \sum_{\nu=1}^{\infty} \left[ (-1)^{m-s} H_{m-s}^{(2)}(\nu\beta - \gamma_{pj}) e^{i(\nu\beta - \gamma_{pj}) \sin\theta} + H_{m-s}^{(2)}(\nu\beta + \gamma_{pj}) e^{i(\nu\beta + \gamma_{pj}) \sin\theta} \right] \quad (p < j),$$

$$Z_{m-s}^{(p)}(\beta, \theta, \gamma_{pj}) = i^{s-m} H_{m-s}^{(2)}(\gamma_{pj}) e^{i\gamma_{pj} \sin\theta} + i^{m-s} \sum_{\nu=1}^{\infty} \left[ (-1)^{m-s} H_{m-s}^{(2)}(\nu\beta + \gamma_{pj}) e^{i(\nu\beta + \gamma_{pj}) \sin\theta} + H_{m-s}^{(2)}(\nu\beta - \gamma_{pj}) e^{-i(\nu\beta - \gamma_{pj}) \sin\theta} \right] \quad (p > j).$$

$$(\omega_0 = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0}, \quad \alpha_j = \kappa \alpha_{j\kappa}, \quad \tilde{\alpha}_j = \kappa_j \alpha_j, \quad \gamma_{j\kappa} = \kappa \rho_{j\kappa}),$$



а штрих (') означает производную по  $\alpha_n$  и  $\tilde{\alpha}_n$  соответственно.

3. Ключевая система алгебраических уравнений. Умножая обе части системы (9) на  $\frac{1}{2\pi} e^{-in\theta} d\theta$  и интегрируя от 0 до  $2\pi$ , получаем бесконечную систему алгебраических уравнений относительно неизвестных  $I_m^{(n)}$  и  $C_m^{(n)}$ :

$$\begin{aligned}
 & i^n y_n(\alpha_n) e^{-in\theta} + I_n^{(n)} H_n^{(2)}(\alpha_n) + \\
 & + \sum_{p=1}^N \sum_{m=-\infty}^{\infty} I_m^{(p)} y_n(\alpha_n) Z_{m-n}^{(p)}(\beta, \theta, \gamma_{p,n}) = \\
 & = C_n^{(n)} \psi_n^{(n)}(\tilde{\alpha}_n, \beta_n, \tilde{\beta}_n),
 \end{aligned}$$

(10)

$$\begin{aligned}
 & i^n y_n'(\alpha_n) e^{-in\theta} + I_n^{(n)} H_n^{(2)'}(\alpha_n) + \\
 & + \sum_{p=1}^N \sum_{m=-\infty}^{\infty} I_m^{(p)} y_n'(\alpha_n) Z_{m-n}^{(p)}(\beta, \theta, \gamma_{p,n}) = \\
 & = \omega_0/\omega_n C_n^{(n)} \psi_n^{(n)'}(\tilde{\alpha}_n, \beta_n, \tilde{\beta}_n)
 \end{aligned}$$

( $n=1, 2, \dots, N$ ;  $n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ).



Используя формулу для Вронскиана цилиндрических функций /6/, из системы (I0) находим связь между коэффициентами  $C_n^{(j)}$  и  $I_n^{(j)}$ :

$$C_n^{(j)} = \eta_n(\alpha_j, \tilde{\alpha}_j, \beta_j, \tilde{\beta}_j) I_n^{(j)}, \quad (II)$$

где

$$\eta_n(\alpha_j, \tilde{\alpha}_j, \beta_j, \tilde{\beta}_j) =$$

$$2i.$$

$$= \frac{\alpha_j [Y_n'(\alpha_j) \psi_n^{(j)}(\tilde{\alpha}_j, \beta_j, \tilde{\beta}_j) - \omega_0 / \omega_j Y_n(\alpha_j) \psi_n^{(j)}(\tilde{\alpha}_j, \beta_j, \tilde{\beta}_j)]}{\omega_j}$$

Исключая неизвестные  $C_n^{(j)}$  из системы (I0) с помощью (II), приходим к следующей бесконечной системе линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных  $I_n^{(j)}$

$$I_n^{(j)} = a_n^{(j)} + \sum_{p=1}^N \sum_{\substack{m=-\infty \\ m \neq n}}^{\infty} I_m^{(p)} Q_{nm}^{(p)} \quad (I2)$$

$$(j=1, 2, \dots, N; n=0, \pm 1, \pm 2, \dots).$$

где

$$a_n^{(j)} = i^n X_n^{(j)} e^{-in\theta}, \quad Q_{nm}^{(p)} = -X_n^{(j)} Z_{m-n}^{(p)}(\beta, \theta, \gamma_{pm}).$$

$$\chi_n^{(\mu)} =$$

$$= \frac{J_n(\alpha_n)}{H_n^{(2)}(\alpha_n) + J_n(\alpha_n) Z_0(\beta, \theta, 0) - \gamma_n(\alpha_n, \tilde{\alpha}_n, \beta_n, \tilde{\beta}_n) \Psi_n^{(\mu)}(\alpha_n, \beta_n, \tilde{\beta}_n)}$$

Система (12) вместе с соотношениями (6), (11) и формулой для  $M_m^{(\mu)}$ , следующей из (5а)

$$M_m^{(\mu)} = [C_m^{(\mu)} J_m(\beta_n) + D_m^{(\mu)} N_m(\beta_n)] / J_m(\tilde{\beta}_n), \quad (13)$$

полностью определяет мультипольный спектр рассеянного поля.

4. Дифракционный спектр рассеянного поля. Поскольку решетка периодическая, рассеянное поле является периодической функцией координаты  $y$ , что позволяет наряду с (2) ввести представление /3/

$$E_z = \sum_{p=-\infty}^{\infty} H_p^+ e^{ig_p y + ih_p x} \quad (x < -a_n \text{ max}), \quad (14)$$

$$E_z = \sum_{p=-\infty}^{\infty} H_p^- e^{ig_p y - ih_p x} \quad (x \geq a_n \text{ max}),$$

где

$$g_p = \frac{2\pi}{d} p + k \sin \theta, \quad h_p = \sqrt{k^2 - g_p^2}.$$

Формулы (14) представляют разложения рассеянного поля в спектр по пространственным (дифракционным) гармоникам. Следуя /2/, получаем выражения, связывающие коэффициенты  $H_p^{\pm}$  и  $J_m^{(\mu)}$

$$H_p^{\pm} = \frac{1}{\pi \sqrt{D^2 - (p + D \sin \theta)^2}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^{z_m} J_m^{(\mu)} e^{\pm im \varphi_p - i 2\pi p y / d}, \quad (15)$$

где

$$\varphi_p = \arctg \frac{\rho + D \sin \theta}{\sqrt{D^2 - (\rho + D \sin \theta)^2}}$$

( $D = d/\lambda$ ).

5. Численные результаты. Система алгебраических уравнений (12) является системой фредгольмового типа и поэтому допускает решение методом усечения (редукции) при произвольных физических параметрах задачи. Решение для Н-поляризации падающей волны получается из решения для Е-поляризации, если произвести во всех формулах замену  $E \rightleftharpoons H$ ,  $\epsilon_0 \rightleftharpoons -\mu_0$ ,  $E \rightleftharpoons -H$ ,  $\tilde{E} \rightleftharpoons -\tilde{H}$ ,  $\frac{\tilde{\omega}_H}{\omega_H} \rightleftharpoons \frac{\omega_H}{\tilde{\omega}_H}$ ,  $\frac{\omega_0}{\omega_H} \rightleftharpoons \frac{\omega_H}{\omega_0}$ .

Система (12) исследовалась на ЭВМ (БЭСМ-6) при различных конфигурациях периода решетки в широком диапазоне изменения параметров решетки  $D = d/\lambda$ ;  $\epsilon_{rH} = \epsilon_H/\epsilon_0$ ,  $\tilde{\epsilon}_{rH} = \tilde{\epsilon}_H/\epsilon_0$ ,  $S_H = 2a_H/d$ ,  $b_H/a_H$  и  $\theta$ .

Некоторые результаты численного анализа представлены на рис. 3, 4, 6 и 7, которые вычислены для частных случаев рассматриваемой задачи. Рис. 3 и 4 соответствуют двухэлементной решетке из коаксиальных и однородных диэлектрических цилиндров (рис. 2), а рис. 6 и 7 соответствуют двухэлементной решетке из коаксиальных диэлектрических и металлических цилиндров (рис. 5).

Анализ приведенных зависимостей позволяет сделать следующие выводы.

I. В случае диэлектрических цилиндров (рис. 3 и 4) дифракционные зависимости решетки качественно не зависят от типа поляризации (Е- или Н-) падающей волны. В случае металлодиэлектрических цилиндров (рис. 6 и 7) эти зависимости качест-



венно отличаются в длинноволновой области ( $d/\lambda \ll 1$ ): при E-поляризации решетка полностью отражает, а при H-поляризации - полностью пропускает падающую волну.

2. Дифракционные зависимости решетки из коаксиальных и однородных диэлектрических цилиндров (рис.2) качественно аналогичны дифракционным зависимостям одноэлементной диэлектрической решетки /4/. Решетка из коаксиальных диэлектрических и металлических цилиндров (рис.5) проявляет свойства как диэлектрических /4/, так и металлических /2/ решеток, в чем сходна с одноэлементными коаксиальными металлодиэлектрическими решетками /3/.

3. Многоэлементность решеток приводит к количественному изменению дифракционных зависимостей, а в многоволновой области - и к перераспределению энергии между пространственными гармониками. В результате динамические характеристики рассеянного поля оказываются отличными от характеристик одноэлементных решеток. Дифракционные свойства многоэлементных решеток оказываются более содержательными по сравнению с одноэлементными решетками.

Таким образом, изменением внутренней структуры периода решетки можно плавно изменять дифракционные зависимости структуры. Многоэлементные решетки обладают лучшими, по сравнению с одноэлементными, возможностями по управлению переизлученным полем и проектированию требуемых дифракционных характеристик структуры.

Поступила 5.УП.1986

Кафедра общей физики и радиофизики Грузинского политехнического института  
им. В.И.Ленина



ლიტერატურა

1. В.П.Шестопапов, Л.Н.Литвиненко, С.А.Масалов, В.Г.Сологуб. Дифракция волн на решетках. Изд.Харьк. ун-та, 1973.
2. Г.Ш.Кеванишвили, О.П.Цагарейшвили. Радиотехника и электроника, 21, № 3, 498, 1976.
3. Ф.Г. Богданов, Г.Ш.Кеванишвили, З.И.Сикмашвили, О.П.Цагарейшвили, М.Н.Чихладзе. Изв. вузов, Радиофизика, 28, № 2, 229, 1985.
4. Ф.Г.Богданов, Г.Ш.Кеванишвили, М.Н.Чихладзе, Г.Г.Чихладзе. X Всесоюз. симпозиум по дифракции и распространению волн. Тексты докладов. Тбилиси, 1985, т.2, 216.
5. Л.Н.Литвиненко. Дифракция электромагнитных волн на многоэлементных решетках. Автореф. канд.дисс., Харьков, 1965.
6. Справочник по специальным функциям. Под ред. М.Абрамовица, И.Стиган. М., Наука, 1979.

ფ. ბოგდანოვი, გ. ჯავანიშვილი, მ. სიხლაძე

ბრყვლით ფაქტის დახმავს არაკონკრეტული მათემატიკის  
ფიქციური მუხარამი  
რეზიუმე

მიღებულია  $E$  და  $H$  პოლარიზებული ბრყვლით ელექტრომაგნიტური ფაქტის რეკონსტრუქციის ამოცანის მათემატიკური გადართვა იმ შემთხვევისათვის, როდესაც აღნიშნული ფაქტის ელემენტი  $N$  - ელემენტიან პერიოდულ მუხარამს, რომელიც წარმოადგენს არაკონკრეტულ ფიქციურ მუხარამს.

ნაჩვენებია, რომ მუხარამს პერიოდის ცვლილებისას მუხარამი ელემენტიან მათემატიკურ ფაქტის დახმავს რეკონსტრუქციის, რაც საშუალებას იძლევა ელექტრომაგნიტური ფაქტის რეკონსტრუქციის ამოცანის გადაჭრა და განვიხილოთ მათემატიკური სტრუქტურა წინასწარ აღებული მუხარამის,

F. Bogdanov, G. Kevanishvili, M. Chikhladze

SCATTERING OF PLANE WAVES OVER MULTIUNIT  
GRATINGS OF COAXIAL CYLINDERS

Summary

A rigorous solution is obtained for problems of diffraction of plane (E - and H - polarized) electromagnetic waves by N element periodic gratings of coaxial cylinders of circular profile. It is shown that a change of the inner structure of the period of the gratings brings allows a continuous change of the dynamic characteristics of the scattered field which allows to control a re-radiated effectively and to design structures with required properties.

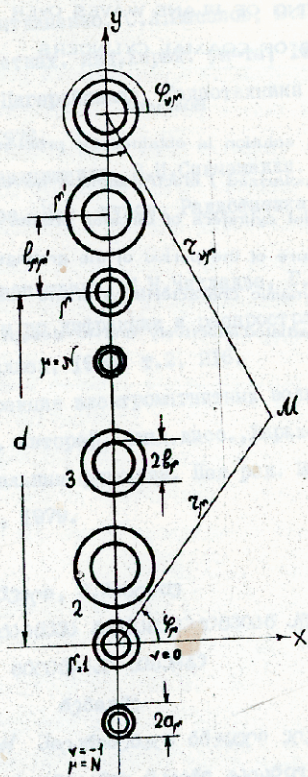


Рис. 1. Многоэлементная решетка из коаксиальных диэлектрических цилиндров (сечение плоскостью XOY).





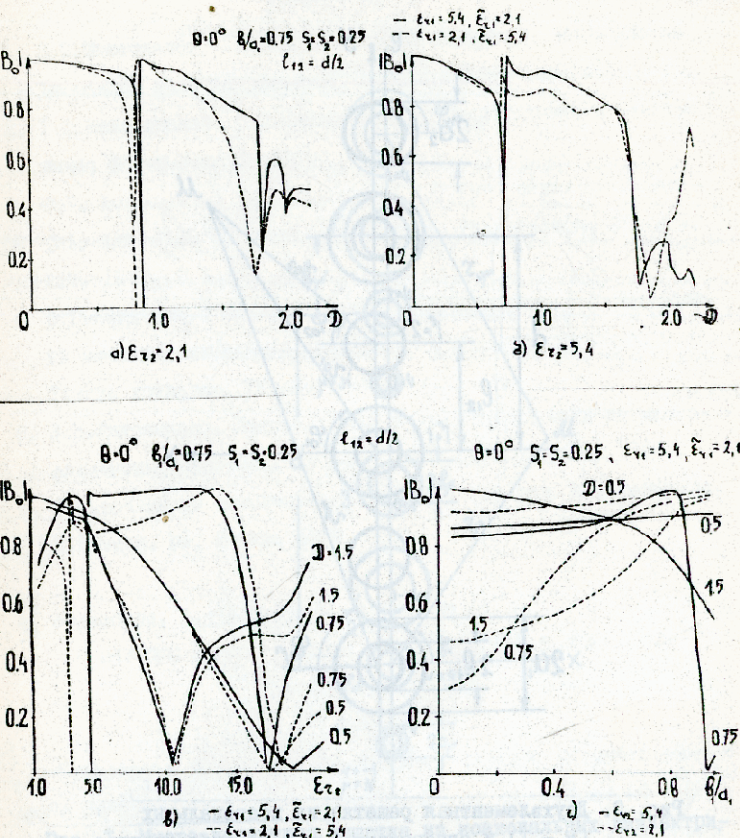


Рис. 3. Зависимость модуля коэффициента прохождения диэлектрической решетки от относительного периода решетки  $D = d/\lambda$  (а, в), относительной проницаемости диэлектрического цилиндра (б) и относительного заполнения коаксиального цилиндра (г) (Е-поляризация).

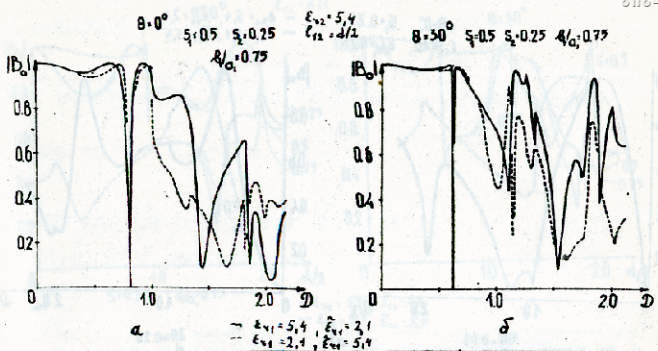


Рис. 4. Зависимость модуля коэффициента прохождения диэлектрической решетки от относительного периода  $D = d/\lambda$  в случае нормального (а) и наклонного (б) падения (Н-поляризация).

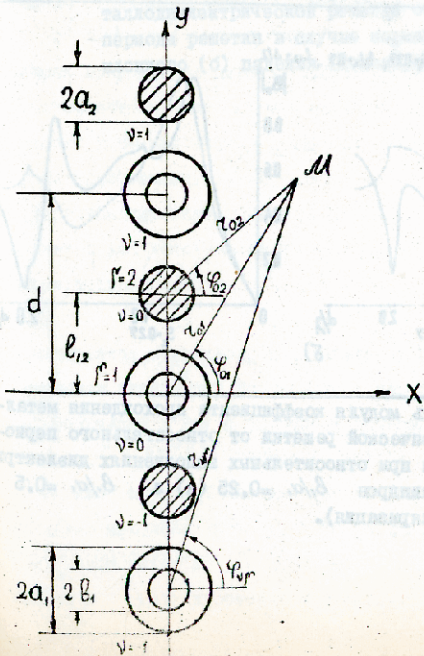


Рис. 5. Двухэлементная решетка из коаксиальных диэлектрических ( $\nu = 1$ ) и металлических ( $\nu = 2$ ) цилиндров (сечение плоскостью XOY).

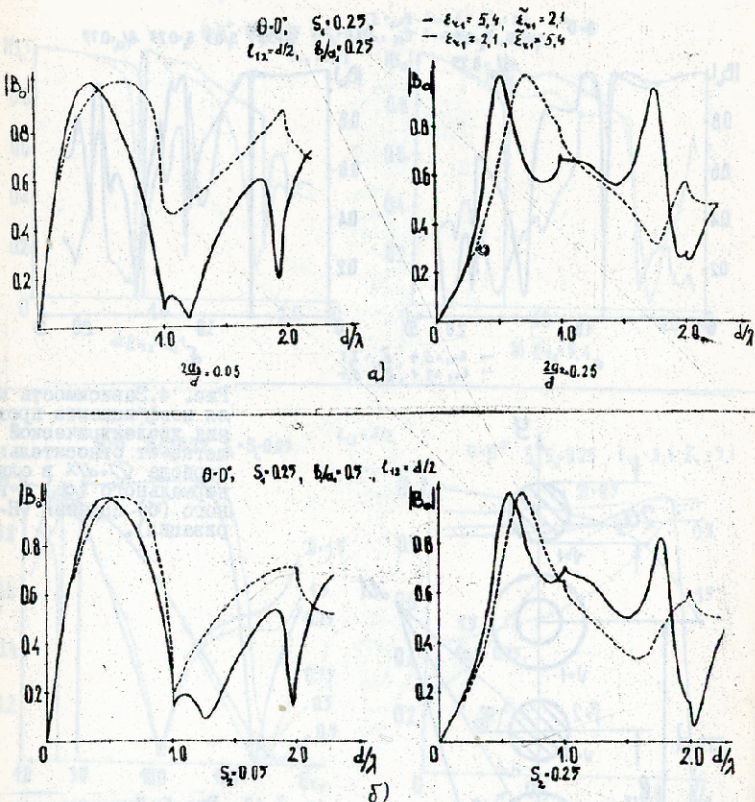


Рис. 6. Зависимость модуля коэффициента прохождения металлодиэлектрической решетки от относительного периода решетки при относительных заполнениях диэлектрических цилиндров  $b/a_1 = 0,25$  (а) и  $b/a_1 = 0,5$  (б) (Е-поляризация).

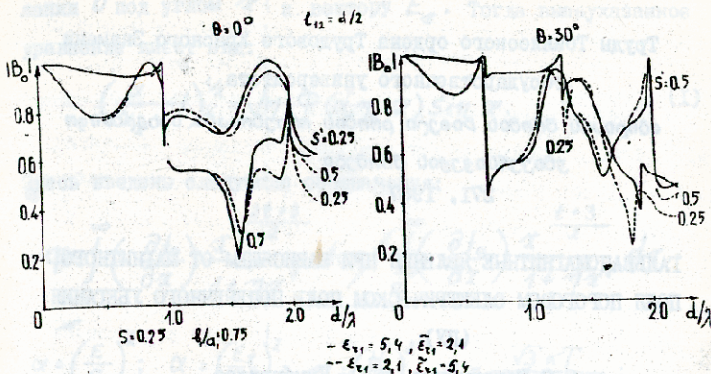


Рис. 7. Зависимость модуля коэффициента прохождения металлодиэлектрической решетки от относительного периода решетки в случае нормального (а) и наклонного (б) падения (Н-поляризация).



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
государственного университета

საქართველოს სახელმწიფო უნივერსიტეტის  
271, 1987

ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ ПРИ ЗАВИСЯЩЕМ ОТ МАГНИТНОГО  
ПОЛЯ ПОРОГОВОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ ПОПЕРЕЧНОГО УБЕГАНИЯ  
(IV)

З.С.Качлишвили, Ф.Г. Чумбуридзе

В работе /1/ было показано, что для механизмов рассея-  
ний энергии и импульса  $t > 0$ ,  $3t + s = 2$  (где  $t$  и  $s$  -  
показатели степени энергетической зависимости длин свобод-  
ного пробега по импульсу и по энергии соответственно  
 $l = l_0 x^{1+t/2}$ ,  $\tilde{l} = \tilde{l}_0 x^{1+s/2}$ , значения которых для всех известных  
механизмов рассеяния приведены в /2/, в режиме заданного  
тока, в скрещенных приложенных сильном электрическом  $E_x$  и  
магнитном  $H$  полях в отличие от результатов /3/ возникает  
IV с зависящим от магнитного поля пороговым электрическим  
полем.

В настоящей работе приводятся результаты исследования  
по возникновению IV при произвольной ориентации относитель-  
но друг друга приложенных к образцу полей и гальваномагнит-  
ным характеристикам в этих условиях.

Решение уравнения для определения греющего поля  $E$   
зависит от граничных условий /1/. Мы их выбираем следующим  
образом: вдоль оси  $x$  приложено  $E_x$  и течет ток  $j_x = 0$ ,  
а магнитное поле расположено в плоскости  $xy$  и направ-



ления  $O$  под углом  $x$  к вектору  $E_x$ . Тогда вышеуказанное уравнение имеет вид:

$$\left(\frac{\alpha}{\alpha_x} - 1\right)^{1/2} = \sqrt{\eta} \Phi(\alpha, \eta, x) \sin x. \quad (1)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$\Phi = \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x}\right) \frac{x^{\frac{2t+3}{2}}}{1+\eta x^t} dx / \int_0^{\infty} \left(\frac{\partial f_0}{\partial x}\right) \frac{x^{\frac{t+3}{2}}}{1+\eta x^t} dx.$$

$$\alpha = \left(\frac{E}{E_0}\right)^2; \quad \alpha_x = \left(\frac{E_x}{E_0}\right)^2; \quad \eta = \left(\frac{H}{H_0}\right)^2; \quad E_0 = \frac{\sqrt{3} kT}{a(l_0 \bar{l}_0)^{1/2}};$$

$$H_0 = \frac{(2mc^2 kT)^{1/2}}{e l_0}; \quad x = \frac{\epsilon}{kT}.$$

Исследование проведено по схеме работы /1/. Показано, что при выбранных в работе граничных условиях для вышеуказанной комбинации механизмов рассеяния тоже развивается ПУ. Однако в отличие от результатов /1/ здесь возникает порог как по приложенному электрическому и магнитному полям, так и по углу между ними:

$$\alpha_x^* = \left(2\eta \sin^2 x \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha}\right)^{-1}, \quad (2)$$

$$\eta^* = \left(2\alpha_x \sin^2 x \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha}\right)^{-1}, \quad (3)$$

$$x^* = \text{Arcsin} \left\{ \left(2\alpha_x \eta \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha}\right)^{-1/2} \right\}. \quad (4)$$

$\alpha_x^*$  и  $\eta^*$  находятся в обратнопропорциональной зависимости соответственно от  $\eta$  и от  $\alpha_x$  и увеличиваются с

уменьшением угла  $\alpha$  от  $90^\circ$  до  $0^\circ$ , что физически вполне понятно.

Из известных механизмов рассеяния условием  $t > 0$ ,  $3t + s = 2$  удовлетворяют следующие механизмы рассеяния  $t = +1$  (импульс рассеивается на диполях, на поляризационных оптических и акустических фононах в приближении высоких и низких температур) и  $s = -1$  (энергия рассеивается на деформационных акустических фононах в приближении высоких и низких температур). Для этих механизмов рассеяния неравновесная функция распределения имеет вид

$$f_0 \sim \exp \left\{ - \frac{\alpha}{1 + \alpha_x \cos^2 \alpha} + \frac{\alpha}{(1 + \alpha_x \cos^2 \alpha)^2} \ln \left( 1 + \frac{\eta(1 + \alpha_x \cos^2 \alpha)}{1 + \alpha} x \right) \right\} \quad (5)$$

С помощью этой функции распределения гальваноманнитные характеристики в аналитическом виде можно вычислить лишь в приближении слабого магнитного поля  $\eta(1 + \alpha_x \cos^2 \alpha) \ll 1 + \alpha$ . В этом приближении решение уравнения (1) дает

$$E = E_x \left\{ \frac{1 + B(H/H_0) \sin^2 \alpha}{1 - B(H/H_0) \sin^2 \alpha \left( \frac{E_x}{E_0} \right)^2} \right\}^{1/2} \quad (6)$$

Если

$$E_x \rightarrow E_x^* = \frac{0,6 E_0 H_0}{H \sin \alpha},$$

наступает IV.

Для вольт-амперной характеристики холловского поля и константы Холла имеем:

$$\frac{J}{J_0} = \frac{E_x}{E_0} \Delta^{-1/2} \sqrt{(1+2,76 \eta \Delta)^2 \sin^2 \varphi + (1+3\eta \Delta)^2 \cos^2 \varphi}, \quad (7)$$

$$E_y = 1,66 \Delta^{1/2} \sin \varphi E_x, \quad (8)$$

$$\frac{R}{R_0} = \frac{1,66 \sin \varphi}{\eta^{1/2} \sqrt{(1+3\eta \Delta)^2 \cos^2 \varphi + (1+2,76 \eta \Delta)^2 \sin^2 \varphi}}, \quad (9)$$

где 
$$\Delta = \frac{1 + \left(\frac{E_x}{E_0}\right)^2}{1 - B(H/H_0) \sin^2 \varphi \left(\frac{E_x}{E_0}\right)^2};$$

$$B(H/H_0) = 2,76 (H/H_0)^2; \quad R_0 = -(\sigma \mu_0 H_0)^{-1};$$

$$J_0 = -\sigma \mu_0 E_0.$$

На рис. 1,2 приведены ампер-гауссовая характеристика и зависимость порогового значения угла  $\varphi^*$  от электрического поля.

Вычисляя среднюю энергию, можно в явном виде получить условие слабости магнитного поля.

$$\frac{H}{H_0} \ll (1 + \alpha_x \cos^2 \varphi)^{-1}. \quad (10)$$





Литература

- 1. З.С.Качлишвили, Ф.Г.Чумбуридзе. ЖЭФ, 1984, 87, II, 1834-1841.
- 2. Z.S.Kachlishvili, Phys. stat. sol. (a) 1976, 33, 1, 15-51.
- 3. З.С.Качлишвили, ЖЭФ, 1980, 78, 5, 1955-1962.

ბ. უაჩილიძე, ფ. ყუმბურიძე

ბალანსირებული მახასიათებელი მონაცემების გამოყენებით  
სახარისხო მონაცემების დასაბუთებასთან დაკავშირებული  
კვლევის შედეგები

გამოთვლილია განვივი ვარსკვლავის ელექტონის გარეგნული მოძრაობის  
მისი გარეგნული მოძრაობის სიხშირის მიხედვით. ნაკვეთების, რომელიც არსებობს კონ-  
კრეტული მნიშვნელობის ვარსკვლავის ვარსკვლავის (რომელიც მოცემულია განვივი  
გამოთვლილია), რომელიც გამოთვლილია მონაცემები ვარსკვლავის და კონკრეტული, მო-  
ცემული ვარსკვლავის და მონაცემები ვარსკვლავის მიხედვით, გამოთვლილია მონაცემ-  
ების მონაცემები მახასიათებელი ანტიმონაცემები ვარსკვლავის მიხედვით.

Z.Kachlishvili, F.Chumburidze

THE GALVANOMAGNETIC CHARACTERISTICS OF TRANSVERSAL  
RUNNING WITH CRITICAL VALUES DEPENDING ON THE MAGNETIC  
FIELD

Summary

A theory of transversal running for a certain combination of dispersion  
mechanisms is investigated. It is shown that there is a critical value of the  
electric field ( at which the transversal running begins ), which is dependent  
on the magnetic field and the angle between the applied electric and magnetic  
fields. The galvanomagnetic characteristics of the above effect is investigated.

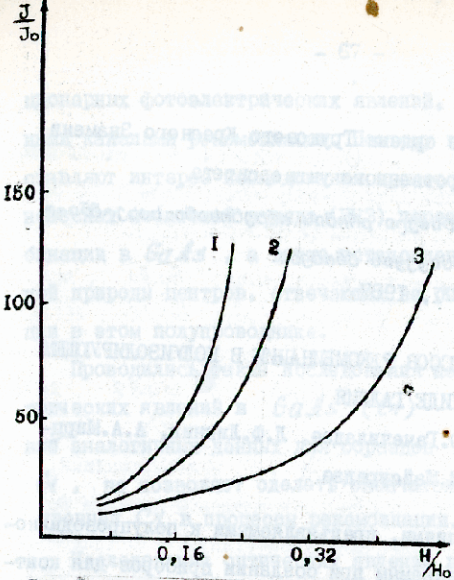


Рис. 1. Ампер-гауссовая характеристика для  $E_x = E_0$  при разных значениях угла  $\alpha$  : 1-  $\alpha = 90^\circ$  , 2-  $\alpha = 60^\circ$  , 3-  $\alpha = 30^\circ$

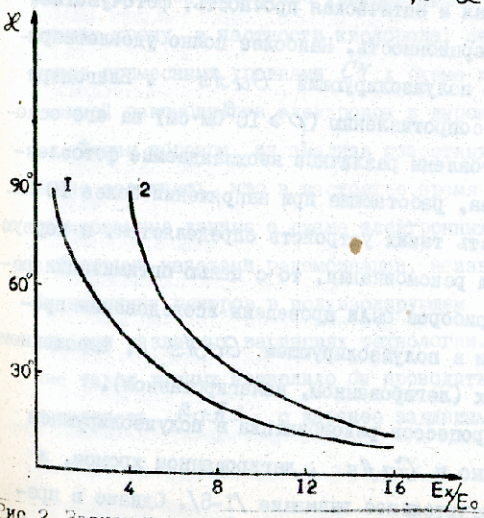


Рис. 2. Зависимость порогового значения угла от электрического поля для разных значений магнитного поля: 1-  $H = 0,2 H_0$  , 2-  $H = 0,1 H_0$



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
государственного университета

საბჭოთაო სახელმწიფო უნივერსიტეტის ტრუდები  
271, 1987

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РЕКОМБИНАЦИИ В ПОЛУИЗОЛИРУЮЩЕМ  
АРСЕНИДЕ ГАЛЛИЯ

Ю.А. Григорьев, О.С. Гачечиладзе, Л.Ф. Линник, А.А. Мирц-  
хулава, Р.М. Майсурадзе

Основными требованиями, предъявляемыми к полупроводнико-  
вым материалам, применяемым при создании приборов для конт-  
роля, синхронизации и управления излучением ОКГ, является  
высокая электрическая и оптическая прочность, фоточувстви-  
тельность, малая инерционность. Наиболее полно удовлетворя-  
ет этим требованиям полуизолирующий *GaAs*. Благодаря  
большому удельному сопротивлению ( $\rho \geq 10^8 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ ) на его осно-  
ве могут быть изготовлены различные неохлаждаемые фотоэлек-  
трические устройства, работающие при напряжении более 10 Кв.  
Так как инерционность таких устройств определяется, в первую  
очередь, процессами рекомбинации, то с целью оптимизации ре-  
жима работы этих приборов были проведены исследования про-  
цессов рекомбинации в полуизолирующем *GaAs*, выращенном  
при разных условиях (легированном, нелегированном).

Исследованию процессов рекомбинации в полуизолирующем  
*GaAs*, особенно в *GaAs*, легированном хромом, и  
ранее уделялось значительное внимание [1-5]. Однако в пре-  
дущих работах проводились, в основном, исследования ста-



ционарных фотоэлектрических явлений, обусловленных медленными каналами рекомбинации. Поэтому в настоящее время представляют интерес исследования процессов рекомбинации неравновесных носителей заряда (ННЗ) через быстрые каналы рекомбинации в  $GaAs$ , а также установление достаточно однозначной природы центров, отвечающих за быстрые каналы рекомбинации в этом полупроводнике.

Проводились также исследования нестационарных фотоэлектрических явлений в  $GaAs(Cr)$  /6/. Однако отсутствие аналогичных данных для образцов  $GaAs$ , легированных  $Cr$ , не позволяет сделать окончательного вывода о вкладе уровней  $Cr$  в процессы рекомбинации.

Исследования оптических явлений в  $GaAs(Cr)$  проводились в ряде работ /7-12/. В результате установлены: энергетическое положение уровней хрома и примесей, солирующих хром, в частности кислорода; сечение захвата ИК-фотонов примесными уровнями  $Cr$ ; схема переходов при излучательной рекомбинации электронов и дырок.

Таким образом, из анализа известных литературных данных можно заключить, что в настоящее время отсутствуют систематизированные данные о схеме электронных переходов, связанных с быстрыми каналами рекомбинации, неизвестна природа рекомбинационных центров в полупроводнике  $GaAs$ , выращенном при различных вариациях технологии. В то же время наличие таких данных позволило бы проводить коррекцию технологии и получать  $GaAs$  с заранее заданными свойствами.



## МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЙ И ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Проведены исследования следующих явлений: фотолюминесценции (ФЛ), модуляции поглощения ИК-излучения, вызванного облучением  $GaAs$  мощным лазерным излучением ( $P_{ИК}$ ).

Исследовались образцы полупроводникового  $GaAs$ , полученные различными методами: 1) промышленный  $GaAs$ , легированный  $Cu$  (АП-1); 2)  $GaAs$ , содержащий разные концентрации  $Cu$ :  $4 \cdot 10^{15} < N_{Cu} < 4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ; 3)  $GaAs$ , легированный  $Cu$  и  $O$ ; 4)  $GaAs$ , легированный  $Cu$ ,  $O$ , и изовалентными примесями типа  $In$ ; 5) нелегированный, собственный  $GaAs$ ; 6)  $GaAs$ , выращенный методом горизонтальной направленной кристаллизации (ГНК).

Для определения энергии залегания рекомбинационных уровней исследовалась фотолюминесценция. Исследования проводились при  $77^\circ K$ . При этом источником излучения являлся гелий-неоновый лазер ( $\lambda = 0,63 \text{ мкм}$ ,  $I \approx 10^{18} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ ), анализировались спектры ФЛ с помощью спектрометра ИКС-12, приемником излучения служило фотосопротивление  $PbS$ .

Наблюдаемые полосы ФЛ связаны, в основном, с рекомбинацией ННЗ при участии примесей. Наиболее сильная полоса в большинстве исследуемых кристаллов наблюдается при  $h\nu = 0,82 \text{ эВ}$  (рис.1, а, б). Энергетическое положение и полуширина этой полосы остаются практически постоянными как для нелегированного  $GaAs$ , так и для  $GaAs$ , легированного разными примесями:  $O$ ,  $Cu$ ,  $In$ ,  $P$ . В некоторых из нелегированных кристаллов с собственной проводимостью наблюдаются полосы ФЛ и энергией  $h\nu = 0,7 \text{ эВ}$ . Полуширина этих полос не-



одинакова, но существенно меньше полуширины полосы  $\sigma_{\text{H}} = 0,3 \text{ эВ}$ , которая составляет порядка  $0,3 \text{ эВ}$ . Кроме перечисленных полос ФЛ на всех образцах при высоких уровнях инжекции ННЗ наблюдалась интенсивная полоса зона-зонной люминесценции, кинетика которой во всех случаях повторяла импульс лазера, а амплитуда зависела от интенсивности возбуждения ННЗ как

$$J_{3.3} \sim L^2.$$

### ИК-ПОГЛОЩЕНИЕ. МЕТОДИКА. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

С целью определения энергетического положения других, например, безизлучательных уровней рекомбинации исследовалась модуляция поглощения зондирующего ИК-излучения в

*GaAs* при облучении его мощным излучением неодимового лазера. Источником ИК-излучения в этом случае служил монохроматор ИКС-14, на входной щели которого помещался образец. Приемником ИК-излучения в этом случае служило фотосопротивление *Ge (Au)*.

При облучении *GaAs* излучением неодимового лазера происходит генерация электронно-дырочных пар, которые за время значительно меньше длительности импульса излучения лазера захватываются на примесные уровни, расположенные в запрещенной зоне *GaAs* и изменяют их заселенность. В этом случае возможно изменение коэффициента поглощения ИК-излучения как за счет свободных носителей, так и за счет примесного поглощения. Сигнал  $\Delta M$ , регистрируемый фотосопротивлением *Ge (Au)*, будет  $\Delta M = M(1 - e^{-\alpha k d})$ , где  $M$  - интенсивность ИК-излучения, прошедшего через образец,  $\Delta K$  - измене-

ние коэффициента поглощения ИК-излучения,  $d$  - толщина образца /13/.

На рис. 2 приведены зависимости модулируемой части ИК-излучения от энергии квантов.

В спектральном распределении полужизолирующего *GaAs* наблюдается резкое возрастание  $\Delta M$  в области  $\sim 0,9$  эВ, достигающее максимума в области 0,75 эВ. В образцах, легированных мелким донором ( $n_D = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ), в этой области наблюдается плавное возрастание  $\Delta M$ .

В образцах р-типа ( $P_0 = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ), легированных мелким акцептором, наблюдается плавное монотонное возрастание  $\Delta M$  во всем исследуемом интервале энергий от 1 до 0,5 эВ. Кинетика релаксации  $\Delta M(t)$  в этом случае совпадает с временной жизнью дырок, измеренным по ФП. Кинетика релаксации  $\Delta M$  в большинстве образцов полужизолирующего *GaAs* не совпадает с временной зависимостью ФП и больше длительности импульса лазера. Кинетика релаксации  $\Delta M$ , построенная в двойном логарифмическом масштабе для этого случая, состоит из двух участков:  $\Delta M \sim t^{-1}$  и  $\Delta M \sim t^{-0,3}$ .

#### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Наличие во всех исследуемых образцах *GaAs* интенсивных полос люминесценции, размытых в диапазоне от 1 до 0,6 эВ, указывает на то, что во всех образцах полужизолирующего *GaAs* в центре запрещенной зоны сосредоточена большая концентрация уровней. Значительно большая полуширина полос люминесценции через дискретные примесные уровни (например,



уровень  $C\gamma$  с  $h\nu = 0,62\text{эВ}$ ) свидетельствует о том, что такое уширение не может быть объяснено размытием зон, связанных с хвостами плотности состояний  $C$ - и  $V$ -зон. Взаимодействие с фононами также не может обеспечить такое уширение. Наиболее вероятной причиной, уширения полос люминесценции является наличие нескольких уровней, степень участия которых в люминесценции нелегированных образцов  $GaAs$  можно управлять изменением положения уровня Ферми (рис. 1, кр. 3, 4). Кинетика релаксации люминесценции, повторяющая импульс лазера для всех наблюдаемых полос, указывает на то, что люминесценция вызвана переходами свободных носителей ( $\tau$ , которых меньше  $t_u$ ) на уровни, расположенные в центре зоны. Межпримесные переходы, которые, как будет показано ниже, проявляются в модуляции поглощения ИК-излучения, имеют, как правило, длинную кинетику релаксации, с  $\tau \gg t_u$ .

Для выяснения механизмов, определяющих спектральное распределение  $\Pi_{ИК}$ , проведены его исследования на образцах  $p$ - и  $n$ -типа  $GaAs$ .

На рис. 2 приведено спектральное распределение  $\Pi_{ИК}$  для легированного  $n$ - и  $p$ - и полуизолирующего  $GaAs$ ; для сравнения здесь же приведены литературные данные [14] по ИК-поглощению свободными носителями в  $GaAs$ .

Как видно из рисунка, спектральное распределение  $\Pi_{ИК}$  и поглощение ИК-излучения свободными дырками в  $p$ - $GaAs$  совпадают. Это позволяет предположить, что модуляция ИК-поглощения в данном случае связана с поглощением ИК-излучения свободными неравновесными дырками ( $\tau_p \gg \tau_n$ ) при их переходах между подзонами 1-3  $V$ -зоны  $GaAs$ .



такое предположение подтверждается также совпадением кинетики релаксации ФП и  $\Pi_{ИК}$  в р- GaAs . Сечение захвата ИК-фотонов при  $h\nu = 0,52\text{эВ}$  для перехода I-3 составляет  $1,4 \cdot 10^{-16}\text{см}^{-2}$ .

На рис. 2 представлены сигнал модуляции поглощения ИК-излучения в n-GaAs и, для сравнения, поглощение ИК-излучения свободными электронами. Поглощение свободными носителями в данном случае не проявляется по двум причинам. Во-первых, как видно из люминесценции, уровни с  $E=0,82\text{эВ}$  присутствуют во всех исследуемых образцах. Она полностью закодирована электронами, что увеличивает интенсивность переходов электронов в С-зону либо на более высоколежащие свободные уровни, если они образуют комплексы с участием этих уровней. Во-вторых, сечение захвата свободными электронами ( $\epsilon_n$ ) в исследуемом спектральном диапазоне ИК-излучения чрезвычайно мало и составляет  $8 \cdot 10^{-19}\text{см}^{-2}$  при  $h\nu = 0,39\text{эВ}$  и  $4 \cdot 10^{-18}\text{см}^{-2}$  при  $h\nu = 0,62\text{эВ}$  /14/.

Таким образом, в исследуемом интервале длин волн ИК-излучения модуляция электронной части коэффициента поглощения не наблюдается из-за малости  $\epsilon_n$ . Поглощение свободными дырками из-за малости их концентрации ( $\tau_p \approx 10^{-10}\text{с}$ ) в полувоздушающем GaAs оказывается лишь в области сильного возрастания  $\epsilon_p$ , т.е. при малых энергиях ИК-фотонов (рис. 2). Поглощение свободными дырками наблюдалось нами в большинстве образцов (в контрольных измерениях) при работе с длительностью импульса неодимового лазера  $t_{и} = 50\text{нс} \approx t_p$ , где  $t_p$  - время разрешения ИК-приемника. Так как все измерения выполнялись с лазером ЛТИПЧ-5, длительность импульса

3049357320  
30833000335  
которого  $t_{и}$

или не сказыва  
ли рекомбиниру

Идентично  
недегированных  
центрацией, ук

с наличием лет  
лено несовершен

Схемы веро  
печить наблюда

Очевидно, что  
энергетическую

ми  $E_p$ , в то в  
делает нижнюю

ферми, т.е. ни  
ние интенсивно

два раза) энер  
уровней (спад

лее чем в два  
ней составляет

ляется не од  
муна ФП и  $\Pi_{ИК}$

но уровней, уч  
в положении ур

Различия в спе  
муна в  $\Pi_{ИК}$  из

$10^{16}\text{см}^{-3}$ ,  $E_p$   
В то время ка



которого  $t_{21} = 8 \text{нс}$ , то и их влияние на спектры ИК модуляции не сказывалось (за время  $t_p = 50-8-42 \text{нс}$  дырки успевают рекомбинировать).

Идентичность оптического распределения  $\Pi_{\text{ИК}}$  и ФЛ для легированных образцов и образцов, легированных разной концентрацией, указывает на то, что наличие уровней не связано с наличием легирующей либо остаточных примесей, а обусловлено несовершенством кристаллов *GaAs*.

Схемы вероятных электронных переходов, которые могут обеспечить наблюдаемые спектры ФЛ и  $\Pi_{\text{ИК}}$ , представлены на рис.3. Очевидно, что низкоэнергетическое крыло полос ФЛ определяет энергетическую границу уровней, расположенных над уровнем Ферми  $E_F$ , в то время как низкоэнергетическое крыло  $\Pi_{\text{ИК}}$  определяет нижнюю границу уровней, расположенных под уровнем Ферми, т.е. нижней границей уровней можно считать (уменьшение интенсивности  $\Pi_{\text{ИК}}$  относительно его максимума более чем в два раза) энергию, равную  $0,60 \text{эВ}$  от  $E_V$ ; верхняя граница уровней (спад интенсивности ФЛ относительно ее максимума более чем в два раза) составляет  $0,65 \text{эВ}$ , т.е. размытие уровней составляет порядка  $0,2 \text{эВ}$ . Так как в данном случае проявляется не один уровень, а несколько, то положение максимума ФЛ и  $\Pi_{\text{ИК}}$  зависит от положения уровня Ферми относительно уровней, участвующих в формировании ФЛ и  $\Pi_{\text{ИК}}$ . Различием в положении уровня Ферми, по-видимому, и можно объяснить различие в спектрах ФЛ (рис. 1а и 3б) и отсутствие максимума в  $\Pi_{\text{ИК}}$  намеренном в *n-GaAs* типа АП-1 ( $n_0 = 10^{16} \text{см}^{-3}$ ,  $E_F$  - вблизи С-зоны, переход  $\epsilon_p \text{СМ}_1^c$ ) (рис.3б). В то время как смещение  $E_F$  к центру запрещенной зоны

собственного и полужолирующего  $GaAs$  приводит к проявлению более крутого спада в высоко- и низкоэнергетическом крыле поглощения, связанного с тем, что интенсивность перехода  $\epsilon_{\varphi} \delta N_i^o$  и  $\epsilon_{\varphi} \delta N_i^-$  убывает по мере уменьшения концентрации уровней, обеспечивающих  $\Pi_{ик}$  при их удалении от уровня Ферми.

Максимальная концентрация центров сосредоточена в области энергий, соответствующих максимуму сигнала поглощения  $\Pi_{ик}$ , расположенному при 0,75эВ, т.е. в центре запрещенной зоны  $GaAs$ . Последнее подтверждает модель Мартина /15/ о наличии наряду с мелкими донорами и акцепторами в центре запрещенной зоны сильно размытого уровня с уширением порядка  $\pm 4$  кТ. Согласно /16/ и /17/, концентрация этих центров лежит в пределах  $5 \cdot 10^{15} - 1,8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ .

Кинетика релаксации сигнала  $\Pi_{ик}$  типа  $\Delta M \sim \frac{1}{t}$  и  $\Delta M \sim \frac{1}{t^{0.3}}$  может быть объяснена в рамках 2-уровневой модели рекомбинации при полной перезарядке одного из уровней.

### ВЫВОДЫ

1. В запрещенной зоне полужолирующего  $GaAs$  расположена большая концентрация центров рекомбинации, размытых более чем на 0,2 эВ в центре зоны, и взаимнокомпенсированных мелких  $N_d$  и  $N_a$ , природа которых, по-видимому, связана со структурными дефектами  $GaAs$ .

2. При 300°K процессы рекомбинации в нелегированном и слаболегированном полужолирующем  $GaAs$  ( $N < 10^{15} \text{ см}^{-3}$ )



независимо от типа легирующей примеси определяется захватом носителей заряда на быстро каналы и прилипанием на мелкие.

Поступила 13.X.1986

Проблемная НИИ  
физики полупроводников

### Литература

1. Л.А.Балагурин, Э.М.Омельяновский, Л.Я.Первова. ФТП, 8, в.8, с.1616, 1974.
2. Э.М.Омельяновский и др. ФТП, 9, в.10, с. 1930, 1975.
3. М.А.Мессерер, Э.М.Омельяновский и др. ФТП, 10, в.3, с. 851, 1976.
4. L.Eaves, et al. J.Phys. C:Sol. St. Phys, 15, 3, 6257, 1982.
5. A.White, Sol. St. Com., 32, 205, 1974.
6. С.П.Ашмонтас и др. ФТП, 15, в.12, с.2405, 1981.
7. T.Timenez et al. Phys. St Sol., A73, 2, 189, 1982.
8. T.Blakenore. J. Appl. Phys., 123, 1982.
9. D.Look. Sol. St. Com., 24, 825, 1972.
10. Phil Won Tu. Sol. St. Com., 32, 1111, 1979.
11. P.Leyral et al. Sol. St. Com., 36, 333, 1984.
12. L.Monstresl, Phys. Rev. B, 20, 4, 1527, 1979.
13. Л.Ф.Линник, Л.Г.Линник, В сб. Квантовая электроника, К., "Наукова думка", в.15, с.106, 1978.
14. Ю.И.Уханов. "Оптические свойства полупроводников", "Наука", М., 1977.
15. G.Martinets, J.Appl. Phys., 51, 2640, 1980.
16. D.Holmes et al. App. Phys. Lett., 40, 46, 1982.
17. E.Johnson et al. J.Appl. Phys., 54, 204, 1983.



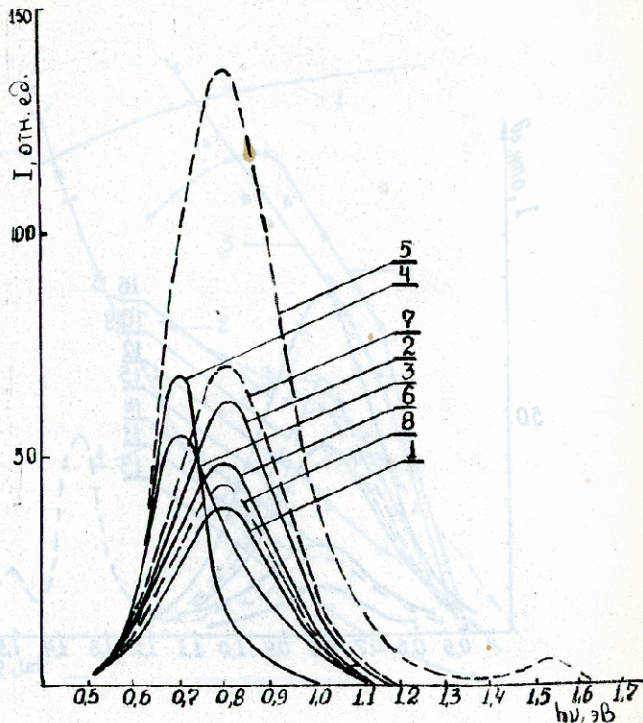


Рис. 1а

Фотолуминесценция полуизолирующего  $GeAs$

- |   |   |
|---|---|
| 1 - $\rho \approx 10^8 \text{ ом}\cdot\text{см}$ ; н/л;         | 5 - $\rho \sim 10^8 \text{ ом}\cdot\text{см}$ ; н/л;              |
| 2 - $\rho \approx 10^7 \text{ ом}\cdot\text{см}$ ; н/л;         | 6 - $Ge_2O_3$ ;   |
| 3 - $\rho \approx 10^8 \text{ ом}\cdot\text{см}$ ; н/л;         | 7 - $\rho = 4,6 \cdot 10^8 \text{ ом}\cdot\text{см}$ ;            |
| 4 - $\rho \approx 2 \cdot 10^8 \text{ ом}\cdot\text{см}$ ; н/л; | 8 - $Ge, O, \rho \approx 7 \cdot 10^8 \text{ ом}\cdot\text{см}$ ; |
|   | $Ge - 3,8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ .                        |

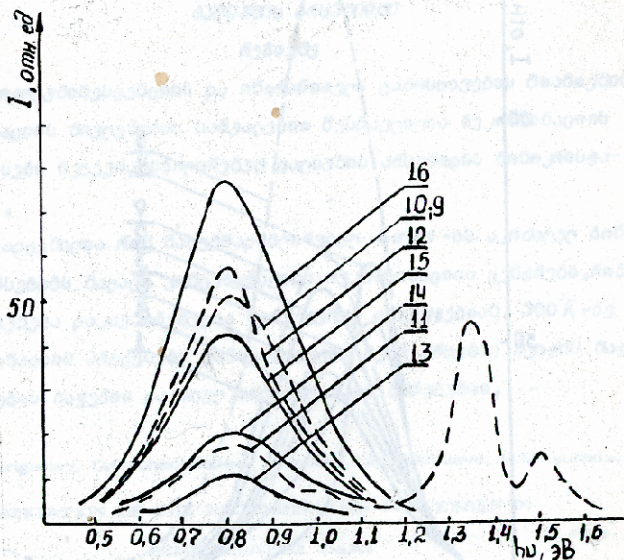


Рис. 16

Фотолуминесценция полуизолирующего GaAs.

- |  |  |
|--|--|
| 9 - $\text{Ga}_2\text{O}_3, N, G, = 3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ; | 13 - $\text{Ga}_2\text{O}_3, \rho = 1,5 \cdot 10^7 \text{ ом} \cdot \text{см}$ ; |
| 10 - $\rho = 5 \cdot 10^8 \text{ ом} \cdot \text{см}$ ;                | 14 - $\text{Ga}_2\text{O}_3, \rho = 5,2 \cdot 10^8 \text{ ом} \cdot \text{см}$ ; |
| 11 - $\rho = 6,3 \cdot 10^7 \text{ ом} \cdot \text{см}$ ;              | 15 - $\text{Ga}_2\text{O}_3, \rho = 8,8 \cdot 10^8 \text{ ом} \cdot \text{см}$ ; |
| 12 - $\text{Ga}_2\text{O}_3$ ;   | 16 - $\text{Ga}_2\text{O}_3, \rho = 9,3 \cdot 10^8 \text{ ом} \cdot \text{см}$ . |

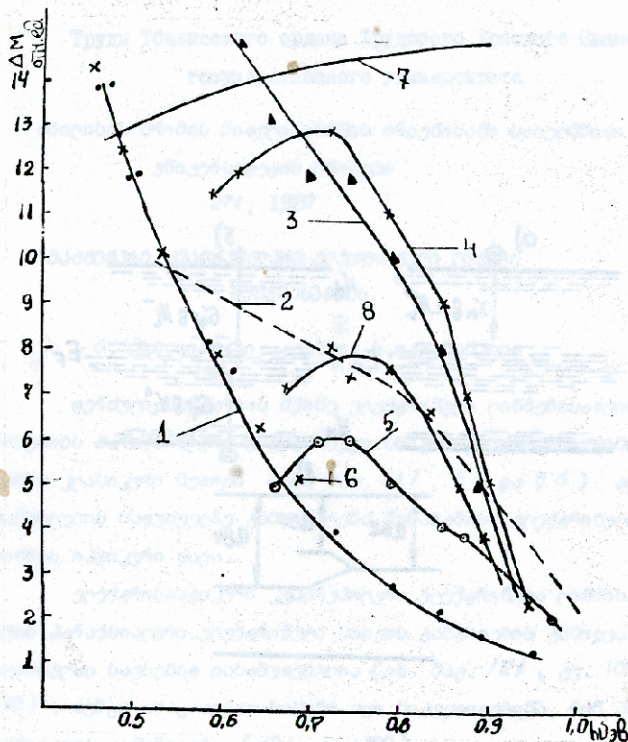


Рис. 2

Спектральная зависимость сигнала модуляции ИК-излучения в GaAs и спектр внутризонного поглощения в n- и p-GaAs.

1 - p-GaAs; 2 - n-GaAs; 3 - н/л, GaAs ( $M=19$ ); 4 - GaAs( $C_i$ ),  $N_{cc}=4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$   
 5 - GaAs( $C_i$ ),  $N_{cc}=2,2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ; 6, 7 - внутризонное поглощение в p- и n-GaAs соответственно; 8 - GaAs( $Zn, C_i$ ),  $N_{cc}=10^{19} \text{ см}^{-3}$ ,  $C_i=10^{16} \text{ см}^{-3}$ .



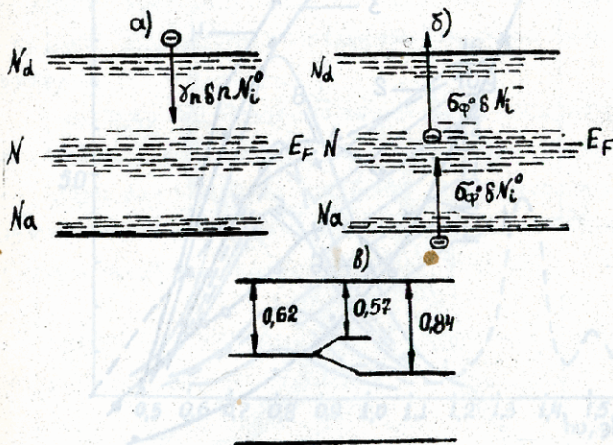


Рис. 3

- а) Схема электронных переходов, обуславливающих фотолюминесценцию;
- б) Схема электронных переходов, определяющих модуляцию поглощения ИК-излучения при высоких уровнях возбуждения ИИЗ в GaAs;
- в) Энергетическая диаграмма уровней Ga и GaAs.



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
государственного университета

თბილისის შრომის წითელი რიზის ორდენის სახელმწიფო  
უნივერსიტეტის შრომები  
271, 1987

მატემატიკის კვარტალიანი ელემენტური ციფრის  
თეორიისათვის

მ. კობახიძე, ი. ქოქია, ს. იაკობაშვილი.

ქვემოთ სიბრტყის მქონე ელემენტური ციფრისათვის  
არსებობს პარაქსიადური ელემენტური სხივის განტოლების გამოყ-  
ვანის კლასიკური მეთოდი (იხ. მატ. /11/, § 5 და § 6). ამ  
განტოლების საფუძველზე გამოიხატება შესაბამისი ელემენტური  
ციფრის მკვლევარი ძალა.

ელემენტარული კვარტალიანი ელემენტური ციფრისა-  
თვის პარაქსიადური ელემენტური სხივის განტოლების გამოყვანა  
მეორეჯერ საკვებში დასაბუთებულია (იხ. მატ. /2/, გვ. 109-  
110). ზემოთ აქვე აღნიშნული საჭირო იყო მიგვეთქმინა, რომ პო-  
ტენციის განაწილება (1/2/, გვ. 109)

$$U(x, y) = \frac{1}{2} K(x^2 - y^2)$$

ნარმოვანებს დაპლანის შესაბამისი განტოლების

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = 0$$

ამონახსნად (ახლა ციფრში, რომელიც ცნობილია,  $\neq$  ზღვრის სიბრტყის  
წილია და ვერც არ გააჩნია  $E_{\neq}$  იმპერველი).

ახლა შევხება მათემატიკურ კვარტალიანი ელემენტური ციფრის,



მასში პარაქსიალური ელექტრონული სხივის განვითარების გამოყვანა  
ფორმულა ნაკლებად რამაქურებულია) (იხ. /2/, მკ. 111-112)

ინტეგრირება სტატიის მიზანია გენოკონსერვაციის კანონ-  
ური მეთოდით (/1/, § 6) პარაქსიალური ანუ ორძველი ელექ-  
ტრონული სხივის განვითარების გამოყვანა მაგნიტური კვადრუპო-  
ლური ელექტრონული ცენტრისათვის.

ელექტრონის მოძრაობის განვითარებას ასეთ ცენტრში  
(/2/, მკ. 111) შეძრავს სახე აქვს:

$$\left. \begin{aligned} m \frac{d^2 x}{dt^2} &= e v_z B_y, \\ m \frac{d^2 y}{dt^2} &= -e v_z B_x, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

სადაც  $e$  - ელექტრონის მუხტის აბსოლუტური მნიშვნელობა,  
 $m$  - ელექტრონის უძრავობის მასაა,  $v_z = \sqrt{\frac{2e}{m}} U_0$  -  
სიჩქარის  $z$  მიმართული (ანუ მისი მიჯლი სანების სიჩქარე,  
რადგან  $U_0$  - ამასიჩქარეული ძაბვაა),  $B_x$  და  $B_y$  - მაგნიტური  
ინტენსივობის შესაბამისი მიმართულებები.

განმარტების თანახმად

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A},$$

ანუ /3/

$$\left. \begin{aligned} B_x &= \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}, \\ B_y &= \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}, \\ B_z &= \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}, \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

რადგან ასეთ ცენტრში  $B_z = 0$  და  $z$  კოორდინატზე არაფერია  
რამდენიმე (ან ორჯერ სიმეტრიის ცენტრია), ამიტომ (2) -  
დან გვაქვს

$$B_x = \frac{\partial A_z}{\partial y}; \quad B_y = -\frac{\partial A_z}{\partial x}; \quad B_z \equiv 0. \quad (3)$$

ლინზის ჭარბობში უაღრავბოდად უაქრონური სხივის რენს. მაშინ მაქსვარის I განტოლებას ასეთ ლინზაში შევძეთ სახე აქვს:

$$\operatorname{rot} \vec{B} = 0$$

ანუ

$$\begin{aligned} \frac{\partial B_z}{\partial y} - \frac{\partial B_y}{\partial z} &= 0; & \frac{\partial B_x}{\partial z} - \frac{\partial B_z}{\partial x} &= 0; \\ \frac{\partial B_y}{\partial x} - \frac{\partial B_x}{\partial y} &= 0. \end{aligned} \quad (4)$$

რადგან  $B_z \equiv 0$  რა  $z$  -ზე არაფერია დამოკიდებული, ამიტომ (4) -დან გვრჩება მხოლოდ III განტოლება, რომელიც (3) -ის გათვარისწინებით მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\frac{\partial^2 A_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A_z}{\partial y^2} = 0. \quad (5)$$

(5) -ის ამოხსნას შევძეთ სახე აქვს:

$$A_z(x, y) = \frac{1}{2} K_M (y^2 - x^2), \quad (6)$$

რამისავე შევძეთა რაჯრნმერეთ (5) -ში (6) -ის ჩასმით. (3) -ის რა (6) -ის თანახმად გვაქვს:

$$B_x = K_M y; \quad B_y = K_M x. \quad (7)$$

სხვათა მორის (7) ვაწახმეთა (4) -ის III განტოლებას:

$$\frac{\partial B_y}{\partial x} = \frac{\partial B_x}{\partial y} = K_M = \text{const}. \quad (8)$$

რავებშიც  $K_M$  მუდმივს დამოთვთა მოსახერხებელია სი-  
მეორის რქმე (ქრმვერმვერთი ვაქვასწინით):



$$K_M = \left( \frac{\partial B_y}{\partial x} \right)_{\substack{x=0 \\ y=0}} = \left( \frac{\partial B_x}{\partial y} \right)_{\substack{x=0 \\ y=0}}$$

ჩვენს (7) (1) -ში:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = \frac{e}{m} v_z K_M x; \quad \frac{d^2 y}{dt^2} = -\frac{e}{m} v_z K_M y. \quad (9)$$

ჩაგვან:

$$\frac{d}{dt} = \frac{d}{dz} \frac{dz}{dt} = v_z \frac{d}{dz}$$

და

$$\frac{d^2}{dt^2} = \frac{d}{dt} \left( \frac{d}{dt} \right) = v_z \frac{d}{dz} \left( v_z \frac{d}{dz} \right) = v_z^2 \frac{d^2}{dz^2},$$

ამიტომ (9) მიიღებს სახეს:

$$v_z^2 \frac{d^2 x}{dz^2} = \frac{e}{m} v_z K_M x; \quad v_z^2 \frac{d^2 y}{dz^2} = -\frac{e}{m} v_z K_M y,$$

ან, ეს განვიხილოთ, რომ  $v_z = \sqrt{2 \frac{e}{m} U_0}$ , მივიღებთ განტოლებას საძირებურ სისტემას:

$$\left. \begin{aligned} x'' - \alpha_m^2 x &= 0, \\ y'' + \alpha_m^2 y &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

სადა

$$\alpha_m^2 = \sqrt{\frac{e}{2mU_0}} \cdot K_M = \sqrt{\frac{e}{2mU_0}} \cdot \left( \frac{\partial B_y}{\partial x} \right)_{\substack{x=0 \\ y=0}} = \sqrt{\frac{e}{2mU_0}} \cdot \left( \frac{\partial B_x}{\partial y} \right)_{\substack{x=0 \\ y=0}} = \text{const}$$

ჩვენს შემთხვევაში, (10) სისტემა ემთხვევა 1.234 სისტემას / 2/ -ში (დავ. 112).

1. В.И. Гапонов. Электроника, часть I, Госуд. изд-во физ.-мат. литературы, Москва, 1960.
2. А.А. Жигарев. Электронная оптика и электронно-лучевые приборы. "Высшая школа", Москва, 1972.
3. И.Н. Бронштейн, К.А. Семендяев. Справочник по математике, "Наука", Москва, 1965.

М.Ш.Кобахидзе, И.Д.Жгенти, С.С.Иаганашвили

### К ТЕОРИИ КВАДРУПОЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ ЛИНЗ

#### Резюме

Теоретически обоснован вывод уравнения параксиального (осевого) электронного луча в квадрупольной электронной линзе с магнитным управлением луча. Сказанное сделано более убедительно, чем в существующей литературе.

M.Kobakhidze, I.Zhgenti, S.Iaganashvili

### TOWARD THE THEORY OF QUADRUPOLE ELECTRON LENSES

#### Summary

The derivation of an equation of a paraxial (axial) electron ray in a quadrupole electron lens with magnetic ray control is substantiated theoretically. This is done more convincingly than is found in the literature.



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
государственного университета

თბილისის შრომის წიგნითი პრესის ირეგულარული სახელმწიფო  
უნივერსიტეტის შრომები

271, 1987

ცოცხალი უცხოეთის სოციალისტური რესპუბლიკის  
მ. კობახიძე, ი. ჟღერტი, ს. ნაცვანიძე

როგორც ცნობილია, ურთიერთობის რეკურსი ძალიან  
სამომავლო ხდება ამ რეკურსში პარაქსიული /ანუ რეკურსი/ ურთი-  
ერთობის სხივების განსაზღვრის ინტეგრირებით. არსებობს აღნიშნული  
განსაზღვრის გამოყვანის კლასიკური მეთოდი /1/. ცოცხალი ურთი-  
ერთობის რეკურსისათვის რეკურსულად გვევლინება აღნიშნული განსა-  
ზღვრის გამოყვანის სხვაანაირი მეთოდიც /2/, მაგრამ თეორიულად ეს  
შეკანასკნელი ნაკლებად რამდენიმეა. ნინამდებარე სტატიის მი-  
ზღვან ნაშრომადგენს გეომეტრიული კლასიკური მეთოდიც /1/ ცოცხალი-  
ურთიერთობის რეკურსის /ურთიერთობის რეკურსული და მარტივი/  
პარაქსიული ურთიერთობის სხივების განსაზღვრებასა გამოყვანა და მათ  
სამომავლოდ ამ რეკურსის რეკურსი ძალიან გამოიყვანება.

ეს განვიხილოთ ურთიერთობის რეკურსული ურთიერთ-  
ობის რეკურსი. რადგან ასეთ რეკურსში გვევლინება ურთიერთობის  
ი, როგორც ურთიერთობის მარტივი არ არსებობს /ვთქვათ,  $E_r \equiv 0$  /,  
ამიტომ რადგან განსაზღვრებას ასეთ რეკურსში გვევლინება სახე აქვს:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0. \quad (1)$$

გვევლინება (1)-ის ამოხსნა გვევლინება მარტივად სახით:

$$u(y, x) = \varphi(x) + \varphi_2(x)y^2 + \varphi_4(x)y^4 + \dots, \quad (2)$$



სადაც  $\Phi(x) = U(0, x)$  ნარჩენადგენს ურთიერთ პოტენციალ-  
 რის განაწილებას სიმეტრიის  $x$  ღერძის გასწვრივ. ეს განაწი-  
 ლება უქსპონენციალურ განისაზღვრება ცნობილი მეთოდებით (1/,  
 § 4, ან 1/2/, § 1.4).

ჩავსვათ (2) (1)-ში და გავაჯამოთ წევრები:

$$\Phi''(x) + 2\Phi_2(x) + [\Phi_2''(x) + 12\Phi_4(x)]y^2 + \dots = 0. \quad (3)$$

(3) -ის მესრულებიდან ჩვენ უნდა მივიღებოთ, რომ

$$\left. \begin{aligned} \Phi''(x) + 2\Phi_2(x) &= 0, \\ \Phi_2''(x) + 12\Phi_4(x) &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

რაც ჩვენ ძირითადად გვინტერესებს ის სიტყვა, სადაც  
 $y \neq 0$ . (4) -დან გვაქვს:

$$\Phi_2(x) = -\frac{1}{2}\Phi''(x); \quad \Phi_4(x) = -\frac{1}{12}\Phi_2''(x) = \frac{1}{24}\Phi^{(iv)}(x); \dots$$

ამგვარად ვმოქლომ (2) -ის მარჯვნივ

$$U(y, x) = \Phi(x) - \frac{1}{2}y^2\Phi''(x) + \frac{1}{24}y^4\Phi^{(iv)}(x) - \dots \quad (5)$$

პარაქსიალური (ლორდული) სხივისათვის შეგვიძლია განვიხილოთ  
 მიახლოება:

$$U(y, x) \approx \Phi(x) - \frac{1}{2}y^2\Phi''(x),$$

რომლის მარჯვნივ უკვე მისწავლეთ

$$E_x = -\frac{\partial U}{\partial x} \approx 0; \quad E_y = -\frac{\partial U}{\partial y} \approx y\Phi''(x); \quad E_z = -\frac{\partial U}{\partial z} \approx -\Phi'(x).$$

ამიტომ ურთიერთის მოძრაობის განტოლებები ასეთი სახისაა:

$$\left. \begin{aligned} m\ddot{y} &= -eE_y \approx -e y \Phi''(x) \\ m\ddot{z} &= -eE_z \approx e \Phi'(x) \end{aligned} \right\} \quad (6)$$



(6) -ის მიმართ შეიძლება გამოვიყენოთ ძირის გამორიცხვის მეთოდი, რომელიც მოცემულია /1/-ის § 5-ში (გვ. 59) . მაშინ მივიღებთ პარაქსიალური (ანუ იწვძელი) უღებრობული სხივის განტოლებას ცილინდრული უღებრობისგანკვეთი ღიზბაში:

$$y'' + \frac{\Phi'(z)}{2\Phi(z)} y' + \frac{\Phi''(z)}{2\Phi(z)} y = 0 \quad (7)$$

(7) -ის საფუძველზე, ისევე, როგორც /1/ -ში (გვ. 58-60) გამოიყენება ასეთი ღიზბის რვეუკური ძალი:

$$\begin{aligned} \frac{1}{f_{1,2}} &= \mp \frac{1}{2\sqrt{\Phi(z_{1,2})}} \int_{z_1}^{z_2} \frac{\Phi''(z)}{\sqrt{\Phi(z)}} dz = \quad (8) \\ &= \mp \frac{1}{4\sqrt{\Phi(z_{1,2})}} \int_{z_1}^{z_2} \frac{[\Phi'(z)]^2}{[\Phi(z)]^{3/2}} dz \end{aligned}$$

რომელიც ფაქტურად ემთხვევა /2/ -ში მოცემული მუდებს (გვ. 106), რადგან ღიზბის გარეშე (ე.ი.  $z \leq z_1$  და  $z \geq z_2$ ) უღი არ არსებობს.

ახლა განვიხილოთ მაგნიტური ცილინდრული უღებრობული ღიზბა (აქაც ვთვლით, რომ უღიის  $x$ -მიღებელი არ არსებობს,  $H_x = 0$ ).

რადგან ვაკუუმში გვაქვს, ამიტომ

$$\vec{H} = \text{rot } \vec{A}, \quad (9)$$

ანუ /3/

$$H_x = \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}; \quad H_y = \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}; \quad H_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \quad (10)$$

გვენი ღიზბის ბრწყელო მაგნიტური უღისსათვის

$$\frac{\partial A_z}{\partial x} = \frac{\partial A_y}{\partial x} = 0; \quad H_x = 0; \quad \frac{\partial H_z}{\partial x} = \frac{\partial H_y}{\partial x} = 0. \quad (11)$$



(10) -ის ԲԱ (11) -ის ԹԱՆԱԽՄԱՐ

$$H_x = 0; \quad H_y = \frac{\partial H_x}{\partial x}; \quad H_z = -\frac{\partial H_x}{\partial y} \quad (12)$$

Բայց ընդհանուր դեպքում ինտեգրելով ստանում ենք -  
 քայլի 1 ընտրված սեղան:

$$\text{rot } \vec{H} = 0,$$

սեղանը ստանում է

$$\frac{\partial H_x}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} = 0; \quad \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = 0; \quad (13)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = 0.$$

(11) -ի ԹԱՆԱԽՄԱՐ (13) -ից ԵՐԱԿՐԵՎ ՄԻՆՈՐՈՒՄ 1 ընտրված,  
 համաձայն (12) -ի ԹԱՆԱԽՄԱՐ ՍԵՂԱՆԱԽՄԱՐ ՈՐԸՆՑ:

$$\frac{\partial^2 H_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 H_x}{\partial z^2} = 0. \quad (14)$$

Չեղծելով (14) -ի ստանդարտ մեթոդով ստանում:

$$H_x(y, z) = f_1(z)y + f_3(z)y^3 + f_5(z)y^5 + \dots \quad (15)$$

Բացված (15) (14) -ի:

$$(f_1'' + 6f_3)y + (f_3'' + 20f_5)y^3 + \dots = 0 \quad (16)$$

(16) -ի մասնաձեռնարկից Բայց չենք ԵՐԱԿՐԵՎ ՄԻՆՈՐՈՒՄ, համ

$$f_1'' + 6f_3 = 0; \quad f_3'' + 20f_5 = 0; \quad \dots \quad (17)$$

հարկավոր Բայց ընտրված ընտրված ընտրված ընտրված ընտրված, ԵՐԱԿՐԵՎ, ԵՐԱԿՐԵՎ

Չեղծելով ընտրված ընտրված ընտրված (15) Բացված (12) -

ից ԵՐԱԿՐԵՎ, համ  $y=0$ . ընտրված

$$f_1(z) = -H_z(0, z) = -H_0(z), \quad (18)$$



სადაც  $H_0(z)$  მატრიცური ველის რადიკალიზირებული  
 მათ სიმეტრიის ღერძის ტანჯრივ. ეს ტანჯრივდაც უქსპერი-  
 მენტულია ტანისაბოლოვება (მატრიცა. /2/, § 1.4). (18) -  
 ის ტანჯარიტინებში (17) -რან ტუქვს

$$f_3(y) = \frac{1}{6} H_0''(z); \quad f_5(z) = -\frac{1}{120} H_0^{(iv)}(z); \dots$$

ე.ი. (15) მიიღებს სახეს:

$$H_x(y, z) = -H_0(z)y + \frac{1}{6} H_0''(z)y^3 - \frac{1}{120} H_0^{(iv)}(z)y^5 + \dots$$

პარაქსიარული ვლუტინიტი სხივისათვის

$$H_x(y, z) \approx -H_0(z)y. \quad (19)$$

(12) -ის რა (19) -ის ტანახმარ ველის მრეწარები

$$H_x = 0; \quad H_y = -H_0'(z)y; \quad H_z \approx H_0'(z) \quad (20)$$

ამ ვეში ვლუტინიტი მოქმედი ტარა

$$\vec{F} = -e[\vec{v} \vec{H}],$$

ანუ

$$F_x = -e(yH_z - zH_y); \quad F_y = -e(zH_x - xH_z);$$

$$F_z = -e(xH_y - yH_x) \quad (21)$$

(12) -ის ტანახმარ (21) მიიღებს სახეს:

$$\left. \begin{aligned} F_x &= e \cdot y \frac{\partial H_x}{\partial y} + e \cdot z \frac{\partial H_x}{\partial z} - e \cdot x \frac{\partial H_x}{\partial x} = e \frac{dH_x}{dt} \\ F_y &= -e \cdot x \frac{\partial H_x}{\partial y}; \quad F_z = -e \cdot z \frac{\partial H_x}{\partial z} \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

რადიან

$$F_x = m\ddot{x}; \quad F_y = m\ddot{y}; \quad F_z = m\ddot{z},$$

ამიტომ

$$\ddot{x} = \eta \frac{dH_x}{dt}; \quad \ddot{y} = -\eta \dot{x} \frac{\partial H_x}{\partial y}; \quad \ddot{z} = -\eta \dot{x} \frac{\partial H_x}{\partial z};$$

$$\eta = \frac{e}{m}. \quad (23)$$

(23) -ის I განტოლების ინტეგრირება გვაძლავს

$$\dot{x} = \eta H_x, \quad (24)$$

რადიან სასაბურთო პირბრუნვის სათანადო შერჩევით შეიძლება ინტეგრირების მუშაობა ნულს გადატოვოთ. ჩვენთან (24) (23) - ის II და III განტოლებებში:

$$\ddot{y} = -\frac{\eta^2}{2} \frac{\partial H_x^2}{\partial y}; \quad \ddot{z} = -\frac{\eta^2}{2} \frac{\partial H_x^2}{\partial z}. \quad (23')$$

(19) -ის მანახნა

$$H_1^2 = H_0^2(x) y^2; \quad \frac{\partial H_x^2}{\partial y} = 2y H_0^2(x); \quad \frac{\partial H_x^2}{\partial z} = 2y^2 H_0'(z) H_0'(x). \quad (24')$$

პარაფსილური სხივისათვის  $y \gg y^2$  და (23') მიიღებს სახეს:

$$\ddot{y} \approx -\eta^2 y H_0^2(x); \quad z = 0 \quad (25)$$

(25) სისებრიდან ერთის გამორიცხვას ვახდენთ ისევე, როგორც 6) სისებრიდან, და მივიღებთ ასეთ ველში პარაფსილური უაქრონული სხივის განტოლებას:

$$y'' + \frac{\eta H_0'}{2 H_0} H_0^2(x) = 0, \quad (26)$$

სადაც  $H_0$  შეიძლება ჩავთვალოთ უდრეობრივად პარაფსილურ დასაბურთო. (26) განტოლების ინტეგრირების საშუალება უცვლელად გვქონდა.



հրշեղի ժառանգորդի ճաղերուն լուծման հարցը ժառանգ (ոնցք, հոտորակ 6-ժո /1/-րան) :

$$\frac{1}{f} = \frac{\eta}{2U_0} \int_{z_1}^{z_2} H_0^2(z) dz.$$

հարցան լուծման ժառանգ ( $z \leq z_1$ , քան  $z \geq z_2$ ) չորս առաջնայն, սնունդն յն ժամանակը զայնորսը յմեծընթաց սնունդն ժամանակընթաց (1/2, մ. 107).

Ծրարանընթաց 29.X.1986

հարողորդն յն յնթարթ

Լուծողորդ

1. В.И. Гапонов, Электроника, часть I, Госуд. изд-во физ.-мат. литературы, Москва, 1960.
2. А.А. Лигарев. Электронная оптика и электронно-лучевые приборы, "Высшая школа", Москва, 1972.
3. И.Н. Бронштейн, К.А. Семендяев. Справочник по математике, "Наука", Москва, 1965.

М.Ш. Кобахидзе, И.Д. Кгенти, С.С. Иаганашвили

К ТЕОРИИ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОННЫХ ЛИНЗ

Резюме

Достаточно строго обоснованы выводы уравнений параксиальных (осевых) электронных лучей в цилиндрических электронных линзах (с электростатическим и магнитным управлением лучей). На основе этих уравнений вычислены оптические силы линз.

M.Kobakhidze, L.Zhgenti, S.Iaganashvili

ON THE THEORY OF CYLINDRICAL ELECTRON LENSES

Summary

Fairly strict theoretical proof of the derivation of paraxial (axial) electron ray equations in cylindrical electron lenses in the case of electrostatic and magnetic control of the rays is given. The optical strengths of these lenses are calculated on the basis of these equations.



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
государственного университета

თბილისის შრომის ნიჭური პროშის მრეწობასანი სახელმწიფო  
უნივერსიტეტის შრომები

271, 1987

ქვემოთა დათვლილი მასალის დათვლილი მათა-  
სადავოს სავაჭარო ანალიზის მეთოდთა შედეგთ

ბ. კერესელიძე, თ. მათაშვილი, ვ. მაყაბერიძე,  
ნ. მისაშვილი, ბ. შარაძე

დოკუმენტის მატრიცური ველის რეალური პრესაციების  
დაკვირვება არაფორმალურ შესაძლებელია ნებისმიერ სიტუაციაში.  
მათი პერიოდების რეალური მონაცემს დაახლოებით  $1 \div 1000$  წმ-ს.  
უქსპერიმენტული მონაცემების დახამარ, პრობს ამ ინტერვალში  
გამოიყოს ვინაშე შედეგები, რომლებიც შეესაბამებოდნენ მოკლე  
პერიოდთან (pc 1,2), საშუალო პერიოდთან (pc 3,4) და გრძელ-  
პერიოდთან პრესაციებს (pc 5,6). უკანასკნელი ტიპის პრესაცი-  
ათა პერიოდების რეალური ყველაზე ფართა -  $200 \div 1000$  წმ.  
ბუნებრივია, რომ გრძელპერიოდური პრესაციები შეიძლება ჩაით-  
ვალოს დოკუმენტური ველის რეალური რევევების ძირითადი  
ნაპ.

უქსპერიმენტული კვლევათა შედეგები გვიჩვენებენ, რომ  
სხვადასხვა ტიპის დოკუმენტური პრესაციების გენერაციის ნაშრო  
შესაძლებელია დაკავშირებული იყოს დოკუმენტის იონისაგან, ში-  
და მატრიცისაგან, პირდაპირ კანკერში ან მატრიცისაგან სასა-  
ბერო არეგებში მიმდინარე პროცესებთან. ეს, ბუნებრივია, არა-  
ღებს პრესაციათა შექანიშობისა და მათი ნაშროს აღიარებულად.







[1] ნაშრომში განხილულია მაგნიტოსფეროს რაშის მხარის /მაგნიტოსფეროს კუბი/ მოძველი. მაგნიტოსფერო მიჩნეულია ცილინდრული ფორმის მქონე სხეულად, რომლის რადიუსი და სიგრძე ახლოსაა მაგნიტოსფეროს ხაზოვან მახასიათებელთან. მაგნიტოსფეროპირამიდალურ განსაზღვრებას განივი კვეთის სისტემის ამოხსნის შედეგად, მცირე მუდგომებების შემთხვევაში მიიღებულია ობსკურული განსაზღვრა, რომლის საშუალებითაც ისამოქმედება პლაზმური ცილინდრის რხევის საკუთარ სიხშირეზე საკუთრივ:

$$\omega^2 = \frac{k^2}{4\pi} \left[ \frac{H_e^2}{\rho} - \frac{H_e^2}{\rho} \frac{I_m(kR)}{I'_m(kR)} \frac{k'_m(kR)}{k_m(kR)} \right], \quad (1)$$

სადაც  $k = n\pi/\ell$  ( $n=1,2,\dots$ ),  $\ell \approx 150 \div 200 R_E$  - ცილინდრის სიგრძეა,  $R = 15 \div 200 R_E$  - ცილინდრის რადიუსია /  $R_E$  - დედამიწის რადიუსი/,  $\rho$  - მზის უარის სიმკვრივე,  $I_m$  და  $k_m$  - ბესელის პირველი და მეორე კლასის მიმდებარეობის ფუნქციები ( $m=0,1,\dots$ ) [8].

$\rho$  -ს რეალური მნიშვნელობებისა და პლაზმური ცილინდრის საკუთარი რხევების ძირითადი პერიოდი  $T \approx 2000 \div 2500$  მკ.

რატომ (1) ფორმულიდან ჩანს, ცილინდრის საკუთარი რხევის რანგობრივი ფუნქციის შესაბამისი პერიოდები განკვეთილი შეიძლება არიან დაკავშირებული ძირითადი ფუნქციის პერიოდთან და შეიძლება არაფერი უკავია ვერც რაიმე გეომეტრიკული პრესტიჟების შესაბამის ძირითად მუდგომებს.

განსხვავებით [1] ნაშრომისაგან [2] -ში მოცემულია თორნიული მოძველი, რომელიც განახლებადებს მაგნიტოსფეროს რიხსა და რაშის მხარეების საკუთარ პირამიდურ რხევებს. მაგნიტოსფეროს რიხს მხარე გამოკვეთილია სფეროსთან, ხოლო რაშისა-





სადაც  $c$  - ბრუნვის უղղსობის რივი ნახევარღრუბოა,  
 $E(\xi) = \int_0^{\xi/2} (1 - e^2 \sin^2 t)^{1/2} dt$  - მეორე კუარის სრული უղղსობის  
 ინტეგრალი,  $H_0$  - მაგნიტური ველის რაძაბულობა მაგნიტოსფეროს  
 საბჭუარბე,  $d$  - უღღსობის ფოკუსთაბორისო მანძილის  
 ნახევარი,  $\xi = \frac{d}{c}$ ,  $\xi_0, T_0$  - ფიქსირებული უღღსობაღღური კო-  
 რდინაღღები,  $P_n^m(\xi_0)$  - ლეჟანდრეს სფერული ფუნქციები. მე-(3)  
 ფორმულის მეშვეობით შესაძლებელია, მაგალითად მე-(2) - რან  
 მიღებული შედეგების რაბუსღღება, რადგანაც ბრუნვის უღღსობის  
 უფრო ახლოა მაგნიტოსფეროს რლის მხარის რვალურ ფორმასთან,  
 უფრო სფერო. ამ ბრით მიღებულია, რომ განვიღღის მიხედვით  
 მაგნიტოსფეროს რლის მხარის საკუთარი რხვევების ძირითადი ფი-  
 ზის პერიოდი უნდა იმყოფებოდეს შესაღღებო 210 < T < 310 წმ.

არანაკლებ საინტერესოა ფიქციური რივიანი კომპანი-  
 ტური პულისაციების კენერაციის კრევე ურთი მექანიზმი, რომლის  
 თანახმადაც, ისინი შეიძლება წარმოადგინებენ მზის უარისა რა  
 მაგნიტოსფეროს ურთიერთმედეების რრის აღღრული მაგნიტოსფეროს  
 იძულებითი პირთმექანიკური რხვევების შედეგს / 4/. ასეთი მო-  
 საბჭრება ემიგრება პირთმედეამიკაში კარგად ცნობილ ეფექტს, რომელიც  
 რადიობრება სფერული ან ცილინდრული ფორმის მექნივ სხვე-  
 რის სიღბის უსაბჭრეო ჭაღრიტ ვარსკენის რეჟიმის მიკვეთნი ცვე-  
 რების რრის. ამ ეფექტის თანახმად რნივების სიჩქარის ბრდისას  
 სიღბის რადინარული სფერული ურევეტად ვადარის ფორბუღენფორ-  
 ბი საშუაღღეო, ე.წ. კვამიპერიოდული რეჟიმის ვაღრიტ. კვამიპე-  
 რიოდულ რეჟიმში სხვერის მახლობლად წარმოიქმნება მსხვილმასშტა-  
 ბოვანი ტრიაღღები, რომლებიც იწვევენ პულისაციებს სიღბის სასა-  
 ბჭრეო ფუნაბი. ამ პულისაციათა პერიოდები რამოკრებულია სიღბის  
 რნივების სიჩქარებე რა სხვერის ხაბჭვან ბომებე. აღნიჩნდა, რომ



სტრუქტურული ან ცილინდრული ფორმის მქონე ნებისმიერი ზომის სხეული-  
 საბუნების მექანიკაში ძალზე მარტივად განისაზღვროს სიხვედრი აქტიური  
 პულსაციების პერიოდი. ამისათვის გამოიყენება განუზომელი პარ-  
 ამეტრიული კრიტერიუმი, ე.წ. სტრუხალის რიცხვი /7/:

$$St = \frac{d}{V_0 T_0},$$

სადაც  $d$  - სხეულის ხაზოვანი ზომაა /სტრუქტურის ან ცილინდრის დიამეტრი-  
 ტიპის რადიუსი/,  $V_0$  - სიხვის ჭაღის სიჩქარე სხეულთან  
 ურთიერთქმედებაში,  $T_0$  - პულსაციის პერიოდი.

ცდების საშუალებით დაკვირვა, რომ კვაზიპერიოდული რიგ-  
 ბის რეჟიმში, ნებისმიერი ზომის სტრუქტურის ან ცილინდრის გარსების  
 რრს /უკანასკნელის გარსებზე ხდება მისი მსახველის მარტოველი  
 მიმართულებით! /  $St \approx 0,2$ . ეგრეთობა რა ამ მდგომარეობაში, მუ-  
 რაშიც აკორმა მუდამა მატრიცისფორმის შესაძლებელი იძულები-  
 თი რხევების ძირითადი პერიოდის სიდიდე. ესაიო ასეთი მისაზრე-  
 ვა ეგრეთობა პიპოტეზას მატრიცისფორმის საბუნების ელასტიკობის  
 შესახებ. ნინალომეგ შემთხვევაში, პულსაციები იაკვებებდნენ  
 მხოლოდ მისი ქარში. ამრიგად, თუ ჩავთვლით, რომ მატრიცისფორ-  
 მარტობავენ ცილინდრს, რომლის რადიუსი  $20 \div 25 R_E$  -ს ტო-  
 ლია, მისი ქარის სიჩქარის ნორმალური მნიშვნელობისათვის  $V_0 =$   
 $= 400$  კმ/წმ,  $St = 0,2$  შემთხვევაში მივიღებთ  $T_0 \approx 1800 -$   
 $- 2400$  წმ.

ნაშრომში /5/ კვლავ გამოიყენებულა მატრიცისფორმის  
 საბუნების მსიხობისაშეობიანი ტრიგონომეტრიული პიპოტეზა,  
 რომელიც, /4/-ისაგან განსხვავებით, სტრუხალის რიცხვის მნიშვნე-  
 ლობა მატრიცისფორმისათვის ამოცანის საძებნ ელემენტს ნარტიბავენს.  
 საიმე იშავია, რომ აკორმა აზრით, არ შეიძლება მატრიცისფორმის  
 მუდამური გამოყენება მკარ სხეულთან, განუზომელი იმისა, იქ-

ნება იგი სჭირდებათ თუ ცილინდრული ფორმის. როგორც აღვნიშნეთ, მაგნიტოსფერო წარმოადგენს უკანასკნელ სხეულს, რომელიც სისფრ-მაგნიტო იცვლის ხაზოვან მოძებს მისი ქარის პარამეტრების ცვლილებას. სტრუბადის რიცხვის შესაძლებელი მნიშვნელობათა რიგობისას დასაბუთება /5/-ში გამოყენებული იქნა ევდამინის მაგნიტური ველების სწრაფი ჩანაწერები  $S^t$  იმპულსების /უკუ-არი სანების იმპულსი/ ერთს ეუშეების გეომაგნიტური ობსერვატორიის მასალებიდან. ფიზიკური მოსაბრუნებელი, სწორედ  $S^t$  იმპულსების გეომაგნიტობისას უნდა იყოს მათი მთავარი აღმართი მისი ქარის რიგების პირობითი ფორმის ცვლილება და შესაბამისად, მაგნიტოსფეროს იძულებითი პირობითი კური რხევების გენერაცია. ექსპერიმენტული მასალის ანალიზმა აჩვენა, რომ  $S^t$  იმპულსების ერთს მაგნიტოტრაქამებზე ცხადად გამოიყვანა პულსაციები პერიოდები  $T \geq 360$ , რომლებიც უნდა წარმოადგენდნენ მაგნიტოსფეროს იძულებითი რხევების შედეგს /5/-ში გამოყენებული მეთოდის საფუძველზე, ყოველი კონკრეტული  $S^t$  იმპულსისათვის, რომელსაც თან ახლავდა გეომაგნიტური პულსაცია, განსაზღვრული იქნა მანძილი მაგნიტოსფეროს შუბლი წერტილსა და ევდამინის შორის, რომელიც მიჩნეული იქნა მაგნიტოსფეროს ხაზოვან მახასიათებლად. ამის შემდეგ, მისი ქარის სიჩქარის მონაცემთა საფუძველზე, განსაზღვრული იქნა სტრუბადის რიცხვის მნიშვნელობათა რიგობის, რომელიც შეესაბამებოდა მაგნიტოტრაქამებზე ახდელი პულსაციის პერიოდებს. ამრიგად, მიღებული იქნა, რომ მაგნიტოსფეროსათვის  $S^t = 0,3 \pm 0,02$ .

ჩვენის აზრით, არსებობს საშუალება, რათა ექსპერიმენტულად შევძლებდეთ გეომაგნიტური მაგნიტოსფეროს საკუთარი თუ იძულებითი პირობითი კური რხევების მოძებების ძირითადი შედეგ



გუნის რეაღრობა. მიგვაჩნია, რომ გარდა ტრძეპეროპიანი პუ-  
 საცივიზის შესაბამისი რჩოთი ინტრვალის პაპგენისა, ავციღებუ-  
 რია პუტსაციოთა სპეჭრის რისკრეჭლოზის ექსპერიმენტიული რასა-  
 ბუთობა მაცნიტრამივიზის სპეჭრადური ანალიზის საჭუძვეღებ/.  
 ამ მიზნი მიფიარტეე რუშეითს გუომატნიტური რბსერვატორიის მი-  
 ნაცვივბს, რომელთა რასამიშეავებლარ ტამოტყყენუთ სპეჭრადური  
 ანალიზის ე.წ. ბლევიენ-ტოუკის რა მარსიმალური ენტროპიის მი-  
 ლოგეზი /9/. შერჩეული ექსპერიმენტიული მასალა შეუსაბამივოპა  
 მაცნიტურად ნყნარ რლეებს ( $\sum K_p = 22, 20, 17$ ) რა შეიციავრა  
 რეპამინის მაცნიტური ველიის პორიზონტალური (H) მერენჯლის  
 სნრატყარ მტრძნობიარე ჩანანტრებს ( $V \sim 60$  მმ / სმ,

$$E_H = 0,3 HT / \text{მმ.} \quad \text{შერჩეული მონაცემთა მასივო რამუ-}$$

შეადა ეტმ-ჭე სპეციადური პრეტრამის მიხვეკოთ. ტანტობილოთ რე-  
 ტალურად შესრუღებული შრომის რიპიკური ნინამძღვრები.

მეცემული ნამშრომის ევაკუთხეპრია პიპოტეპა, რომლის ტანახ-  
 მარაც გუომატნიტური პუტსაცივიზი, მათ შორის ტრძეპეროპიანი პუტ-  
 საცივიზი, ნარმოარგენერ მაცნიტოსტეროს საკუთარი პიპოტეპანკური  
 რბევეზის ტამოვიღნივბასამ პიპოტეზის მიხვეკოთ რეპამინის მაცნი-  
 ტური ველიის ჩანანტრები არაცხარე სახიო უნრა შეიციავენერ გუომატ-  
 ნიტურ პუტსაცივიზს, მამინაც კი, რეცა ისინი უშეაღოპ არ სჩანან  
 მაცნიტრამივიზე. ეს ნიშნავს, რომ მაცნიტური ჩანანტრის რურიე  
 ნარმოარგენა პუტსაცივიზის შესაბამის სიხშირეებს უნრა შეიციავრეს  
 ტარირებული ნოთი. ცხარია, ეს ნოთევი შეიციავბა იცჯეპოტენერ ტარ-  
 კვარე ტარჯევიში მაცნიტოსტეროს რრმის რლეამური ცჯიღევიზის ტა-  
 მი.

მანქანური ანალიზისაღვის აღებული რენა 1985 წ. 9-11  
 სეჭევიზრის ჩანანტრები, რომელვიც აკმატოტვიღებენერ შერჩევის რი-  
 ტურიუბს. მაცნიტური ველიის ათვიის სიბჟსტე შეარგენრა 0,5 HT/მმ,



ըրևում է ընդհանուր սովորածը  $\pm 90$  ԵՑ. սմրի ճար, բացարձակ ուղղությամբ  
 շրջի շրջապատի սահմանի սահմանափակումը  $4 \div 5$  ԵՊՊ  
 մեղի շրջանակի միջին շրջանակների ճշգրտության ճանաչողական  
 մասնագիտական համաձայնության գործընթացում. սնունդի սահման  
 ճանաչողական ուղղությամբ սահման սահմանի միջին մասնագետ, հո-  
 մեղա ժողովի ճանաչողական ճշգրտության 40 ԵՊՊ. սնունդի ճանաչող-  
 ական ուղղությամբ սահմանափակումը ճանաչողական ճանաչողական ճ-  
 անաչողական մասնագետների ճանաչողական սահմանափակումը ճանաչող-  
 ական ճանաչողականում.

Միջանկյալում ունենալ, հոմեոստատիկ ճանաչողական ճանաչողական  
 միջանկյալում ճանաչողական մասնագետների ճանաչողական ճանաչողական  
 ճանաչողական, ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական  
 (P 3,4) ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական. սնունդի ճանաչող-  
 ական ճանաչողական, մասնագետների ճանաչողական ճանաչողական  
 ( $V = 15$  ճանաչողական,  $E_H = 0,10$  ճանաչողական) ճանաչողական.

Միջանկյալում ճանաչողական ճանաչողական, հոմեոստատիկ:

ճանաչողական մասնագետների ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական  
 ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական  
 50-60 ԵՊՊ, 25-30 ԵՊՊ, 15-18 ԵՊՊ, 8-10 ԵՊՊ, 6-7 ԵՊՊ և 4-5 ԵՊՊ-  
 ան ճանաչողական / ճանաչողական.1/. հոմեոստատիկ ճանաչողական ճանաչողական  
 ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական, ճանաչողական ճանաչող-  
 ական ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական  
 60-90 ԵՊՊ, 40-50 ԵՊՊ, 30-35 ԵՊՊ և 15-20 ԵՊՊ-ան ճանաչողական ճանաչող-  
 ական / ճանաչողական.2/.

սմրի ճար, սմրի ճար, հոմեոստատիկ ճանաչողական ճանաչողական  
 ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական  
 ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական  
 ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական ճանաչողական







- I. А.И. Ершкович, А.А.Нусинов. Сб. "Межпланетная среда и физика магнитосферы". М.: "Наука", 1972.
2. А.И.Гвелесиани, З.А.Кереселидзе. Сообщ. АН ГССР, 101, 2, 1981.
3. А.И.Гвелесиани, З.А.Кереселидзе, А.Г.Хантадзе. Труды ТГУ, "Физика", Изд-во ТГУ, № 15, 36, 1983.
4. T.Obayashi. Rep. Ionosph. Space Res. v.21, 3, 137, Japan, 1967.
5. З.А.Кереселидзе, В.Ш.Орвелишвили. Геомagnetизм и аэрoнoмия, 26 (в печати).
6. Л.Д.Ландау, Е.И.Лифшиц. Механика сплошных сред. М.: Гос-техиздат, 1953.
7. Л.Г.Лойцянский. Механика жидкости и газа. М.:Нука", 1973.
8. З.А.Кереселидзе. МГД эффекты конечной электрической проводимости солнечного ветра вблизи магнитосферы Земли. Изд-во Изд-во ТГУ, 1986.
9. Г.Дженкис, Д.Ваттс. Спектральный анализ и его приложения, вып.1,2. М.: "Мир", 1971-1972.
10. А.Л.Крылов, А.Е.Лифшиц, Е.Н.Федоров. Геомagnetизм и аэрoнoмия, 20, 689, 1980.
11. А.Д.Чертков. Солнечный ветер и внутреннее строение Солнца. М.: "Наука", 1985.



З.А.Кереселидзе, Т.Г.Матиашвили, В.С.Манаберидзе, Н.В.Мосаш-  
 вили, З.С.Шарадзе

НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА ГЕОМАГНИТНЫХ  
 ДАННЫХ ДУШЕТСКОЙ ГЕОФИЗИЧЕСКОЙ ОБСЕРВАТОРИИ

Резюме

Методами Блекмена-Тюка и максимальной энтропии проведен спектральный анализ нормальных и быстрых записей магнитного поля, полученных в Душетской геофизической обсерватории. После обработки данных, соответствующих спокойным магнитосферным условиям, определены основные частоты колебаний геомагнитного поля. В этом спектре частот четко видны максимумы, соответствующие пульсациям Pc 3-6. Показано, что результаты проведенного спектрального анализа магнитограмм можно использовать для проверки состоятельности различных теоретических моделей генерации длиннопериодных геомагнитных пульсаций.

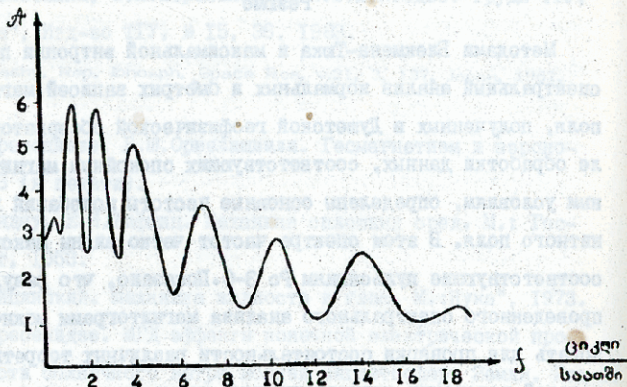
Z.Kereselidze, T.Maliashvili, V.Matsaberidze, N.Mosashvili,  
 Z.Sharadze

SOME SPECTRAL ANALYSIS RESULTS OF THE GEOMAGNETIC DATA OF THE DUSHETI GEOPHYSICAL OBSERVATORY

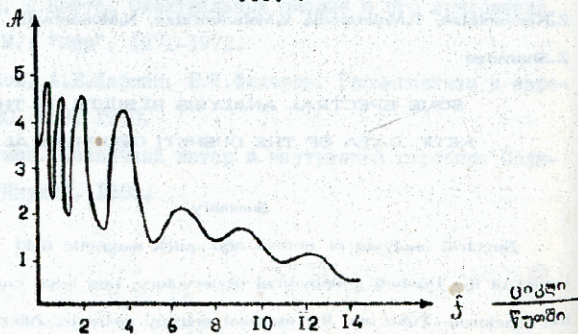
Summary

Spectral analysis of normal and quick magnetic field records, obtained at the Dusheti geophysical observatory, has been carried out by the Blackman-Tukey and the maximal entropy methods. After processing the data corresponding to quiet magnetosphere conditions, the main oscillation frequencies of the geomagnetic field were determined. Maxima corresponding to the pulsations of Pc 3-6 are clearly seen in this frequency

spectrum, it is shown that the results of the spectral analysis of magnetograms may be used to verify the tenability of various theoretical models of the generation of long-period geomagnetic pulsations.



ნახ. I.



ნახ. 2.



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
государственного университета

საქართველოს სახელმწიფო უნივერსიტეტის  
უნივერსიტეტის შრომები  
271, 1987

О МЕТОДАХ ОЦЕНКИ ДОСТУПНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ В  
АТМОСФЕРЕ И ВОЗМОЖНОСТИ ЕЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ЦЕЛЯХ  
ПРОГНОЗА

З.В.Хведелидзе, П.Д.Джанелидзе

Исследование энергетики атмосферных процессов относится к числу наиболее важных направлений современной физики атмосферы. Изучению энергетики атмосферы отводится большая роль в решении задач прогноза погоды, в том числе долгосрочного прогноза. Очевидна важность знания энергетических характеристик при построении модели общей циркуляции атмосферы.

В процессах общей циркуляции атмосферы наибольшую роль играют кинетическая энергия  $KE$ , гравитационная потенциальная энергия  $PE$  и внутренняя энергия  $IE$ . В условиях гидростатического равновесия  $PE$  вертикального столба воздуха пропорциональна  $IE$  и полезно объединить внутреннюю энергию с гравитационной потенциальной энергией и ввести понятие полной потенциальной энергии  $TPE$  как суммы  $PE$  и  $IE$ , что и было сделано еще в 1903 г. Маргулесом. Маргулес показал, что только какая-то часть  $TPE$  может быть превращена в  $KE$ . Эту часть он назвал доступной кинетической энергией. Названия это не отражает существа энергетических преобразований



в атмосфере. К тому же эта энергия относится скорее к потенциальной энергии, чем к кинетической. Лоренц вновь ввел понятие энергии, доступной для превращения в кинетическую, но уже под названием доступной потенциальной энергии. Таким образом, полная потенциальная энергия разделяется на доступную потенциальную энергию APE и недоступную потенциальную энергию UPE.

В обратимых адиабатических процессах, приводящих к превращению TPE в KE, сохраняется потенциальная температура каждой частицы воздуха, и поэтому сохраняется статистическое распределение потенциальной температуры. Среди таких гипотетических состояний атмосферы, которые обладают таким же статистическим распределением потенциальной температуры  $\theta$ , как и реальное состояние, имеется одно, которое обладает наименьшей TPE и принимается обычно за эталонное. Согласно Лоренцу /1/, недоступная потенциальная энергия UPE любого состояния атмосферы определяется как TPE соответствующего эталонного состояния. А доступная потенциальная энергия APE определяется как превышение TPE над UPE.

Обратимые адиабатические процессы, приводящие к превращению TPE в KE, не изменяют эталонного состояния, и, следовательно, не влияют на UPE. Поэтому скорость превращения TPE в KE, эквивалентна скорости превращения APE в KE. APE является мерой части TPE, способной к превращению в KE. Отсюда и возник термин "доступная потенциальная энергия".

Нахождение величины APE включает в себя и определение эталонного состояния. В литературе указываются методы выбора такого состояния, причем все они основаны на различных физи-



ческих предпосылках. Для эталонного состояния изобарические и изэнтропические поверхности совпадают с изгеопотенциальными поверхностями. Это состояние наиболее удобно описывается в системе координат, в которой в качестве вертикальной координаты используется потенциальная температура, а также в Б - системе координат, которая имеет некоторые преимущества при составлении численных прогнозов метеорологических элементов /6/.

В условиях гидростатичности запасы потенциальной и внутренней энергии в столбе всей атмосферы с единичным сечением равны:

$$PE = R \int_0^{\infty} \rho T dz; \quad IE = c_v \int_0^{\infty} \rho T dz.$$

Полная потенциальная энергия

$$TPE = PE + IE = c_p \int_0^{\infty} \rho T dz,$$

где  $\rho$  - плотность воздуха,  $T$  - абсолютная температура,  $R = c_p - c_v$  - газовая постоянная,  $c_v$  и  $c_p$  - удельные теплоемкости при постоянном объеме и давлении соответственно.

Введя потенциальную температуру  $\theta = T \left( \frac{P_{00}}{P} \right)^{R/c_p}$ , где  $P_{00}$  - стандартное давление 1000 мб, получим следующее уравнение для TPE:

$$TPE = \frac{c_p}{g P_{00}^{\kappa}} \int_0^{P_{00}} \theta P^{\kappa} dP, \quad (I)$$

где  $g$  - ускорение свободного падения,  $\kappa = R/c_p$ .



Лоренц для атмосферы в целом получил уравнение для АРЕ:

$$A = \frac{c_p}{g P_{00}^{K(K+1)}} \int_S \int_0^\infty (P^{K+1} - P_{\chi}^{K+1}) d\theta ds, \quad (2)$$

где  $P_{\chi}$  - изобарический уровень, на который переходит атмосфера из начального уровня  $P$  после адиабатического достижения устойчивого гидростатического состояния.

Эта формула требует использования  $\theta$  - координатной системы. Поэтому свойства атмосферы, связанные со значительным количеством АРЕ, с помощью (2) не могут быть отчетливо выявлены. Разработан ряд приближенных выражений, первоисточником которых является аппроксимация Лоренца

$$A = \frac{1}{2} c_p \gamma_a (\gamma_a - \bar{\gamma})^{-1} \bar{\tau}^{-1} \bar{\tau}''^2, \quad (3)$$

где  $\gamma_a$  - сухоадиабатический градиент температуры, волна ( $\sim$ ) означает осреднение по всей изобарической (или приблизительно горизонтальной) поверхности, величины с двумя штрихами означают отклонение от среднего.

Ван Мигем получил приближенную формулу АРЕ для сферической системы координат /2/:

$$A = \int_M \frac{1}{2} c_p \gamma T''^2 dm, \quad (4)$$

где  $\int \{ \} dm$  - интеграл по всей массе атмосферы.

$$dm = a^2 / g \cos \varphi d\lambda d\varphi dp.$$

Многие авторы /3, 7, 8/ изучают количественное изменение



запасов АРЕ для конкретных процессов. Наиболее детально изучены бюджет генерации АРЕ и ее превращение в КЕ в циклонических образованиях (см. /5/).

Представляет интерес оценить изменение запасов АРЕ в процессах синоптического масштаба. Нами поставлена задача о вычислении доступной потенциальной энергии для типичных процессов Закавказья с целью выяснить существует ли корреляционная связь между АРЕ или ее генерацией и типом процесса. Если такая связь будет обнаружена, то это даст возможность по значениям АРЕ определять вероятный тип развивающегося процесса, что будет содействовать улучшению качества прогноза.

Решение этой задачи связано с большими трудностями. Главные из них заключаются в следующем: 1) какую аппроксимационную формулу использовать для расчетов АРЕ и 2) на каком материале рассчитывать АРЕ. Начнем со второго. Большинство авторов для вычисления запасов АРЕ использует архивы многолетних наблюдений для полушария. При этом результаты осредняются по времени, часто и по широтному кругу. Такой подход нас не может устроить, т.к. в силу того, что результаты вычислений предполагается использовать в прогностических целях, то исходным должен служить тот материал, что и для составления "обычных" численных прогнозов. В оперативной работе Гидрометцентра Грузинского республиканского Управления по гидрометеорологии и контролю природной среды применяются численные схемы прогноза, которые в качестве начальных данных используют поля геопотенциальной высоты  $H$ , полученные путем объективного анализа. В частности схема, разработанная авторами Хведелидзе, Давиташвили,



Джанелидзе, использует поле АТ-500 в узлах квадратной сетки (количество узлов  $21 \times 21$ , расстояние между ними 300 км).

Поскольку при прогнозе метеосэлементов рассматривается область, через границу которой происходит вток и выток масс, то вообще говоря АРЕ не будет строго консервативной характеристикой устойчивости вычислительной процедуры. С этой точки зрения лучше использовать квазиинвариантный подход сохранения полной энергии.

Что же касается формулы, по которой будет считаться АРЕ, следует заметить, что в рамках одноуровневой численной схемы, какой является вышеуказанная, точное вычисление температуры и ее градиента практически невозможно, следовательно, необходима более простая формула. В предварительных расчетах для нескольких контрольных случаев (январь 1986 г.) нами были рассчитаны ТРЕ и КЕ на единицу площади:

$$TPE = \frac{M}{SN} \frac{C_p}{R} \sum_{i,j=1}^{21} \Phi_{i,j}, \quad (5)$$

$$KE = \frac{M}{SN} \sum_{i,j=1}^{21} \frac{U_{i,j}^2 + V_{i,j}^2}{2}, \quad (6)$$

где  $M \approx 5,15 \cdot 10^{17}$  кг - масса атмосферы,  $S = 5,1 \cdot 10^8$  км<sup>2</sup> - площадь поверхности Земли,  $N = 21 \times 21$  - число узлов сетки,  $\Phi = gH$  - геопотенциал,  $U$  и  $V$  - компоненты скорости ветра, рассчитанные по геострофическим соотношениям.

Доступная потенциальная энергия рассчитывалась по формуле:

$$\Delta = TPE^t - TPE^{t-\Delta t}, \quad (7)$$



где  $\Delta t = 24$  ч., т.е. под доступную потенциальную энергию принималось изменение полной потенциальной энергии за сутки. Для АРЕ в среднем получили  $ARE = 1,55 \cdot 10^6$  Дж/м<sup>2</sup>. Это значение меньше чем в /3,7,8/ (от  $1,57 \cdot 10^6$  до  $5,5 \cdot 10^6$  Дж/м<sup>2</sup>), что объясняется тем, что АРЕ в нашем случае считается не для всего атмосферного столба, а только до уровня 500 мб.

Разумеется, (7) не может считаться формулой вычисления АРЕ. Однако в контрольных расчетах с использованием (7) четко прослеживалась временная изменчивость АРЕ. Это в свою очередь дает основание думать, что корреляция между АРЕ и типом процесса, если таковая существует, может быть обнаружена и в случае применения формулы (7).

В дальнейшем предполагается применить многоуровневую численную схему прогноза с целью максимального точного вычисления АРЕ.

Поступила 10.XI.1986

Кафедра  
геофизики

#### Литература

1. Э.Н. Моренц. Природа и теория общей циркуляции атмосферы. Л., Гидрометеоиздат, 1970, 259 с.
2. Ж. Ван Микем. Энергетика атмосферы. Л., Гидрометеоиздат, 1977, 327 с.
3. Ю.В. Вакаляк. Об оценке доступной потенциальной энергии в изобарической системе координат. Изв. АН СССР, ФАО, 1980, № 4, с. 360-367.
4. М.В. Курганский. Об интегральных энергетических характеристиках атмосферы. Изв. АН СССР, ФАО, 1981, № 9, с. 923-933.



Khvedelidze, P. Janelidze

ABOUT THE METHODS OF ESTIMATION OF THE AVAILABLE  
POTENTIAL ENERGY (APE) AND ITS POSSIBLE USE IN  
WEATHER FORECASTING

Summary

Methods of estimation of available potential energy (APE) are considered. An approximate formula is adduced for calculating the (APE) in a circumscribed area. The possible use of the APE in weather forecasting is discussed.



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
государственного университета

თბილისის შრომის ნიშნის ტრადიციული სახელმწიფო  
უნივერსიტეტის შრომები  
271, 1987

К ИССЛЕДОВАНИЮ НИНОЦМИНДА-ПАТАРДЗЕУЛЬСКОЙ НЕФТЕНОСНОЙ  
ПЛОЩАДИ ГРАВИМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Г.Д.Манагадзе, Н.К.Качахидзе, Г.А.Кутелия, З.Д.Гецадзе,  
Р.Г.Манагадзе

Ниноцминда-Патардзеульская площадь, ввиду ее нефтегазо-  
носности, за последнее время становится объектом интенсивных  
исследований как для геологов, так и для геофизиков.

В связи с этим целью данной работы является выяснение  
возможности различных методов трансформации гравитационного  
поля с целью выделения локальных структур, перспективных на  
нефть и газ.

Для выделения локальных аномальных полей из наблюденно-  
го аномального поля исследуемой площади нами были применены  
различные методы трансформации, введенные в практику грави-  
разведочных работ:

Андреевым и Грифином /1/:

$$F[\Delta g(x, y, t)] = \Delta g(x, y) - \frac{1}{4} [\Delta g(x-t, y) + \Delta g(x+t, y) + \Delta g(x, y-t) + \Delta g(x, y+t)], \tag{1}$$

$$F[\Delta g(x, t)] = \Delta g(x) - \frac{1}{2} [\Delta g(x-t) + \Delta g(x+t)], \tag{2}$$



Розенбахом /2/

$$u_{zzz}(x, y, l) = (96g_0 - 12\bar{g}_e - 32\bar{g}_e\sqrt{2} + 8\bar{g}_e\sqrt{5}) / 24l^2 \quad (3)$$

$$u_{zzz}(x, l) = 10g_0(x) - 5,333[\Delta g(x-l) + \Delta g(x+l)] + \\ + 0,333[\Delta g(x-2l) + \Delta g(x+2l)], \quad (4)$$

Саксовым и Нигардом /2/

$$F[\Delta g(x, y, l)] = \frac{1}{e_2 - e_1} (\bar{g}_{e_1} - \bar{g}_{e_2}), \quad (5)$$

$$F[\Delta g(x, l)] = [\Delta \bar{g}_{e_1} - \Delta \bar{g}_{e_2}] / (e_2 - e_1). \quad (6)$$

в площадном и профильном вариантах соответственно.

Приведенные выше формулы (1-6) позволяют исключить из аномального поля  $\Delta g$  осложняющий интерпретацию региональный гравитационный фон, изменяющийся линейно /3/. Если в пределах исследуемого поля региональный гравитационный фон изменяется по полиному второй степени, тогда упомянутые методы не могут обеспечить полного разделения гравитационного поля.

Во избежание этого затруднения в условиях Ниноцинда-Патардзеульской площади совместно с вышеприведенными методами нами был применен метод локализации поля  $\Delta g$ , разработанный Р.Г. Манагадзе /4,5/.

Расчетные формулы метода, позволяющие исключить из наблюдаемого поля  $\Delta g$  региональный гравитационный фон, изменяющийся по полиному второй степени, опираются на двух- и четырехокружностные модификации при их симметричном расположении (рис. 1-а, б, в, 2-а, б, в) и для первой модификации

(рис. 1а, 2а) могут быть записаны в виде:

для двухокружностного

$$F[\Delta g] = \frac{1}{5} [\bar{g}_{(I)} - \bar{g}_{(II)}] - \frac{1}{4} [g_{(I)} - g_{(II)} - \Delta g(x - \frac{1}{2}l) + \Delta g(x + \frac{1}{2}l)], \quad (7)$$

для четырехокружностного

$$F[\Delta g] = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{5} [\bar{g}_{(I)} - \bar{g}_{(II)}] - \frac{1}{4} [g_{(I)} - g_{(II)} - \Delta g(x - \frac{1}{2}l) + \Delta g(x + \frac{1}{2}l)] + \frac{1}{5} [\bar{g}_{(III)} - \bar{g}_{(IV)}] - \frac{1}{4} [g_{(III)} - g_{(IV)} - \Delta g(y - \frac{1}{2}l) + \Delta g(y + \frac{1}{2}l)] \right\} \quad (8)$$

и для профильного вариантов

$$F[\Delta g] = \frac{1}{3} [\Delta g(x - \frac{3}{2}l) + \Delta g(x - \frac{1}{2}l) + \Delta g(x + \frac{1}{2}l)] - \frac{1}{2} [\Delta g(x - \frac{3}{2}l) + \Delta g(x - \frac{1}{2}l)] - \left\{ \frac{1}{3} [\Delta g(x - \frac{1}{2}l) + \Delta g(x + \frac{1}{2}l) + \Delta g(x + \frac{3}{2}l)] - \frac{1}{2} [\Delta g(x - \frac{1}{2}l) + \Delta g(x + \frac{3}{2}l)] \right\}, \quad (9)$$

где под  $l$  в площадных вариантах подразумеваются радиусы окружностей, а в профильных — расстояния между двумя точками отсчета по профилю,  $l_1$  и  $l_2$  — радиусы внутренних и внешних окружностей в площадном варианте и расстояния до внутренних и внешних точек в профильном варианте,  $g_0$  — значение аномалии силы тяжести в точке отсчета,  $g_{ср}$  — средние значения аномалии силы тяжести на соответствующих окружностях осреднения.

Формула (9) позволяет определить интересующие интерпретатора параметры аномальных тел в форме сферы горизонталь-



ного кругового цилиндра и горизонтальной материальной плоскости бесконечного простиранья. Она приведена в работах /4,5/.

После трансформации гравитационного поля были составлены карты трансформированных аномалий и проводилась их качественная интерпретация для определения местонахождения и конфигурации аномальных объектов.

Трансформированные поля аномалий, вычисленные по формулам Розенбаха и Андреева-Грифина (рис. 3,4), более чувствительны к локальным аномальным массам, расположенным в верхней части геологического разреза, и их глубинная характеристика примерно равна  $0,7 \ell / I /$ .

Поле, вычисленное по методу Саксова-Нигарда подчеркивает влияние локальных аномальных масс, расположенных в слое мощности  $\ell_2 - \ell_1$  с центром залегания на глубине  $(\ell_1 + \ell_2) : 2$ . Что касается трансформированного поля, полученного по формулам (7,8,9), то оно дает возможность оптимального исследования тех аномальных масс, которые расположены на горизонтальной плоскости, залегавшей на глубине  $\ell$  от поверхности наблюдения, так как в данном методе трансформация поля  $\Delta g$  осуществляется по окружностям, имеющим одинаковые радиусы /6/.

Трансформированные поля аномалий по Розенбаху и Андрееву-Грифину для малых значений параметра  $\ell$  в основных чертах схожи. Их качественное исследование позволяет сделать заключение, что в северо-западной и юго-восточной части исследуемой территории геологические структуры более плотно упакованы, а в юго-восточной и юго-западной частях - они



представлены в виде полос более спокойного характера (рис. 3, 4).

Так как метод Саксова-Нигарда позволяет сосредоточить внимание на определенном слое, полученное трансформированное поле локальных аномалий более сглажено (рис.5), а это означает, что перепад плотности в данном слое локальных структур носит спокойный характер.

Метод трансформации согласно формуле (7) по своей локализирующей возможности превосходит приведенные выше методы /6/. Поэтому, локальные структуры, залегающие на определенной глубине по горизонтальной плоскости, оказались оконтурены более четко (рис.6).

В будущем для детального изучения района целесообразно проводить дальнейшие исследования с целью установления оптимального значения параметра  $\ell$  для отдельных локальных объектов, что в комплексе с другими геолого-геофизическими представлениями исследуемого района даст дополнительную информацию о пространственном распределении структур, столь необходимых при выявлении направления будущих геолого-геофизических работ.

Поступила 1.XII.1966

Кафедра  
геофизики

#### Литература

1. Б.А.Андреев, И.Г.Клушин, Гостехиздат, 495 с., 1962.
2. Д.Г.Успенский, "Недра", 331 с., 1963.
3. Справочник геофизики, т.V, "Недра", 512 с., 1968.
4. Р.Г.Манагадзе, Научные труды, № II(281), с.88-92, 1964.



- 5. Г.Д.Манагадзе, Э.Д. Геладзе, Н.К.Качахидзе, Г.А.Кутелия.  
Ф-м "Грузнефтегеофизика", 31 с., 1985.
- 6. Г.Д.Манагадзе, Г.Ш.Шентгелая, И.Ш.Хундадзе. Сообщения АН  
СССР, с.77-80, с. 1976.

ბ. მანაგაძე, ნ. კახახიძე, გ. ქუთელია, გ.გუტელია,  
რ. მანაგაძე

ენერგოლოკალური საზოგადოებრივი ღონისძიების  
დაგეგმვისათვის გეოლოგიური მონაცემების

**რეზიუმე**

ენერგოლოკალური საზოგადოებრივი ღონისძიების დაგეგმვისათვის გეოლოგიური მონაცემების გამოყენების მიზნით ჩატარებულ იქნა დაკვირვებითი მიწისქვეშა გეოლოგიური კვლევის ტრანსფორმაცია.

სხვადასხვა ტიპის ქვეშევრდები მონაცემების ტრანსფორმაცია ადგილს აწარმოებს გამოყენების სხვაობის კონფორმაციასა და ადგილობრივობას, მიწისქვეშა მონაცემები იძლევიან დაზოგბით ინფორმაციას გეოლოგიური სტრუქტურების სივრცითი განაწილების შესახებ, რაც ნარბიანობის მნიშვნელოვან ელემენტს მომავალი გეოლოგიური და გეოეკონომიკური სამუშაოების დასაპროექტებლად და ჩასაძარბად.



TOWARDS INVESTIGATING THE NINOTSMINDA-PATARDZEULI  
OIL-BEARING AREA BY THE GRAVITY METHOD

Summary

Transformation of the observed gravity field has been carried out with a view to detecting oil-bearing local structures in the Ninotsminda-Patardzeuli area.

The transformation, implemented by the different methods, establishes the configuration and location of the bodies causing an anomaly. The results give additional information about the spatial distribution of the geological structures, which is an important element in the designing and implementation of future geological and geophysical work.

1. E.A. Artyukov, N.T. Klyuzov, *Geofizika*, 1961, no. 1, 100.
2. A.T. Jandzhughalov, *Geofizika*, 1961, no. 1, 100.
3. G. Managadze, *Geofizika*, 1961, no. 1, 100.
4. N. Kachakhidze, *Geofizika*, 1961, no. 1, 100.

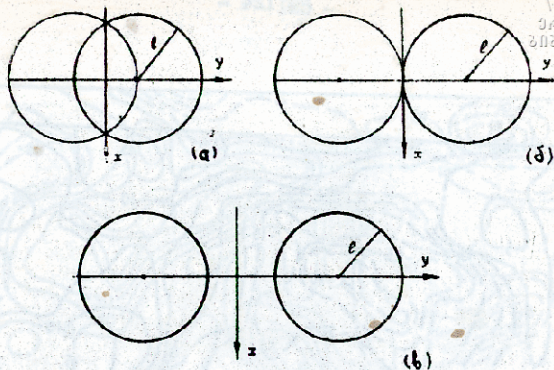


Рис. 1. К пояснению метода, основанного на двухокружном варианте, для исключения регионального фона, изменяющегося по полиному второй степени.

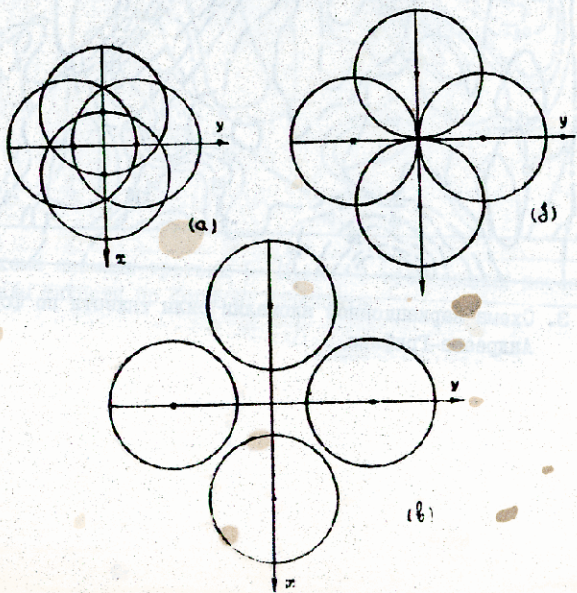
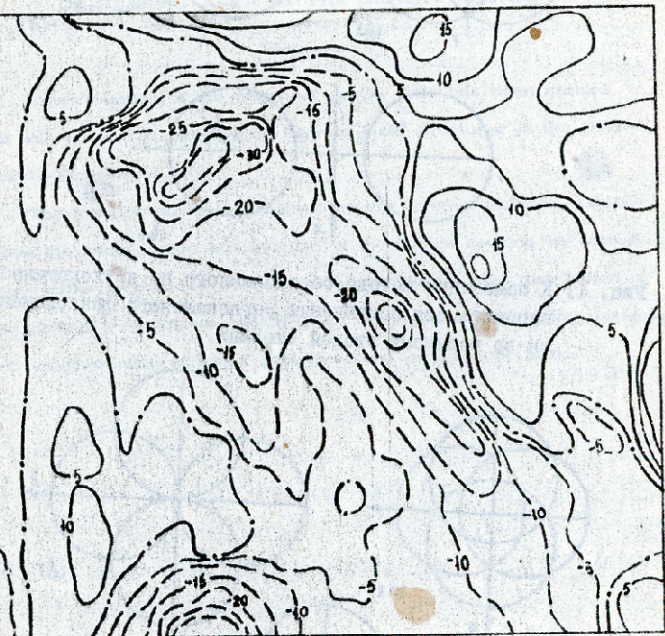


Рис. 2. К пояснению метода, основанного на четырехокружном варианте, для исключения регионального фона, изменяющегося по полиному второй степени.



3. Схема вариационной аномалии силы тяжести по формуле Андреева-Грифина.



Рис. 4. Схема аномалии третьих ( $U_{zzz}$ ) производных потенциала силы тяжести по формуле Розенбаха.

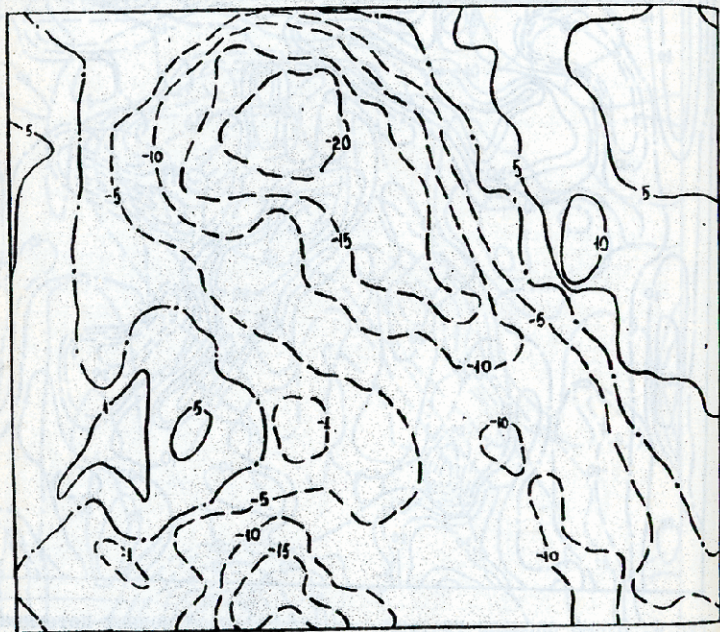


Рис. 5. Схема аномалии силы тяжести, построенная по формуле Саакова-Нилгарда.



Рис. 6. Схема аномалии силы тяжести, построенная по формуле осредненной функции.





Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
 государственного университета  
 თბილისის შრომის ნიშნით რჩობის ორჯინოსანი სახელმწიფო  
 უნივერსიტეტის შრომები

271, 1987

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ И СПЛАВНОГО РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ НА  
 ВЕЛИЧИНУ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ ЭЛЕКТРОНОВ В  $\text{InP}_{1-x}\text{As}_x$

З.В.Квиникадзе, Н.П.Кекелидзе, В.А.Тогиашвили,

З.Ф.Давитая

В соответствии с теорией Кейна /1/ эффективная масса  
 электрона на дне зоны проводимости, или эффективная масса,  
 соответствующая стандартной параболической зоны  $m_n^*$ , обя-  
 зана с величиной запрещенной зоны  $E_g$  и спин-орбитального  
 расщепления  $\Delta_0$  материала соотношения:

$$\frac{m_0}{m_n^*} = \frac{E_p}{3} \left( \frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta_0} \right) \quad (1)$$

где  $E_p = (2m_0 / \hbar^2) P^2$  - энергетический параметр,  
 $P$  - постоянная, учитывающая связь между зоной прово-  
 димости и валентной зоной.

Кривая зависимости эффективной массы электронов от сос-  
 тава твердого раствора  $\text{InP}_{1-x}\text{As}_x$ , рассчитанная по  
 формуле (1), представлена на рис. 1 (кривая а). Значения ши-  
 рины запрещенной зоны для промежуточных составов твердого  
 раствора определялись нами из экспериментально установлен-  
 ной зависимости вида /2/:

$$E_g(x) = a + bx + cx^2$$



где  $c$  - параметр, некоторая положительная величина. Для системы  $ZnP_{1-x}As_x$  соответствующие значения параметров взяты из работы /2/:  $a=0,39$  эВ;  $c=0,27$  эВ;  $a+b+c=1,37$  эВ.

Значения  $\Delta_0(x)$  и  $E_p(x)$  брались из линейной экстраполяции между соответствующими значениями для  $ZnAs$  и  $ZnP$ :

	$\Delta_0$ , эВ	$E_p$ , эВ
$ZnP$	0,16	18
$ZnAs$	0,43	20,1

что согласно работе /3/ полностью обосновано.

С другой стороны, как нами было показано в ранних работах /4 - 6/, в  $ZnAs$  и близких к нему по составу сплавах зона проводимости существенно отклоняется от параболического закона и, естественно, эффективная масса будет сильно зависеть от степени легирования этих материалов.

Действительно, как следует из кривых (рис.2), которые были рассчитаны по формуле, учитывающей непараболическость зоны проводимости /7/:

$$m_n^* = m_n^* \sqrt{1 + \frac{1}{2} \left(\frac{3}{F}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{\epsilon_g m_n^*} n^{2/3}} \quad (2)$$

отклонения от линейной зависимости  $m^*(x)$  тем сильнее, чем ближе состав твердого раствора к  $ZnAs$ . Этот факт подтверждается также и кривыми, представленными на рис.3, где дана рассчитанная нами зависимость параметра непараболическости  $\gamma$ , введенного Ковальским и Босновским /7/, от состава твердого раствора.

$$\gamma = \frac{\Delta h^2 m_n^* (3D^2 n)^{2/3}}{\epsilon_y m_p^*} \quad (3)$$

Для наглядности на рис. 1 представлена также кривая зависимости эффективной массы электронов от состава  $x$ , построенная для концентрации электронов  $n = 10^{19} \text{ см}^{-3}$  (кривая б) по формуле (2). На рисунке нанесены также экспериментальные значения, полученные на основе электрических и термоэлектрических измерений [5, 6]. При этом с целью удобства сравнения экспериментальные значения эффективных масс электронов в образцах с разными их концентрациями с помощью формулы (2) пересчитаны для концентрации  $n = 10^{16} \text{ см}^{-3}$  (как было показано в [5]. в исследовавшемся нами материале вплоть до концентрации электронов  $n \approx 10^{16} \text{ см}^{-3}$  зону проводимости можно считать параболической).

Однако, как известно, в некоторых твердых растворах при определении эффективной массы электронов наблюдается ощутимое отклонение от теории Кейна. Авторы [8] считают, что указанное несоответствие можно объяснить некоторым перекрыванием зоны проводимости и валентной зоны в точке "Г", имеющим место вследствие нарушения симметрии кристаллов при сплавлении (сплавное разупорядочение). Поэтому представляет интерес рассчитать зависимость эффективной массы  $m^*(a)$  от состава сплавов системы  $\text{In}_x\text{P}_{1-x}\text{As}_{1-x}$  также и с учетом указанного явления.

При упомянутом перекрывании зон часть состояний валентной зоны, трансформированная в зону проводимости, равна части состояний зоны проводимости, трансформированной в валентную



зону. Следовательно, результирующая эффективная масса зоны проводимости будет определяться в некоторой степени параметрами валентной зоны /8/:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_{co}} + \frac{1(1-\alpha)}{3A} c_{fg}^2 \left[ \frac{1}{m_{hh} \epsilon_{gv}} + \frac{1}{m_{lh} \epsilon_{gv}} + \frac{1}{m_{so}(\epsilon_{gv} + \Delta_o)} - \frac{1}{m_{co}} \left( \frac{2}{\epsilon_{gv}} + \frac{1}{\epsilon_{gv} + \Delta_o} \right) \right] \quad (4)$$

где:  $m_{co}$  - масса, определенная по формуле (1);  $m_{lh}$  - масса легких дырок;  $m_{hh}$  - масса тяжелых дырок;  $m_{so}$  - масса дырок в зоне, отщепленной в результате спин-орбитального взаимодействия. В приведенной формуле сделаны следующие допущения:  $m_{lh}$  принимается равной по величине  $m_{co}$ . Величины  $m_{hh}$  и  $m_{so}$  берутся из линейной экстраполяции между соответствующими значениями для исходных соединений:

	$m_{hh}/m_o$	$m_{so}/m_o$
$\text{InP}$	0.8	0.35
$\text{InAs}$	0.4	0.15

$c_{fg}^2 / A = 0,08$  эВ. Остальные параметры были взяты из /9/. Результаты, полученные нами из расчетов по формулам (1) и (2), и расчеты, выполненные на ЭВМ по формуле (4), сведены в таблицу.

Анализ данных, представленных на рисунках и в таблице, наглядно показывает, что в исследуемой нами системе  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  (в отличие от других систем, например,  $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ ,  $\text{In}_{1-x}\text{Sb}_x\text{As}$ ,  $\text{In}_{1-x}\text{As}_x\text{Sb}$  /3,8,10/ сплавное разупорядо-

04.03.63  
2025.09.09

чение дает незначительную поправку по сравнению со значениями эффективных масс на дне зоны проводимости и отклонения величин эффективных масс от этих значений полностью определяются легированием материала. И, что особенно следует подчеркнуть, значения эффективной массы как в легированных, так и в нелегированных образцах можно вычислить на основе теории Кейна /1/, т.е. без учета в потенциале взаимодействия аперодического члена, связанного с разупорядочением твердого раствора.

Получила 5.XI.1986

Научно-исследовательская  
лаборатория полупроводни-  
кового материаловедения  
ТГУ

#### Литература

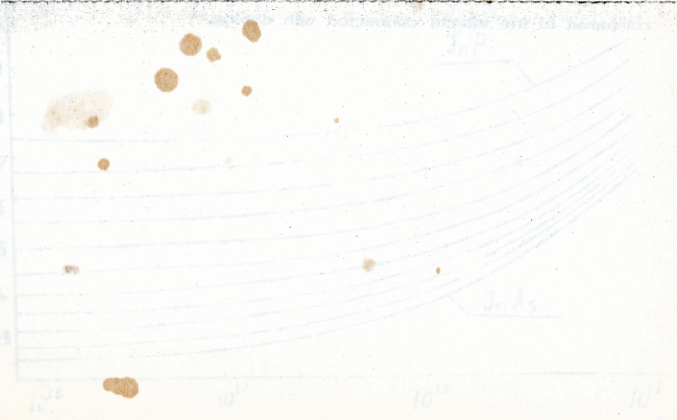
1. E.O. Kane, Phys. Chem. Sol., v.1, p. 249-261, 1957.
2. A.G. Tompaon, J.C.Woolley, Can. J. Phys., v.45, p.255-261, 1967.
3. O.Berolo, J.C.Woolley, II Int. Conf. Phys. Semicond., Warsaw, p.1420-1425, 1972.
4. Н.П.Кекелидзе, З.В.Квиникадзе. Сообщ. АН СССР, т.68, с.49-52, 1972.
5. N.P.Kekelidze, Z.V.Kvinkadze, J. de Physique, v.35, p.883, 1975.
6. В.А.Гогиашвили, Кандидатская диссертация, ТГУ, Тбилиси, 1975.
7. J.Kolodziejcsak, L.Sosnowski, Acta Phys. Pol., v.21, p.399-413, 1962.
8. O.Berolo, J.C.Woolley, J.A.Van Vechten, Phys. Rev., B, v.8, p.3794-3798, 1973.
9. J.A.Van Vechten, T.R.Bergstresser, Phys. Rev. B, v.1, p.3351-3358, 1970.
10. М.И.Аллев, Х.А.Халилов, Изв. АН Уз. ССР, №3, с.91-94, 1973.



УДК 621.372.6  
308.017.013.5

Таблица

x, молярная доля <i>InP</i>	Эффективные массы электронов $m^*/m_0$ для $InP_{1-x}As_x$		для по формуле (2) при $n=10^{19} \text{ см}^{-3}$
	по формуле (1)	вычисленные по формуле (4)	
0	0,023	-	0,067
0,1	0,026	0,029	0,068
0,2	0,031	0,034	0,069
0,3	0,035	0,038	0,070
0,4	0,040	0,043	0,072
0,5	0,045	0,049	0,075
0,6	0,051	0,056	0,078
0,7	0,055	0,060	0,081
0,8	0,061	0,067	0,085
0,9	0,067	0,073	0,090
1,0	0,073	-	0,095





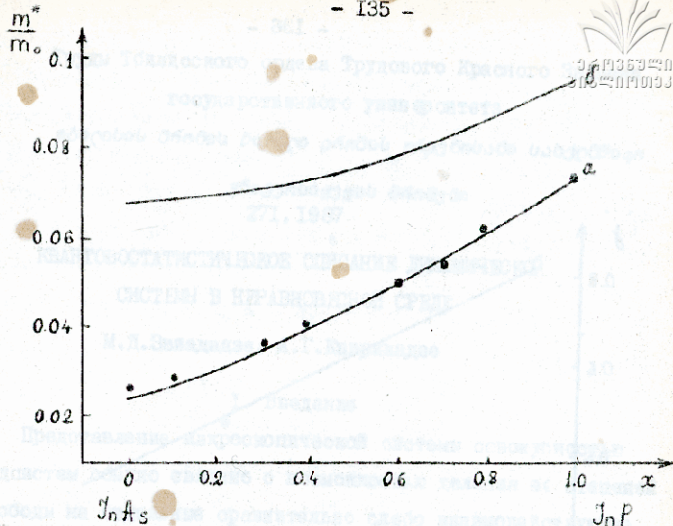


Рис. 1. Зависимость эффективной массы электронов от состава твердого раствора: а - по формуле (1), б - по формуле (2) при  $n = 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ , ● - эксперимент.

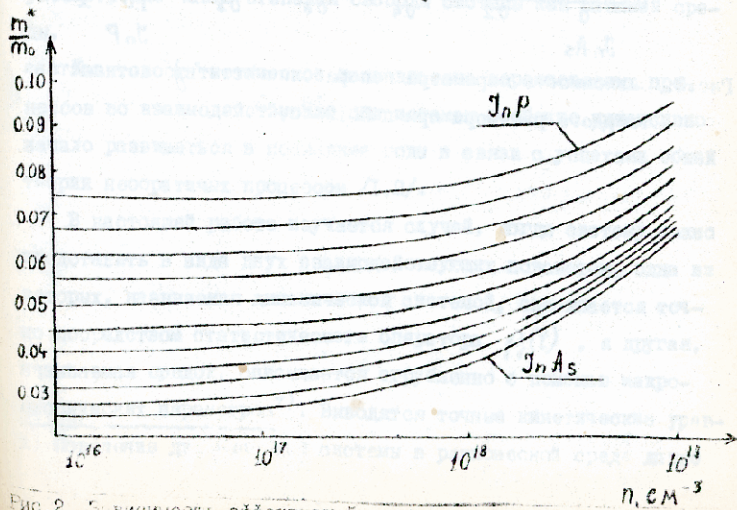


Рис. 2. Зависимость эффективной массы электронов от концентрации для разных составов ( $0 \leq x \leq 1$ ) системы  $\text{ZnP}_{1-x}\text{As}_x$ .



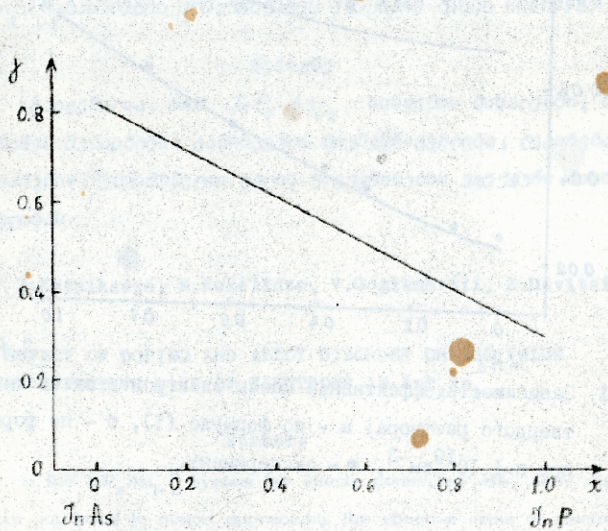


Рис.3. Зависимость параметра непараболичности  $\gamma$  от состава твердого раствора при  $n=5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ .



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
государственного университета

თბილისის შრომის ნობელი რჩების ორდენის სახელმწიფო სახელმწიფო

უნივერსიტეტის შრომები  
271, 1987

КВАНТОВОСТАТИСТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ  
СИСТЕМЫ В НЕРАВНОВЕСНОЙ СРЕДЕ

М.Д.Звиаდაдзе, А.Г.Квирикадзе

I. Введение

Представление макроскопической системы совокупностью подсистем обычно связано с возможностью деления ее степеней свободы на отдельные сравнительно слабо взаимодействующие группы. Примером может служить выделение колебательных и спиновых степеней свободы в твердых телах и жидкостях, или рассмотрение части степеней свободы системы как внешней среды.

Квантостатистическое исследование неравновесных процессов во взаимодействующих подсистемах особенно интенсивно начало развиваться в последние годы в связи с успехами общей теории необратимых процессов /1,2/.

В настоящей работе изучается случай, когда систему можно представить в виде двух взаимодействующих подсистем, одна из которых, называемая динамической системой, описывается точно посредством статистического оператора  $\rho_f(t)$ , а другая, называемая средой, описывается огрубленно с помощью макроскопических параметров<sup>\*)</sup>. Выводятся точные кинетические уравнения поведения динамической системы в равновесной среде давно



нения марковского типа для статистического оператора  $\rho_1(t)$  и макроскопических параметров и приводится упрощенная форма этих уравнений во втором порядке теории возмущений по взаимодействию между подсистемами. В качестве простейших примеров использования полученных уравнений рассмотрены эволюция квантовой системы под влиянием взаимодействия с неравновесной средой, движение примесной частицы в равновесной жидкости и поведение спиновой системы в термостате.

## 2. Вывод основных уравнений

Рассмотрим систему с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V, \quad \mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2,$$

где  $\mathcal{H}_1$  - гамильтониан динамической системы,  $\mathcal{H}_2$  - основной гамильтониан среды,  $V$  включает взаимодействие между подсистемами и те взаимодействия внутри среды, которые являются относительно слабыми и не влияют на выбор макроскопических параметров. В соответствии с идеей о сокращенном описании неравновесных состояний /6/ полагаем, что для времен  $t \gg \tau_0$  ( $\tau_0$  - время хаотизации) состояние системы определяется огрубленным статистическим оператором  $\rho(t)$ , который зависит от времени не явно, посредством статистического оператора  $\rho_1(t)$  динамической системы и набора макроскопических параметров  $\gamma_\alpha(t)$ , характеризующих среду, причем

$$\rho_1(t) = S_P \rho(t), \quad \gamma_\alpha(t) = S_P \{ \rho(t) \gamma_\alpha \}. \quad (1)$$

привлекает внимание /3/. Систематическое рассмотрение этого вопроса содержится в работах /4,5/.

Здесь и в дальнейшем  $S_{P_2} \mathcal{H}$  означает взятие следа оператора  $\mathcal{H}$  по переменным среды. Линейно независимые операторы  $\hat{\gamma}_\alpha$  соответствуют параметрам  $\gamma_\alpha$  и определяются структурой и свойствами симметрии основного гамильтониана среды  $\mathcal{H}_2$ .

Наиболее простой способ построения  $\rho(t)$  заключается в использовании уравнения Лиувилля с бесконечно малым источником /7/:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL\right)\rho(t) = -\varepsilon \{ \rho(t) - \mathcal{P}(t)\rho(t) \}, \quad \varepsilon \rightarrow +0, \quad (2)$$

$$L = L_0 + L_V, \quad L_0 = L_1 + L_2, \quad iL_V \mathcal{H} \equiv \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}, V],$$

$$iL_j \mathcal{H} \equiv \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}, \mathcal{H}_j], \quad j=1,2.$$

Оператор проектирования  $\mathcal{P}(t)$  в (2) определяет характер сокращенного описания неравновесных состояний системы.

В качестве  $\mathcal{P}(t)$  удобно выбрать оператор проектирования типа Кавасаки-Гантона /8/:

$$\mathcal{P}(t)\mathcal{H} = \varepsilon_q(t) S_{P_2} \mathcal{H} + \rho_1(t) \sum_\alpha \frac{\partial \varepsilon_q(t)}{\partial \gamma_\alpha(t)} \{ S_{P_2} (\hat{\gamma}_\alpha \mathcal{H}) - \gamma_\alpha(t) S_{P_2} \mathcal{H} \}, \quad (3)$$

где

$$\varepsilon_q(t) \equiv \varepsilon_q(\gamma(t)) = Q_q^{-1} e^{-\sum_\alpha F_\alpha(t) \hat{\gamma}_\alpha}, \quad (4)$$

$$Q_q = S_{P_2} e^{-\sum_\alpha F_\alpha(t) \hat{\gamma}_\alpha}$$

- квазиравновесный статистический оператор среды, зависящий от  $t$  неявно через макроскопические параметры  $\gamma_\alpha(t)$ . Величины  $F_\alpha(t) \equiv F_\alpha(\gamma(t))$  называются обобщенными термодинамическими силами, сопряженными параметрам  $\gamma_\alpha(t)$ . Функциональная связь  $F_\alpha(t)$  с  $\gamma_\alpha(t)$  определяется условиями сопряжения



ния /1/:

$$S_P \rho(t) \hat{y}_\alpha = S_{P_2} \epsilon_q(t) \hat{y}_\alpha. \quad (5)$$

Из явного вида  $\mathcal{P}(t)$  (3) следует, что

$$\mathcal{P}(t) \rho(t) = \rho_1(t) \epsilon_q(t), \quad (6)$$

$$\mathcal{P}(t) \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \{ \mathcal{P}(t) \rho(t) \}, \quad \mathcal{P}(t') \mathcal{P}(t) A = \mathcal{P}(t') A.$$

Вчитая выражение  $(\frac{\partial}{\partial t} + iL_0) \mathcal{P} \rho$  из обеих частей (2) и используя (6), получим

$$(\frac{\partial}{\partial t} + iL_0 + \epsilon)(1-\mathcal{P})\rho = -iL_V \rho - iL_0 \mathcal{P} \rho - \mathcal{P} \frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (7)$$

Поддействуем оператором  $\mathcal{P}$  на уравнение (2) слева:

$$\mathcal{P} \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\mathcal{P} iL_0 \rho - \mathcal{P} iL_V \rho.$$

В результате (7) принимает вид:

$$(\frac{\partial}{\partial t} + iL_0 + \epsilon)(1-\mathcal{P})\rho = -(1-\mathcal{P})iL_V \rho + \mathcal{P} iL_0 \rho - iL_V \mathcal{P} \rho. \quad (8)$$

Поскольку нас интересуют времена  $t \gg \tau_0$ , должны выполняться коммутационные соотношения /2/:

$$iL_0 \hat{y}_\alpha = iL_2 \hat{y}_\alpha = i \sum_{\beta} \alpha_{\alpha\beta} \hat{y}_\beta, \quad (9)$$

где  $\alpha_{\alpha\beta}$  - матрица  $C$ -чисел, определяемая гамильтонианом  $\mathcal{H}_2$ . С учетом (9) и формулы /2,9/

$$e^{-iL_0 t'} \epsilon_q(\gamma(t)) = \epsilon_q(e^{i a t'} \gamma(t)) \quad (10)$$

легко показать, что

$$\mathcal{P}(t) iL_0 \rho(t) = \mathcal{P}(t) iL_0 \mathcal{P}(t) \rho(t) = iL_0 \mathcal{P}(t) \rho(t).$$



Для этого достаточно продифференцировать обе части (10) по  $t'$  в точке  $t'=0$  и использовать определение (3). В итоге (8) упрощается:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL_0 + \varepsilon\right)(1-P)\rho = -(1-P)iL_V\rho. \quad (11)$$

Это дифференциальное уравнение эквивалентно интегральному уравнению для  $\rho(t)$ . /10/:

$$\rho(t) = P(t)\rho(t) - \int_{-\infty}^0 dt' e^{(\varepsilon + iL_0)t'} (1-P(t+t'))iL_V\rho(t+t'). \quad (12)$$

Определим оператор сдвига по времени соотношением

$$e^{t' \partial / \partial t} f(t) = f(t+t').$$

Тогда уравнение (12) записывается в виде:

$$\rho(t) = P(t)\rho(t) - \int_{-\infty}^0 dt' e^{(\varepsilon + iL_0)t'} e^{t' \partial / \partial t} (1-P(t))iL_V\rho(t)$$

и имеет формальное решение

$$\rho(t) = \{1 + \mathcal{I}(t)\}^{-1} P(t)\rho(t) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \mathcal{I}^n(t) P(t)\rho(t), \quad (13)$$

где оператор  $\mathcal{I}(t)$  дается формулой

$$\mathcal{I}(t) = \int_{-\infty}^0 dt' e^{(\varepsilon + iL_0)t'} e^{t' \partial / \partial t} (1-P(t))iL_V.$$

Непосредственным вычислением можно показать, что условия согласования (5) выполняются автоматически, а при  $t \rightarrow -\infty$  справедливо граничное условие совпадения  $\rho(t)$  и  $P(t)\rho(t)$ .

Благодаря наличию оператора сдвига во времени неравновесный статистический оператор (13) зависит от всех предшествующих моменту  $t$  значений параметров  $\rho_j(t')$ ,  $\gamma_\alpha(t')$ ,  $t' \leq t$ . Однако "немарковость"  $\rho(t)$  в определенном смысле является фиктивной, поскольку, как показывается ниже, стро-

этим преобразованием оператора  $\hat{L}$  удается придать  $\rho(t)$  марковскую форму, которая последовательно учитывает все эффекты памяти, содержащиеся в обычной немарковской записи  $\rho(t) / I$ .

Операторы  $\mathcal{P}(t)$  и  $\mathcal{P}(t)\rho(t)$  зависят от времени через значения величин  $\rho_i(t)$  и  $\gamma_\alpha(t)$  взятых в тот же момент  $t$ . Поэтому действие оператора  $\hat{L}^{t' \partial/\partial t}$  в (13) эквивалентно дифференцированию по этим параметрам:

$$\hat{L}^{t' \partial/\partial t} \equiv \hat{L}^{t' D(t)}, \quad D(t) \equiv \sum_{\alpha} \frac{\partial \gamma_{\alpha}(t)}{\partial t} \cdot \frac{\partial}{\partial \gamma_{\alpha}(t)} + \frac{\partial \rho_i(t)}{\partial t} \cdot \frac{\partial}{\partial \rho_i(t)}$$

Здесь введено обозначение

$$\frac{\partial \rho_i(t)}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \rho_i(t)} \equiv \sum_{m,n} \frac{\partial \rho_{imn}(t)}{\partial t} \cdot \frac{\partial}{\partial \rho_{imn}(t)}$$

Индексы  $m$  и  $n$  нумеруют произвольный базис в пространстве состояний динамической системы. Входящие в  $D(t)$  скорости изменения параметров имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i(t)}{\partial t} &= -S_{P_i} iL \rho(t) \equiv \mathcal{L}_i(t) \\ \frac{\partial \gamma_{\alpha}(t)}{\partial t} &= S_P \rho(t) iL \hat{\gamma}_{\alpha} \equiv \mathcal{L}_{\alpha}(t) \end{aligned} \quad (14)$$

$\mathcal{L}_i$  получается взятием следа по переменным среды от обеих частей уравнения Лиувилля (2). Умножение (2) на  $\hat{\gamma}_{\alpha}$  и последующее вычисление следа по всем переменным с использованием (4) дает  $\mathcal{L}_{\alpha}$ .

Предположим теперь, что эволюция неравновесного состояния во времени является марковской, т.е. интегралы Столиновия  $\mathcal{L}_{\alpha}(t)$ ,  $\mathcal{L}_i(t)$ , а, следовательно, и  $D(t)$  являются функциями от  $\rho_i(t)$ ,  $\gamma_{\alpha}(t)$ . В этом случае  $\rho(t)$  записывается в форме

$$X(t) = \int_{-\infty}^0 dt' e^{(\epsilon + iL_0)t'} \frac{t'}{\ell} {}^t D(\rho(t), \gamma(t)) (1 - \mathcal{P}(t)) iL_V,$$

$$D(\rho_i(t), \gamma(t)) = \sum_{\alpha} S_P \left\{ \rho(t) iL_V \hat{\gamma}_{\alpha} \right\} \frac{\partial}{\partial \gamma_{\alpha}(t)} - S_{P_2} \left\{ iL_V \rho(t) \right\} \frac{\partial}{\partial \rho_i(t)} \quad (15')$$

Такое представление оператора  $X(t)$  обеспечивает марковский характер  $\rho(t)$  (13), который, в соответствии с (14), согласуется с исходным предположением об отсутствии памяти в интегралах столкновений  $\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_{\alpha}$ . Таким образом, существуют две полностью эквивалентные формы решения уравнения Лиувилля с источником (2), немарковская и марковская<sup>x)</sup>

Подставляя (13) в (14), после простых вычислений получим точную систему обобщенных кинетических уравнений марковского типа:

$$\frac{\partial \rho_i(t)}{\partial t} + iL_{\alpha} \rho_i(t) = -S_{P_2} \left\{ iL_V (1 + X(t))^{-1} \mathcal{P}(t) \rho(t) \right\}, \quad (16)$$

$$\frac{\partial \gamma_{\alpha}(t)}{\partial t} - i \sum_{\beta} a_{\alpha\beta} \gamma_{\beta}(t) = S_P \left\{ (1 + X(t))^{-1} \mathcal{P}(t) \rho(t) \cdot iL_V \hat{\gamma}_{\alpha} \right\}.$$

Оператор  $(1 + X(t))^{-1}$  понимается в смысле своего степенного разложения

$$(1 + X(t))^{-1} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n X^n(t),$$

а  $X(t)$  дается формулой (15).

Приведем явную форму уравнений (16) во втором порядке теории возмущений по  $V$ . Как следует из структуры правых частей (16), для этого достаточно вычислить оператор

$$(1 + X(t))^{-1} \mathcal{P}(t) \rho(t) \quad \text{в первом порядке, что дает}$$

x) На возможность построения неравновесного статистического оператора в виде формального марковского разложения по малому взаимодействию было указано в работе /III/.





$$\frac{\partial \rho_i(t)}{\partial t} + iL_{i, \rho_i}(t) \approx -S_{P_2} \{ (1 - \mathcal{P}(t)) \mathcal{P}(t) \rho(t) \}, \quad (17)$$

$$\frac{\partial \gamma_\alpha(t)}{\partial t} - i \sum_{\beta} \alpha_{\alpha\beta} \gamma_\beta(t) \approx S_P \{ (1 - \mathcal{P}(t)) \mathcal{P}(t) \rho(t) iL_V \hat{\gamma}_\alpha \},$$

где

$$\mathcal{P}_1(t) = \int_{-\infty}^0 dt' e^{(\epsilon + iL_0)t'} e^{t' D_0(t)} (1 - \mathcal{P}(t)) iL_V,$$

$$D_0(t) = i \sum_{\alpha\beta} \alpha_{\alpha\beta} \gamma_\beta(t) \frac{\partial}{\partial \gamma_\alpha(t)} - iL_{i, \rho_i}(t) \frac{\partial}{\partial \rho_i(t)}.$$

Поскольку в нулевом приближении по  $V$  справедливы соотношения

$$e^{t' D_0(t)} \mathcal{P}(t) \rho(t) = e^{-iL_0 t'} \mathcal{P}(t) \rho(t),$$

$$e^{t' D_0(t)} \mathcal{P}(t) iL_V \mathcal{P}(t) \rho(t) = e^{-iL_0 t'} \mathcal{P}(t) iL_V(t') \mathcal{P}(t) \rho(t),$$

$$iL_V(t') \mathcal{P} \equiv \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{P}, e^{iL_0 t'} V],$$

получаем

$$\mathcal{P}_1(t) \mathcal{P}(t) \rho(t) = (1 - \mathcal{P}(t)) \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} iL_V(t') \mathcal{P}(t) \rho(t). \quad (18)$$

Используя (18) и явный вид (3) оператора  $\mathcal{P}(t)$ , нетрудно получить систему обобщенных кинетических уравнений во втором порядке теории возмущений по  $V$ :



$$\frac{\partial S_1(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\tilde{\mathcal{H}}_1, \rho_1] - \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \left\{ S_{P_2}^{\rho_1} \left[ [S_{P_1}^{\rho_1}, V(t')], \delta V \right] - \right. \quad (19)$$

$$\left. - \sum_{\alpha} \left[ S_{P_1}^{\rho_1} \frac{\partial G_{\alpha}}{\partial \delta \alpha} V \right] \cdot S_{P_1}^{\rho_1} \left[ V(t'), \hat{\gamma}_{\alpha} \right] \right\},$$

$$\frac{\partial \delta \alpha(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} S_{P_2}^{\rho_1} \left[ \hat{\gamma}_{\alpha}, \tilde{\mathcal{H}}_2 \right] - \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \left\{ S_{P_1}^{\rho_1} \left[ S_{P_2}^{\rho_1} \left( [\delta V(t'), [V, \hat{\gamma}_{\alpha}]] \right) - \right. \quad (20)$$

$$\left. - \sum_{\beta} [V(t'), \hat{\gamma}_{\beta}] \cdot S_{P_1}^{\rho_1} \frac{\partial G_{\beta}}{\partial \delta \beta} [V, \hat{\gamma}_{\alpha}] \right\},$$

где

$$\tilde{\mathcal{H}}_1 = \mathcal{H}_1 + S_{P_1}^{\rho_1} V, \quad \tilde{\mathcal{H}}_2 = \mathcal{H}_2 + S_{P_2}^{\rho_1} V, \quad \delta V = V - S_{P_1}^{\rho_1} V, \quad V(t') = e^{-i\epsilon_0 t'} V.$$

Величины  $S_{P_1}^{\rho_1} V$  и  $S_{P_2}^{\rho_1} V$  играют роль самосогласованных полей, действующих на среду и динамическую систему благодаря взаимодействию между ними. Структура членов второго порядка по  $V$  в (19) и (20) такова, что в них исключено влияние самосогласованных полей. (19) и (20) представляют собой замкнутую систему нелинейных кинетических уравнений для переменных  $\rho_1(t)$  и  $\gamma_{\alpha}(t)$ , которая адекватно учитывает взаимное влияние неравновесной среды и динамической системы.

В случае, когда  $V$  зависит только от координат среды, т.е. не учитывается взаимодействие между средой и динамической системой, (20) переходит в известное уравнение работы [12], а (19) принимает вид обычного уравнения Лиувилля с гамильтонианом  $\tilde{\mathcal{H}}_1$ , как и должно быть.

Кинетические уравнения типа (19), (20) можно вывести



другим методом, который удобен в том случае, когда неравновесное поведение среды в отсутствие динамической системы известно и необходимо учесть только влияние взаимодействия между средой и динамической системой. Соответствующий вывод дан в приложении.

### 3. Эволюция состояния квантовой системы в среде

Рассмотрим взаимодействие динамической системы с малым числом степеней свободы (примером может служить атомная или молекулярная система) с неравновесной средой.

Как хорошо известно, состояние изолированной квантовой системы описывается волновой функцией, удовлетворяющей уравнению Шредингера. Если система взаимодействует со средой, то она уже перестает быть чисто механической, приобретая черты статистической системы, которые можно частично учесть приписыванием конечных времен жизни ее стационарным состояниям /13/. Для получения явных выражений этих времен обычно выводят уравнение типа Шредингера с несамосопряженным гамильтонианом, антиэрмитова часть которого и определяет уширение уровней энергии системы. Однако этот подход является приближенным, так как не отражает того существенного факта, что в среде состояние системы является смешанным и не может полностью характеризоваться определенной волновой функцией, пусть даже с комплексным значением энергии. Конечно, в некоторый момент времени можно "приготовить" чистое состояние (например, путем проведения полного измерения над системой), которое затем переходит в смешанное состояние под влиянием среды.

В соответствии с вышесказанным будем искать решение урав-



нения (19) в предположении, что в начальный момент времени динамическая система характеризуется волновой функцией  $|\psi\rangle$  и, следовательно, статистическим оператором  $\rho_1(0) = |\psi\rangle\langle\psi|$ .

Пусть  $|n\rangle$  и  $E_n$  - собственные функции и собственные значения гамильтониана  $\mathcal{H}_1$  :

$$\mathcal{H}_1 |n\rangle = E_n |n\rangle.$$

В  $\mathcal{H}_1$  - представлении (19) принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{mn}}{\partial t} = & -i\omega_{mn} \rho_{mn} + \frac{i}{\hbar} \langle m | [S_P, S_Q V] | n \rangle - \\ & - \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \sum_P \left\{ \rho_{me} \langle l | S_{P_2} S_Q V(t') \delta V | n \rangle + \rho_{en} \langle m | S_{P_2} S_Q \delta V V(t') | e \rangle - \right. \\ & \left. - S_{P_2} S_Q \sum_k \rho_{ek} (\langle k | \delta V | n \rangle \langle m | V(t') | e \rangle + \langle k | V(t') | n \rangle \langle m | \delta V | e \rangle) - \right. \\ & \left. - \sum_{\alpha} \left( \rho_{ml} S_{P_2} \frac{\partial S_Q}{\partial \lambda_{\alpha}} V_{en} - \rho_{en} S_{P_2} \frac{\partial S_Q}{\partial \lambda_{\alpha}} V_{ml} \right) S_P S_Q \rho_1 [V(t'), \hat{\lambda}_{\alpha}] \right\}, \\ \rho_{mn} \equiv & \langle m | \rho_1 | n \rangle, \quad \omega_{mn} = \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n) \end{aligned} \quad (21)$$

В  $\mathcal{H}_1$  - представлении начальное условие к (21) есть:

$$\rho_{mn}(0) = c_m(0) c_n^*(0), \quad |\psi\rangle = \sum_n c_n(0) |n\rangle. \quad (22)$$

Решение уравнения (21) ищем в форме:

$$\rho_{mn}(t) = c_m(t) c_n^*(t) + \rho_{mn}^d(t), \quad \rho_{mn}^d(0) = 0 \quad (23)$$

при естественном дополнительном условии, согласно которому коэффициенты  $c_m(t)$  должны удовлетворять уравнению Шредингера с эффективным гамильтонианом. Подстановка (23) в (21) приводит к системе

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial c_m}{\partial t} = & E_m c_m + \sum_P S_{P_2} (S_Q V_{ml}) c_e - \\ & - \frac{i}{\hbar} \sum_e c_e \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \langle m | S_{P_2} S_Q \delta V V(t') | e \rangle. \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial P_{mn}^c}{\partial t} &= \langle m | [\mathcal{H}_1 + S_{P_2} \sigma_q V, \rho^c] | n \rangle - \\
 &\quad - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \{ \langle m | S_{P_2} [ [\rho^c \sigma_q, V(t')], \delta V ] | n \rangle - \\
 &\quad - \sum_{\ell k} c_{\ell} c_k^* S_{P_2} \sigma_q (\delta V_{k\ell} V_{m\ell}(t') + V_{k\ell}(t') \delta V_{m\ell}) - \\
 &\quad - \sum_{\ell \alpha} [ (c_m c_{\ell}^* + \rho_{m\ell}^c) S_{P_2} \frac{\partial \sigma_q}{\partial \gamma_{\alpha}} V_{\ell n} - \\
 &\quad - (c_{\ell} c_m^* + \rho_{\ell n}^c) S_{P_2} \frac{\partial \sigma_q}{\partial \gamma_{\alpha}} V_{m\ell} ] \sum_{P, K} S_{P_2} \sigma_q (c_P c_K^* + \rho_{PK}^c) [ V_{PK}(t), \hat{\gamma}_{\alpha} ] \},
 \end{aligned} \tag{25}$$

где  $A_{kn} \equiv \langle k | A | n \rangle$ . Система (24), (25) в точности эквивалентна уравнению (21). Если положить  $\psi(t) = \sum_n c_n(t) | n \rangle$ , то (24) принимает вид уравнения типа Шредингера

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} &= (\mathcal{H}_1 + S_{P_2} \sigma_q V) \psi(t) - \\
 &\quad - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} S_{P_2} \{ \sigma_q \delta V V(t') \} \psi(t).
 \end{aligned} \tag{26}$$

(25) записывается в форме

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial \rho^c}{\partial t} &= [ \mathcal{H}_1 + S_{P_2} \sigma_q V, \rho^c ] - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \{ S_{P_2} [ [\rho^c \sigma_q, V(t')], \delta V ] - \\
 &\quad - S_{P_2} \sigma_q [ V(t') P_{\psi(t)} \delta V + \delta V P_{\psi(t)} V(t') ] - \\
 &\quad - \sum_{\alpha} [ P_{\psi(t)} + \rho^c, S_{P_2} \frac{\partial \sigma_q}{\partial \gamma_{\alpha}} V ] S_{P_2} \sigma_q (P_{\psi(t)} + \rho^c) [ V(t'), \hat{\gamma}_{\alpha} ].
 \end{aligned} \tag{27}$$

Здесь  $P_{\psi(t)} = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$  - оператор проектирования на состояние  $\psi(t)$ . Согласно (26), эффективный гамильтониан системы в среде дается выражением

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathcal{H}_1 + S_{P_2} \sigma_q V - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} S_{P_2} \{ \sigma_q \delta V V(t') \}. \tag{28}$$

В общем случае неравновесной среды  $\mathcal{H}_{eff}$  зависит от времени через параметры  $\gamma_\alpha(t)$ . Если среда равновесна или же находится в стационарном неравновесном состоянии, эффективный гамильтониан  $\mathcal{H}_{eff}$  не зависит от времени. Полагаем

$$K = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} S_{P_2} \left\{ \sigma_9 \delta V V(t) \right\} = U - i\Gamma,$$

где

$$U = \frac{K + K^\dagger}{2}, \quad \Gamma = \frac{K^\dagger - K}{2i}$$

- эрмитова и антиэрмитова части несамосопряженного оператора  $K$ , соответственно. Очевидно,

$$\mathcal{H}_{eff} = \mathcal{H}_1 + \delta\mathcal{H}_1 - i\Gamma, \quad \Gamma = \frac{1}{2\hbar} \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} S_{P_2} \left\{ \sigma_9 (\delta V V(t) + V(t) \delta V) \right\}, \quad (29)$$

$$\delta\mathcal{H}_1 = S_{P_2} \sigma_9 V + U, \quad U = \frac{1}{2i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} S_{P_2} \left\{ \sigma_9 [\delta V, V(t)] \right\}. \quad (30)$$

Эрмитовы операторы  $\delta\mathcal{H}_1$  и  $\Gamma$  обуславливают сдвиг уровней энергии и затухание собственных состояний гамильтониана  $\mathcal{H}_1$ , соответственно. Поэтому, естественно, называть их операторами сдвига энергии системы и затухания. В общем случае  $\delta\mathcal{H}_1$  и  $\Gamma$  зависят от времени. Таким образом, эволюция динамической системы, взаимодействующей со средой, описывается статистическим оператором  $\rho_t = P_\psi + \rho^c$ , где  $\psi(t)$  и  $\rho^c(t)$  удовлетворяют уравнениям (26), (27) и начальным условиям (22), (23). Под влиянием среды начальное чистое состояние системы ( $\rho_t \approx P_\psi$ ) затухает с характерным временем  $\Gamma^{-1}$  ( $P_\psi \rightarrow 0$ , при  $t \gg \Gamma^{-1}$ ), которое можно рассматривать как время перехо-



да системы в смешанное состояние ( $\rho_i \rightarrow \rho^c$ ). Из сказанного ясно, что подход, основанный на эффективном уравнении Шредингера для системы в среде, применим на временах  $t < \Gamma^{-1}$ , а для времен  $t \gg \Gamma^{-1}$ , когда  $\rho_i \approx \rho^c$ , эволюция описывается уравнением (27), которое на таких временах совпадает с (19). В частном случае взаимодействия частицы с равновесной средой (26) совпадает с уравнением, полученным в работе /14/.

#### 4. Кинетическое уравнение для примесных частиц в жидкости

В качестве следующего примера использования системы (19), (20) рассмотрим вывод кинетического уравнения для бесспиновых частиц в равновесной жидкости. Вначале ограничимся однородным случаем, когда функция распределения примесных частиц  $f(\vec{p}, t)$  не зависит от координат и определяется формулой /2/:

$$f(\vec{p}, t) = S_p \rho_i \{ \rho_i(t) a_{\vec{p}}^+ a_{\vec{p}} \},$$

где  $a_{\vec{p}}^+$  и  $a_{\vec{p}}$  - операторы рождения и уничтожения примесной частицы с импульсом  $\vec{p}$ . Умножая обе части уравнения (19) на  $a_{\vec{p}}^+ a_{\vec{p}}$  и беря след по состояниям динамической системы, получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} S_p \rho_i \{ [H_i + V, a_{\vec{p}}^+ a_{\vec{p}}] \} - \\ &- \frac{i}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \{ S_p \rho_i \{ V(t'), [V, a_{\vec{p}}^+ a_{\vec{p}}] \} \} - \\ &- \sum_{\alpha} S_p \rho_i \{ V(t'), \hat{y}_{\alpha} \} \frac{\partial}{\partial y_{\alpha}} S_p \rho_i \{ V, a_{\vec{p}}^+ a_{\vec{p}} \} \}. \end{aligned} \quad (31)$$

Огрубленный статистический оператор равновесной жидкости дается большим каноническим распределением Гиббса:

$$\mathcal{E} = \exp \left\{ \Omega - \beta (\mathcal{H}_2 - \mu \hat{N}) \right\}, \quad (32)$$

где  $\Omega$  и  $\mu$  - термодинамический и химический потенциалы жидкости,  $\beta$  - обратная температура,  $\hat{N}$  - оператор полного числа частиц жидкости.

Взаимодействие  $V$  между частицей и жидкостью запишем в виде:

$$V = \int d\vec{r} d\vec{r}' \varphi^+(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) U(\vec{r} - \vec{r}') \varphi^+(\vec{r}') \varphi(\vec{r}').$$

Операторы  $\varphi^+$  и  $\varphi$  описывают рождение и уничтожение частиц жидкости,  $U$  - потенциал взаимодействия,  $\varphi^+$  и  $\varphi$  связаны с  $a_{\vec{p}}^+$  и  $a_{\vec{p}}$  обычными формулами:

$$\varphi(\vec{r}) = \mathcal{V}^{-1/2} \sum_{\vec{p}} a_{\vec{p}} e^{i/\hbar \vec{p} \cdot \vec{r}}, \quad \varphi^+(\vec{r}) = \mathcal{V}^{-1/2} \sum_{\vec{p}} a_{\vec{p}}^+ e^{-i/\hbar \vec{p} \cdot \vec{r}}. \quad (33)$$

Здесь  $\mathcal{V}$  - объем системы. При малой концентрации примесей можно пренебречь примесь-примесным взаимодействием и считать  $\mathcal{H}_1$  гамильтонианом свободных частиц  $\mathcal{H}_1 = \sum_{\vec{p}} \epsilon_{\vec{p}} a_{\vec{p}}^+ a_{\vec{p}}$ , где  $\epsilon_{\vec{p}} = p^2/2M$  - энергия примесной частицы с импульсом  $\vec{p}$  и массой  $M$ . В линейном по концентрации примесей приближении вид кинетического уравнения для  $f(\vec{p}, t)$  не зависит от статистики примесных частиц. Кроме того, в этом приближении можно пренебречь вторым членом в подынтегральном выражении в (31). Благодаря постоянства плотности жидкости и  $[\mathcal{H}_1, a_{\vec{p}}^+ a_{\vec{p}}] = 0$  вклад первого члена правой части (33) обращается в нуль. После вышеуказанных упрощений и с учетом (32) уравнение (31) принимает вид:



$$\frac{\partial f_{\vec{p}}}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} S_{\vec{p}} \rho_1 \epsilon [v(\vec{r}), [\delta v, a_{\vec{p}}^+ a_{\vec{p}}]] \quad (34)$$

Вычисляя входящие в (34) коммутаторы, делая обычные расщепления типа  $\langle a_1^+ a_2^+ a_3 a_4 \rangle = \langle a_1^+ a_3 \rangle \langle a_2^+ a_4 \rangle + \langle a_2^+ a_3 \rangle \langle a_1^+ a_4 \rangle$  и оставляя только линейные члены по  $f(\vec{p}, t)$ , после несложных преобразований получим кинетическое уравнение в форме

$$\frac{\partial f_{\vec{p}}}{\partial t} = -\mathcal{V}^{-1/2} \sum_{\vec{p}'} (W_{\vec{p}'\vec{p}} f_{\vec{p}'} - W_{\vec{p}\vec{p}'} f_{\vec{p}}) \quad (35)$$

Уравнение (35) имеет вид уравнения Паули, причем вероятности перехода  $W_{\vec{p}\vec{p}'}$  связаны с рассеянием примесной частицы на флуктуациях плотности жидкости:

$$W_{\vec{p}\vec{p}'} = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d\vec{x} d\vec{x}' d\vec{x}'' u(\vec{x}) u(\vec{x}') \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')(\vec{x}''-\vec{x}+\vec{x}')\right\} \times \quad (36)$$

$$\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_{\vec{p}}-\epsilon_{\vec{p}'})t'\right\} \langle \delta N(\vec{x}, t') \delta N(0, 0) \rangle,$$

где коррелятор флуктуаций плотности для жидкости имеет вид:

$$\langle \delta N(\vec{r}, t) \delta N(\vec{r}', 0) \rangle = S_{\rho_2} \epsilon \left\{ \psi^+(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}', t) - \langle \psi^+ \psi \rangle \right\} \times$$

$$\times \left\{ \psi^+(\vec{r}') \psi(\vec{r}') - \langle \psi^+ \psi \rangle \right\}, \quad \langle \psi^+ \psi \rangle = S_{\rho_2} \epsilon \psi^+(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t).$$

В случае слабой неоднородности аналогичным методом можно получить следующее уравнение для функции распределения:

$$\frac{\partial f_{\vec{p}}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \epsilon_{\vec{p}}}{\partial \vec{p}} \frac{\partial f_{\vec{p}}(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} =$$

$$= -\mathcal{V}^{-1/2} \sum_{\vec{p}'} \left\{ W_{\vec{p}'\vec{p}} f_{\vec{p}'}(\vec{r}, t) - W_{\vec{p}\vec{p}'} f_{\vec{p}}(\vec{r}, t) \right\} \quad (37)$$

Вероятности  $W_{\vec{p}\vec{p}'}$  по-прежнему даются формулами (36).

Для тяжелой примесной частицы, когда  $m/m_0 \ll 1$  ( $m$  — масса частицы жидкости), интегрируем исходное уравнение



(37) сводится к дифференциальному.

Действительно, в этом случае относительное изменение импульса примесной частицы  $\frac{\Delta P}{P} \sim \sqrt{\frac{m'}{M}} \ll 1$ . Отсюда следует, что  $W_{\vec{p}\vec{p}'}$  имеет резкий максимум при  $\vec{p}' \approx \vec{p}$ . Разлагая  $f_{\vec{p}'}(\vec{r}, t)$  по степеням  $\vec{p}' - \vec{p}$  и учитывая, что  $\sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}\vec{p}'} = \sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}'\vec{p}}$ , получаем:

$$\frac{\partial f_{\vec{p}}}{\partial t} + \frac{\partial \epsilon_{\vec{p}}}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial f_{\vec{p}}}{\partial \vec{r}} = \frac{\partial \vec{J}_{\vec{p}}}{\partial \vec{p}}, \quad \vec{J}_{\vec{p}} = \psi^{-1} \sum_{\vec{p}'} (\vec{p} - \vec{p}') W_{\vec{p}\vec{p}'} f_{\vec{p}'} - \quad (38)$$

$$- (2\psi)^{-1} \sum_{\vec{p}', \beta} (\vec{p} - \vec{p}') (\vec{p} - \vec{p}')_{\beta} \frac{\partial f_{\vec{p}}}{\partial p_{\beta}} W_{\vec{p}\vec{p}'}$$

Из соображений симметрии следует, что

$$\psi^{-1} \sum_{\vec{p}'} (\vec{p}' - \vec{p}) W_{\vec{p}\vec{p}'} = \vec{P} \varphi(P), \quad \psi^{-1} \sum_{\vec{p}'} (\vec{p} - \vec{p}') (\vec{p} - \vec{p}')_{\beta} W_{\vec{p}\vec{p}'} = C(P) \delta_{\alpha\beta} + B(P) P_{\alpha} P_{\beta} / P^2. \quad (39)$$

С учетом соотношений (39) уравнение (38) принимает известный вид уравнения Фоккера-Планка для функции распределения броуновских частиц [15], если в формулах (39) считать величины  $\varphi$  и  $C$  не зависящими от импульса и положить  $B(P) = 0$ .

Однако в данном методе полученные с помощью формул (36) и (39) коэффициенты выражаются явно через рассеяние примесей на флуктуациях плотности жидкости.

## 5. Уравнение для статистического оператора спиновой системы в термостате

В качестве последнего примера рассмотрим вывод кинетического уравнения для статистического оператора  $\rho_1$  спиновой системы, взаимодействующей с равновесным термостатом (решеткой). Гамильтониан системы имеет вид:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_{SL}.$$

Здесь  $\mathcal{H}_S$  и  $\mathcal{H}_L$  - гамильтонианы спиновой системы и решетки, соответственно,  $\mathcal{H}_{SL}$  - спин-решеточное взаимодействие. В данном случае  $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_S$ ,  $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_L$ ,  $V = \mathcal{H}_{SL}$ . Поскольку теплоемкость решетки намного больше теплоемкости спиновой системы можно считать, что решетка находится в равновесном состоянии при неизменной обратной температуре и описывается каноническим распределением Гиббса

$$\rho_0 = \exp(-\beta_L \mathcal{H}_L) / S_{PL} \exp(-\beta_L \mathcal{H}_L).$$

Следовательно, среда характеризуется одним макроскопическим параметром  $\gamma_\alpha$ , в качестве которого можно выбрать среднюю энергию решетки  $E_L = S_{PL} \rho_0 \mathcal{H}_L$ , так что  $\hat{\gamma}_\alpha = \mathcal{H}_L$ . Поскольку  $[\rho_0, \mathcal{H}_L] = 0$ , то (19) принимает вид:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \left[ \rho_1, \mathcal{H}_S + S_{PL} \rho_0 \mathcal{H}_{SL} \right] - \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} S_{PL} \times \left\{ \left[ \rho_1 \rho_0, \mathcal{H}_{SL}(t') \right], \mathcal{H}_{SL} - S_{PL} \rho_0 \mathcal{H}_{SL} \right\}. \quad (40)$$

Если  $S_{PL} \rho_0 \mathcal{H}_{SL} = 0$ , то уравнение (40) совпадает с хорошо известным уравнением Блоха-Вангнесса-Редфильда /16/, с той разницей, что вместо разности  $\rho_1 - \rho_0$  в (40) входит произведение  $\rho_1 \rho_0$ , имеется "обрезающий" множитель  $e^{\epsilon t'}$  и интегрирование по  $t'$  с самого начала ведется с бесконеч-



ным нижним пределом. Подчеркнем, однако, что уравнение (40) получено нами последовательно без дополнительных предположений, помимо тех, которые составляют основу современной теории сокращенного описания неравновесных процессов. В частности, не требовалось, чтобы статистический оператор  $\rho$  полной системы (спин + решетка) обладал свойством мультипликативности  $\rho = \rho_s \rho_0$  во все моменты времени. В данном рассмотрении это условие накладывается только в отдаленном прошлом  $t \rightarrow -\infty$ .

### 6. Заключение

Изложенный в данной работе метод применим ко многим необратимым явлениям. В частности, он позволяет построить последовательную теорию магнитного резонанса в жидкостях, теорию молекулярных движений различных комплексов в твердых телах, теорию необратимых процессов в связанных спин-фононных системах и т.п. Во всех этих задачах выделение подсистем не представляет труда.

Кроме задач подобного типа с помощью точных кинетических уравнений (16) можно исследовать системы с сильными флуктуациями /17/, если сильно флуктуирующие степени свободы рассматривать в качестве динамической системы и описывать их статистическим оператором  $\rho_s(t)$ , а остальные степени свободы характеризовать макроскопическими параметрами  $\gamma_{\alpha}(t)$ . В эту схему можно последовательно включить также системы с "быстрыми" и "медленными" степенями свободы. Использование статистического оператора  $\rho_s(t)$  позволяет единично



образом описывать необратимые процессы как в классических, так и в квантовых системах. Отметим, что  $\rho_i(t)$  заменяет функцию распределения  $f(a_1, \dots, a_n, t)$  "грубых" переменных  $a_1, \dots, a_n$ , которая используется в работах [17] при выводе уравнений Фоккера-Планка для классических и квантовых систем.

Основная трудность в указанных нами ситуациях заключается в физически обоснованном делении степеней свободы на группы и получении адекватного выражения для взаимодействия  $V$  между этими группами. В каждой конкретной задаче этот вопрос требует самостоятельного исследования.

В заключение авторы выражают глубокую благодарность Д.Н.Зубареву за ценные замечания, В.Г.Барьяхтару, Л.Л.Буишвили и В.П.Калашникову за полезные обсуждения.

### ПРИЛОЖЕНИЕ

В настоящем приложении дается отличный от приведенного в основном тексте вывод обобщенных кинетических уравнений марковского типа. Будем исходить из такого разбиения гамильтониана системы

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + V,$$

в котором  $\mathcal{H}_2$  - гамильтониан среды, включающий все ее внутренние взаимодействия, а  $V$  является взаимодействием динамической системы со средой. Обозначим через  $\mathcal{G}(t) \equiv \mathcal{G}(Y_\alpha^0(t))$  грубленный статистический оператор среды в отсутствие динамической системы.  $\mathcal{G}(t)$  является решением уравнения Диувиля с бесконечно малым источником

$$\frac{\partial \epsilon(t)}{\partial t} + iL_2 \epsilon(t) = -\eta \{ \epsilon(t) - \epsilon_q(t) \}, \quad \eta \rightarrow +0, \quad (III)$$

зависящим от времени неявно, через "невозмущенные" макроскопические параметры:

$$\gamma_\alpha^0(t) = S_{P_2} \epsilon(t) \hat{\gamma}_\alpha = S_{P_2} \epsilon_q(t) \hat{\gamma}_\alpha, \quad (III)$$

$\epsilon_q(t)$  - квазиравновесный оператор среды (4), зависящий от  $\gamma_\alpha^0(t)$ ;  $\epsilon(t)$  описывает неравновесную среду при  $V=0$ . Явный вид функции  $\epsilon(\gamma_\alpha^0(t))$  предполагается известным.

Для наших целей удобнее выразить решение уравнения Лиувилля через  $\epsilon(\gamma_\alpha^0(t))$  и  $\rho_1(t)$ , а потом уже, установив соотношение между  $\gamma_\alpha^0(t)$  и  $\gamma_\alpha(t)$ , найти функцию  $\rho(\gamma_\alpha(t), \rho_1(t))$ . Такая постановка задачи о нахождении неравновесного статистического оператора соответствует квантовой механической теории возмущений, когда решение возмущенной задачи находится с помощью предполагаемого известным решения невозмущенной задачи.

В соответствии со сказанным выбираем оператор проектирования вида

$$\tilde{P}(t) \mathcal{H} = \epsilon(t) S_{P_2} \mathcal{H}. \quad (III)$$

Выбор (III) максимально использует информацию о среде в отсутствие динамической системы.

Нетрудно убедиться, что оператор проектирования обладает следующими свойствами:

$$\tilde{P}(t) \rho(t) = \rho_1(t) \epsilon(t), \quad \tilde{P}(t) \frac{\partial \rho}{\partial t} = \epsilon(t) \frac{\partial \rho_1}{\partial t}, \quad (IV)$$

$$\tilde{P}(t) \tilde{P}(t) \mathcal{H} = \tilde{P}(t) \mathcal{H}.$$

Вычитая из обеих частей уравнения Лиувилля

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + iL \right) \rho = -\epsilon(1 - \tilde{P}) \rho \quad (IV)$$



выражение  $(\frac{\partial}{\partial t} + iL_0)\tilde{\Phi}\rho$ , получим

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL_0 + \varepsilon\right)(1 - \tilde{\Phi})\rho = -iL_V\rho - iL_0\tilde{\Phi}\rho - \frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Phi}\rho. \quad (16)$$

Использование формул (III, 3.4) дает:

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Phi}\rho = \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho) = \tilde{\Phi}\frac{\partial\rho}{\partial t} - iL_2\tilde{\Phi}\rho. \quad (17)$$

Действуя оператором  $\tilde{\Phi}$  на уравнение (16) слева, получаем

$$\tilde{\Phi}\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\tilde{\Phi}i(L_0 + L_V)\rho = iL_1\tilde{\Phi}\rho - \tilde{\Phi}iL_V\rho, \quad (18)$$

поскольку  $\tilde{\Phi}iL_2\rho = 0$ ,  $\tilde{\Phi}iL_1\rho = iL_1\tilde{\Phi}\rho$ . Поэтому (17) принимает вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Phi}\rho = -iL_0\tilde{\Phi}\rho - \tilde{\Phi}iL_V\rho. \quad (19)$$

Подстановка (19) в (16) снова приводит к дифференциальному уравнению (II) и, соответственно, к интегральному уравнению

$$(12) \quad \rho(t) = \tilde{\Phi}(t)\rho(t) - \int_{-\infty}^0 dt' e^{\varepsilon t'} e^{iL_0 t'} (1 - \tilde{\Phi}(t+t')) iL_V\rho(t+t'), \quad (110)$$

но с другим оператором проектирования  $\tilde{\Phi}(t)$  (13).

С помощью очевидных соотношений

$$e^{iL_0 t'} \varepsilon(t+t') = \varepsilon(t), \quad e^{iL_0 t'} \tilde{\Phi}(t+t') = \tilde{\Phi}(t), \quad \rho(t+t') = e^{-iL t'} \rho(t)$$

уравнение (110) записывается в виде:

$$\rho(t) = \tilde{\Phi}(t)\rho(t) - (1 - \tilde{\Phi}(t)) \int_{-\infty}^0 dt' e^{\varepsilon t'} iL_V(t) e^{iL_0 t'} e^{-iL t'} \rho(t) \quad (111)$$

$$iL_V(t)A = \frac{1}{i\hbar} [H, V(t)]$$

и имеет формальное решение.

$$\rho(t) = \left\{ 1 + \tilde{\mathcal{X}}(t) \right\}^{-1} \tilde{\Phi}(t)\rho(t), \quad (112)$$



где

$$\tilde{\mathcal{I}}(t) = (1 - \tilde{\mathcal{F}}(t)) \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} e^{iL_V(t')} e^{-iL_0 t'} e^{-iL t'} \quad (III3)$$

Согласно общей идеологии,  $\rho(t)$  является функцией  $\rho_0(t)$  и  $\chi_\alpha(t)$ , в то время как формула (III2) выражает  $\rho(t)$  через  $\rho_0(t)$  и вспомогательные величины  $\chi_\alpha^0(t)$ .

С помощью (I) и (III2) легко выразить  $\chi_\alpha^0(t)$  через  $\chi_\alpha(t)$ :

$$\chi_\alpha^0(t) = \chi_\alpha(t) + S_P \left\{ \beta_\alpha (1 + \tilde{\mathcal{I}}(t))^{-1} \tilde{\mathcal{I}}(t) \tilde{\mathcal{F}}(t) \rho(t) \right\} \quad (III4)$$

Аналогично тому, как это сделано при выводе уравнений (I6), можно получить систему кинетических уравнений марковского типа:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + iL_V \rho &= -S_{P_2} \left\{ iL_V (1 + \tilde{\mathcal{I}}(t))^{-1} \tilde{\mathcal{F}}(t) \rho(t) \right\}, \\ \frac{\partial \chi_\alpha(t)}{\partial t} &= S_P \left\{ (1 + \tilde{\mathcal{I}}(t))^{-1} \tilde{\mathcal{F}}(t) \rho(t) \cdot iL \hat{\chi}_\alpha \right\}. \end{aligned} \quad (III5)$$

(III5) можно рассматривать как параметрическую форму обобщенных кинетических уравнений /18/.

Исключая  $\chi_\alpha^0(t)$  с помощью (III4), можно, в принципе, получить замкнутую систему кинетических уравнений для  $\rho(t)$  и  $\chi_\alpha(t)$ . Структура системы (III5) и соотношения (III4) таковы, что позволяют без труда получать любое приближение по  $\sqrt{\epsilon}$ .

Поступила 12.1.1987

Грузинский политехнический институт,  
кафедра общей  
и теоретической  
физики





1. Д.Н.Зубарев. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: "Наука", 1971.
2. А.И.Ахизер, С.В.Пелетминский. Методы статистической физики. М.: "Наука", 1977.
3. Н.Н.Боголюбов, Н.М.Крылов. Записки кафедры математично фізики Інституту будівельної механіки АН УРСР, Київ, 1939, 4, 5-80.
4. Н.Н.Боголюбов. Киев:Изд.АН УССР,1945,115-137;Н.Н.Боголюбов.Избранные труды в трех томах. Киев: "Наукова думка", 1970, т.2,5-76; 77-98.
5. N.N. Bogolubov. Preprint E17-11822, Dubna: JINR, 1978.
6. Н.Н.Боголюбов (мл.).ТМФ,1979,40, № 1, 77-94.
7. Н.Н.Боголюбов, Н.Н.Боголюбов (мл.).ТМФ,1980,43,№ 1,3-17.
8. В.Ф.Лось. ТМФ, 1979, 39, № 3, 393-402; Э.Г.Петров. ТМФ, 1981, 46, № 1, 99-110; Г.О.Балабанян.ТМФ, 1981, 48,№ 1, 89-105.
9. Н.Н.Боголюбов. Проблемы динамической теории в статистической физике. - М.-Л.:Гостехиздат, 1946.
10. Д.Н.Зубарев. ТМФ, 1970, 3, № 2, 276-286; Д.Н.Зубарев, В.П.Калашников. ТМФ, 1970, 3, № 1, 126-134.
11. K. Kawasaki, J.D. Gunton, Phys Rev., 1973, 8A, N 4, 2049-2064.
12. Д.Н.Зубарев, В.П.Калашников. ТМФ, 1971, 7, № 3, 372-394.
13. Д.Н.Зубарев, В.П.Калашников. ТМФ,1970, 5, № 3,406-416.
14. В.П.Верещагин, М.П.Кашенко. ТМФ, 1980, 42, № 1, 133-138.
15. С.В.Пелетминский, А.А.Лценко. ЖЭТФ, 1967, 53, в 4(10), 1327-1339.



- 16. В. Гайтлер. Квантовая теория излучения. М.:ИЛ, 1956.
- 17. К.Валясек, Д.Н.Зубарев, А.Л.Куземский. ТМФ, 1970, 5, № 2; 281-292.
- 18. С.Чандрасекар. Стохастические проблемы в физике и астрономии. М.:ИЛ, 1947.
- 19. А.Абрагам. Ядерный магнетизм. М.:ИЛ, 1963, формула VIII.66<sup>a</sup>.
- 20. Д.Н.Зубарев, А.М.Хазанов. ТМФ, 1978, 34, № 1, 69-80.  
В.Г.Морозов. ТМФ, 1981, 48, № 3, 373-384.
- 21. А.Г.Квирикадзе. Сообщения АН ГССР, 1981, 104, № 2, 325-328.

Թ. Յոսիպով, Վ. Կրիկով

ՆԱԽԵՐԵՑՈՒՄ ԵՐԱՆՈՒԹՅԱՆ ԳՐԱԴԱՐԱՆԻ ԿՈՄԻՏԵ

ԿՆՏՐՈԼԻՆԵՐԻ ԿՈՄԻՏԵ

ԿՐԹՈՒՄ

Յանտրոնային ֆիզիկայի և աստղագիտության բաժնի գրքերի և հոդվածների հրատարակման համար անհրաժեշտ է հրատարակել հետևյալ գրքերը:

Վ. Կրիկով, Թ. Յոսիպով. Մոլորակային և աստղային ճառագայթների ֆիզիկա. Երևան, 1981 թ. 104 համար, 325-328 էջեր:

Ս. Չանդրասեքար. Ստոխաստիկական խնդիրներ ֆիզիկայի և աստղագիտության մեջ. Երևան, 1947 թ.:

Վ. Գայտլեր. Կվանտային տեսություն ճառագայթման. Մոսկվա, 1956 թ.:

Կ. Վալյասեկ, Դ. Ն. Յուբարև, Ա. Լ. Կուզեմսկի. Գործընկերություններ, 1970 թ., համար 5, համար 2, 281-292 էջեր:

Դ. Ն. Յուբարև, Ա. Մ. Խաչանով. Գործընկերություններ, 1978 թ., համար 34, համար 1, 69-80 էջեր:

Վ. Գ. Մորոզով. Գործընկերություններ, 1981 թ., համար 48, համար 3, 373-384 էջեր:

Ա. Գ. Կվիրիկաձե. Գրություններ ԳՀԱԳԻ, 1981 թ., 104 համար, համար 2, 325-328 էջեր:



M.Zviadadze, A.Kvirikadze

QUANTUM STATISTICAL DESCRIPTION OF A DYNAMIC SYSTEM  
IN A NONEQUILIBRIUM MEDIUM

Summary

The behaviour of a dynamic system has been investigated in a nonequilibrium medium. Formally exact generalized kinetic equations for the statistical operator of the dynamic system and macroscopic parameters of the medium are derived. The expressions of the collision integrals are adduced in the second order of the perturbation theory with respect to the interaction between the system and the medium. Simplest applications of the obtained equations are considered.



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
государственного университета

ქართული მშობის წიგნი რწმის თბილისის სახელმწიფო

უნივერსიტეტის შრომები

271, 1987

ИЗУЧЕНИЕ СПЕКТРОВ ЭПР И СОСТОЯНИЯ ИОНОВ  $Cu^{2+}$  В  
ЦЕОЛИТАХ ТИПА Э

Л.Я.Джавахишвили, Т.А.Хеладзе, О.Г.Хаханашвили

За последние годы методом ЭПР и оптической спектроскопии удалось получить немало интересных сведений о поведении ионов металлов первого переходного ряда в синтетических цеолитах. В круг изучаемых этими методами вопросов входят: координационное и валентное состояние катионов после катионного обмена (см. ниже) и после различных обработок, места локализации ионов в решетке цеолита, механизм адсорбции на них различных молекул, а также (в некоторых случаях) определенные выводы об активных центрах каталитических реакций.

Результаты оценок положения энергетических уровней и соответствующих констант спин-Гамильтониана ионов металлов первого переходного ряда с электронной конфигурацией  $3d^n$  в кристаллических полях с низкой симметрией — искаженные октаэдрические  $O_h$ , бипирамидные и тетраэдрические  $d$  окружения с симметрией  $C_{4v}$  и  $C_{3v}$  /1/, которые могут реализовываться в цеолитах, приведены в работе /2/. Таким образом, синтетические цеолиты представляют собой весьма интересные системы для изучения аномальных (необычных) координационных



состояний ионов металлов первого переходного ряда, введенных в них катионным обменом.

Перейдем теперь к рассмотрению результатов измерений методом ЭПР натриевых форм цеолитов типа  $\mathcal{E}$  (эрионит), содержащих ионы двухвалентной меди  $\text{Cu}^{2+}$ ; цеолит обозначается через  $\text{CuNa}\mathcal{E}$  и исследуется впервые.

Электронная конфигурация основного состояния свободного атома меди -  $4d^{10}4s$ ; ионы  $\text{Cu}^{2+}$  обладают электронной конфигурацией  $3d^9$  (ядерный спин  $I = 3/2$ ) и дают в магниторазоблаченных системах очень четкие спектры ЭПР, параметры которых сильно зависят от симметрии их ближайшего окружения.

Отметим, что для медных цеолитов есть хорошее согласие между данными различных авторов [3-7], однако в интерпретации экспериментальных результатов имеются расхождения. Например, часть авторов приписывают спектры ЭПР (полностью дегидратированных образцов) ионам  $\text{Cu}^{2+}$ , помещая их в места с симметрией  $C_{3v}$  [8,9], другая же часть - ионам меди в кристаллических полях с симметрией  $C_{4v}$  [5-7, 10,11].

Исходные поликристаллические образцы готовились путем катионного обмена натриевой формы цеолита в растворе ацетата меди с  $\text{pH} \leq 4$ . Были получены образцы с низкой концентрацией - 6% ионов  $\text{Cu}^{2+}$ , что соответствует  $\sim 1,1$  катионам на элементарную ячейку, и с высокой концентрацией - 12% ионов  $\text{Cu}^{2+}$ , что соответствует  $\sim 1,9$  катионам на ячейку. Исследовались они термически обработанными в интервале температуры  $100-450^\circ\text{C}$  и считались частично или полностью дегидратированными, а образцы, просушенные при  $20^\circ\text{C}$  - полностью гидратированными. Спектры снимались при температурах 78 и 300 К.



Полученные нами параметры ЭПР спектров  $CuNa\text{Э}$  цеолита дают возможность предполагать, что при обмене ионы двухвалентной меди входят в структуру цеолита в виде октаэдрических гексааквакомплексов  $[Cu \cdot 6H_2O]^{2+}$ . Поскольку, размеры гексааквакомплексов больше входных окон в малые полости цеолита, они, очевидно, располагаются в больших полостях. Спектры ЭПР гидратированных образцов  $CuNa\text{Э}$  цеолита - сигнал асимметрической формы, характерный для случая анизотропии  $g$ -фактора с разрешенной сверхтонкой структурой - свидетельствуют о том, что эти комплексы жестко связаны с решеткой после обмена уже при комнатной температуре. Известно, что во многих формах цеолитов /10,12/ и в цеолите типа  $L$ , исследованном нами ранее /13/, эти комплексы достаточно быстро вращаются ( $\omega \geq 10^9 \text{ сек}^{-1}$ ), что приводит к усреднению анизотропии  $g$ -фактора и перекрыванию линий сверхтонкой структуры (состоящей из четырех линий соответственно ядерному спину  $I = 3/2$ ). Спектр принимает свою обычную форму (неусредненного) при температуре жидкого азота. Отметим, что вышеприведенная разница в спектрах, снятых при комнатных температурах после обмена, зависит от условий (специфики) высушивания образцов и требует отдельного исследования.

Полученные нами значения ЭПР параметров для гидратированных образцов, т.е. спектры первого типа  $g_{||} = 2,36$ ;  $g_{\perp} = 2,08$ ;  $A_{||} = 125 \text{ э}$ ;  $A_{\perp}$  неразрешен;  $\frac{\Delta g_{||}}{\Delta g_{\perp}} = 4,5$ , - характерны для гексааквакомплексов меди, подтверждают предположение об октаэдрической координации ионов меди (см. также ниже). Спектры частично и полностью дегидратированных образцов (при термической обработке в интервале температур  $100-450^{\circ}\text{C}$ ) сопровож-



ждются, аналогично работе /8/, дискретным изменением сигнала первого типа и принимают значения:  $g_{II} = 2,33$ ;  $g_I = 2,36$ ;  $A_{II} = 155$  э;  $A_I$  неразрешен;  $\frac{\Delta g_{II}}{\Delta g_I} = 5,5$ ; этот спектр, второго типа, мы относим к ионам меди в координации с симметрией  $C_{4v}$  (квадратная пирамида и плоский квадрат). При прогреве цеолита из его структуры удалится основная масса адсорбированной воды; возможно, что роль одного или нескольких лигандов играют ионы кислорода решетки цеолита.

Напомним, что октаэдрические комплексы ионов меди  $Cu^{2+}$ , испытывая слабое тетрагональное искажение, соответствующее вытянутому (по оси четвертого порядка) октаэдру  $C_{4v}$ , дают спектры ЭПР, параметры которых описываются следующими выражениями:  $g_{II} = 2 + \frac{8\lambda}{\Delta_{B_1, B_2}}$ ;  $g_I = 2 + \frac{2\lambda}{\Delta_{B_1, E}}$  ( $\lambda > 0$ ,  $\Delta_{i,j} > 0$ ) где константы  $B_1$ ,  $B_2$ ,  $E$  - соответствующие представления энергетических уровней и их  $\psi$ -функции,  $\lambda$  - константа спин-орбитального взаимодействия. В слабом вытянутом октаэдре  $\Delta_{B_1, B_2}(\Delta_{II}) = \Delta_{B_1, E}(\Delta_I)$ , и поэтому  $\frac{\Delta g_{II}}{\Delta g_I} = 4$ ; при переходе от слабо вытянутого октаэдра к квадратной пирамиде или к плоскому квадрату  $\Delta_{II}$  не изменяется, а  $\Delta_I$  растет; следовательно, должна расти величина  $\frac{\Delta g_{II}}{\Delta g_I}$ , что и наблюдается на опыте, являясь одним из непосредственных доказательств перехода к симметрии  $C_{4v}$ . На рисунке представлена заимствованная из работы /7/ схема расщепления энергетических уровней иона двухвалентной меди в кристаллических полях различной симметрии. Происходящее при этом понижение координации сопровождается увеличением расщепления  $\Delta_I$  при приблизительном сохранении величины  $\Delta_{II}$ ; в результате, отношение  $\frac{\Delta g_{II}}{\Delta g_I}$  растет. Находясь в координации  $C_{4v}$  ионы  $Cu^{2+}$  тоже жестко свя-

заны с решеткой.

Интересно заметить, что при переходе от вытянутого октаэдра к сжатому выражение для компонент  $g$  - фактора принимает вид:  $g_{11} = 2$ ,  $g_{12} = 2 + \frac{6\lambda}{\Delta H, E}$ ; т.е. спектр должен обернуться, однако, такой случай на опыте не наблюдается.

Отметим также, что в нашем случае термическая обработка до температуры  $\sim 450^\circ\text{C}$  не приводит к изменению интенсивности линий, хотя другие авторы наблюдали сильное уменьшение сигнала ЭПР (например, в работе /10/ после прогрева образцов при температуре  $\sim 500^\circ\text{C}$  сигнал практически исчезал).

Вышеприведенная общая картина практически не зависит от концентрации ионов меди.

Нашим дегидратированным образцам была предоставлена возможность постепенно адсорбировать влагу с воздуха и перейти в гидратированное состояние, что подтверждалось по спектрам ЭПР. Повторная термическая обработка в тех же условиях ( $450^\circ\text{C}$  в продолжение 3 часов) восстанавливала спектр ЭПР ионов меди в его дегидратированную форму, но интенсивность линии возрастала в 5 - 7 раз.

Этот своеобразный результат подлежит обоснованию, так как, как было сказано выше, прогрев образцов во многих случаях приводит к уменьшению интенсивности линии. Возможно, что в цеолитах после катионного обмена кроме ионов  $\text{Cu}^{2+}$  имеются и ионы  $\text{Cu}^+$  и лишь после повторного прогрева в атмосфере кислорода восстанавливается валентное состояние  $\text{Cu}^{2+}$ . Возможно также, что в цеолите имеются и ионы  $\text{Cu}^{2+}$ , в координации с симметрией, например, плоского треугольника (см. рис.). В этом случае основное состояние иона  $\text{Cu}^{2+}$  орбитально вырожде-





но; слабое снятие вырождения в результате эффекта Яна-Теллера приводит к очень сильному уширению линии ЭПР, как из-за очень короткого времени спин-решеточной релаксации, так и большой величины анизотропии  $g$ -фактора, и линия становится ненаблюдаемой. При повторном прогреве эти ионы меняют свою координацию и переходят в координацию с симметрией квадратной пирамиды или плоского квадрата.

Нами также было обнаружено, что постепенный переход спектра дегидратированного образца в спектр гидратированного сопровождается промежуточным состоянием ионов меди, когда сверхтонкая структура спектров становится неразрешенной. Можно предполагать, что эти парамагнитные центры в промежуточном состоянии распределяются неравномерно, образуя кластеры, и обменное взаимодействие приводит к неразрешению СТС. Такое объяснение механизма перехода одной формы в другую может быть не единственным и требует самостоятельного изучения.

Поступила 19.1.1987

Кафедра  
физической химии

#### Литература

1. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика, 417.М., 1974.
2. И.Д.Михейкин. Г.М.Жидомиров, В.Б.Казанский, Успехи химии, 41, 909, 1972.
3. J.Owen. Proc. Roy. Soc., 227, 183, 1955.
4. R.Neiman, D.Kivelson. J.Chem. Phys., 35, 149, 156, 162, 1961.
5. J.T.Richardson. J.Cat., 9, 172, 1967.
6. J.T.Richardson. J.Cat., 9, 178, 1967.



7. J.T. Richardson. J.Cat., 9, 182, 1967.  
 8. U.Krüerke, P.Jung. Ztschr. phys. Chem., 58, 53, 1968.  
 9. H.B.Slot, J.L. Verbeek. J.Cat. 12, 216, 1968.  
 10. И.Д.Михейкин, В.А.Швец, В.Б.Казанский. Кинетика и катализ, 11, 747, 1970.  
 11. И.Д.Михейкин, Ю.И.Печерская, В.Б.Казанский. Кинетика и катализ, 12, 191, 1971.  
 12. H.Nicola, D.Stamires, I.Turkevich. J.Chem. Phys., 42, 3684, 1965.  
 13. Б.Г.Берулава, Л.Я.Джавахишвили, Т.А.Хеладзе. Сообщ. АН СССР, 103, 577, 1981.

რ. ჯავახიშვილი, თ. ხელაძე, თ. ხახანიშვილი

$Cu^{2+}$  იონების ეპრ სპექტრების და მათი მდგომარეობის  
 შესწავლა  $\theta$ - ტიპის ფეროციტებში

რეზიუმე

მონიშნულ ეპრ მეთოდით შეისწავლება  $Cu^{2+}$  იონთა მდგომარეობის (კოორდინაციის) ცვლილება  $CuNa\theta$  ფეროციტში მისი თერმული რამპდავებისას. გამოიკვლია სპინ-ჰამილტონიანის მუდმივები და დანარჩენები, რომ ფეროციტის ეპრ სპექტრისას  $Cu^{2+}$  იონების კოორდინაცია რამბდება.

L.Javakhistvili, T.Kheladze, O.Khakhaniashvili

STUDY OF THE EPR SPECTRA OF  $Cu^{2+}$  IONS AND THEIR STATE  
 IN  $\theta$ -TYPE ZEOLITES

Summary

The change of state of  $Cu^{2+}$  ions in  $CuNa\theta$  zeolite at thermal treatment of the samples has been studied by the EPR method. The spin-

hamiltonian constants are measured, and it is shown that at dehydration the coordination  $\text{Cu}^{2+}$  ions lowers.

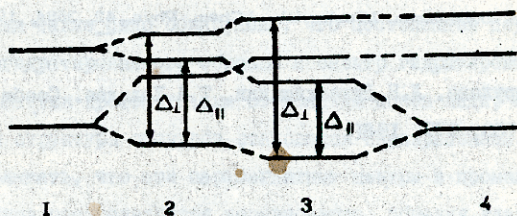


Рис. 1 - октаэдр, 2 - квадратная пирамида,  
3 - плоский квадрат, 4 - плоский треугольник



Труды Тбилисского ордена Трудового Красного Знамени  
государственного университета

თბილისის მხრობის მეცნიერებათა აკადემიის სახელმწიფო  
უნივერსიტეტის შრომები  
271, 1987

ПРИМЕНЕНИЕ РЕЛЯТИВИСТСКОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА  
ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ

И.Ш.Вашакидзе, П.И.Гудавадзе, Г.А.Чилашвили

Как известно, свободный релятивистский электрон описы-  
вается уравнением Дирака

$$\{E - (\vec{\alpha}, \vec{p}) - \beta m\} \psi(\vec{r}) = 0 \quad (1)$$

(в единицах  $\hbar = c = 1$ ). К сожалению, не существует такого же  
ковариантного уравнения для произвольной частицы (со спином  
 $1/2$ ), движущейся в потенциальном поле, хотя такого типа за-  
дачи часто рассматриваются модифицированием уравнения (1).  
Единственный случай, когда в уравнение (1) взаимодействие  
можно включить ковариантным образом, есть внешнее электро-  
магнитное поле, описываемое  $(\vec{A}, i\varphi)$  четырехтензором.  
При рассмотрении задачи атома водорода в уравнение (1) под-  
ставляется лишь статическое кулоновское поле и поскольку оно  
является четвертой компонентой  $(\vec{A}, i\varphi)$  вектора, это до-  
водит к полной энергии, так как она тоже является четвер-  
той компонентой четырехвектора энергии-импульса.

Несмотря на это, для решения практических задач движе-  
ния релятивистской частицы в определенном потенциальном поле  
мы вынуждены обращаться к уравнению Дирака. Но часто не ясно,



какому члену в уравнении (1) надо добавлять нужный нам потенциал.

В уравнение Дирака входят члены, представленные различными типами матриц. Энергия, например, умножается на единичную матрицу, второй член  $(\vec{\alpha}, \vec{p})$  - антидиагональная матрица, а последний  $\beta m$  член является диагональной матрицей. В случае кулоновского поля, являющегося четвертой компонентой четырехвектора, оно должно умножаться на ту же матрицу, что и энергия. Но существует другой вариант добавления потенциальной энергии /1/. Если будем считать, что потенциал является мировой постоянной, то его можно добавлять  $\beta m$  члену, т.е. массе.

В последнее время вышерассмотренные варианты включения потенциальной энергии в уравнение Дирака учитываются в виде  $\frac{1}{2}(1+\beta)V$  члена, т.е. потенциал добавляется к энергии и массе, равным весами /2-II/.

Ясно, что потенциальная энергия представляется следующей матрицей:

$$\frac{1+\beta}{2}V = \begin{pmatrix} V & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Для такого потенциала уравнение Дирака существенно упрощается и принимает такой вид:

$$\begin{aligned} (E-m-V)\Psi - (\vec{\alpha}, \vec{p})\chi &= 0, \\ (E+m)\chi - (\vec{\alpha}, \vec{p})\Psi &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Определив из второго уравнения этой системы  $\chi$  и подставив в первое уравнение, получим /2/

$$\{-\vec{p}^2 + (E+m)(E-m-V)\}\Psi = 0, \quad (4)$$



которые можно рассматривать как уравнение Шредингера  $E^2 - m^2$  с полной энергией и эффективным потенциалом  $U(r) = (E+m)V(r)$ , меняющим знак при  $E < m$ . Если ввести обозначения:

$$E_s = \frac{1}{2m} (E+m)(E-m), \quad V_s = \frac{1}{2m} (E+m)V. \quad (5)$$

то уравнение (4) совпадает с уравнением Шредингера. Это значит, что, зная решения уравнения Шредингера для какого-нибудь взаимодействия, можно без особого труда найти и решение уравнения (4). Естественно, что уравнение (4) можно назвать "релятивистским уравнением Шредингера". В этом уравнении релятивистские эффекты учтены лишь на кинематическом уровне. В нерелятивистском пределе, когда  $E \rightarrow E' + m$ ,  $E + m \rightarrow 2m$ , уравнение (4) совпадает с уравнением Шредингера.

Соответствующее уравнению (4) радиальное уравнение будет иметь следующий вид:

$$\frac{d^2 G}{dr^2} - \frac{\chi(\chi+1)}{r^2} + 2m(E_s - V_s)G(r) = 0, \quad (6)$$

где  $\chi = \ell(\ell+1) - j(j+1) - 1/4$ . Уравнение (6) оказалось очень плодотворным для выяснения некоторых особенностей системы кварков, что в свою очередь указывает на то, что добавление к массе части потенциальной энергии в уравнении Дирака имеет серьезную основу. Кроме того, такое добавление в случае положительных потенциалов снимает парадокс Клейна, что также является немаловажным фактором.

Но релятивистское уравнение Шредингера имеет большой недостаток, а именно: так как  $\chi(\chi+1) = \ell(\ell+1)$ , то оно не содержит спинорбитального взаимодействия. Поэтому, очень важ-



но в уравнении Дирака потенциальную матрицу подобрать в таком виде, чтобы все привлекательные стороны уравнения (6) были сохранены и чтобы уравнение содержало спин-орбитальное взаимодействие.

Нам кажется, что для этого в уравнении Дирака потенциал должен иметь следующий общий матричный вид:

$$\begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где центральные взаимодействия  $V_{ik}(r)$  являются диагональными матрицами второго ранга. Матрица (7) составлена с помощью линейной комбинации трех дираковских матриц:  $1, \rho_2$  и  $\rho_3$ . Для сохранения пространственной четности необходимо, чтобы коэффициент при  $\rho_2$  равнялся нулю. Поэтому матрица взаимодействия должна иметь следующий вид:

$$\begin{pmatrix} V & 0 \\ 0 & U \end{pmatrix} = \frac{1+\beta}{2} V + \frac{1-\beta}{2} U. \quad (8)$$

Отсюда видно, что релятивистское уравнение Шредингера является следствием равенства нулю потенциала  $U$ , а обычное уравнение Дирака - следствием равенства  $U=V$ .

Для потенциала (9) уравнение Дирака принимает вид

$$\begin{aligned} (E-m-V)\Phi - (\vec{\sigma}, \vec{P})\chi &= 0, \\ (E-m-U)\chi - (\vec{\sigma}, \vec{P})\Phi &= 0 \end{aligned} \quad (9)$$

Допустим, что  $V$  - произвольный потенциал, а  $U$  удовлетворяет условию

$$U \ll E+m. \quad (10)$$

В этом случае можно определить  $\chi$  следующим образом:

$$\chi(\vec{r}) = \frac{1}{E+m} \left\{ 1 + \frac{U}{E+m} + \dots \right\} (\vec{\sigma}, \vec{P}) \Phi. \quad (11)$$

Тогда первое уравнение системы (9) дает

$$\left\{ -\vec{P}^2 + (E+m)(E-m-V) - \frac{(\vec{\sigma}, \vec{P}) U (\vec{\sigma}, \vec{P})}{E+m} \right\} \Phi = 0, \quad (12)$$

являющееся релятивистским уравнением Шредингера, содержащим спинорбитальное взаимодействие и другие релятивистские поправки того же порядка.

Если в уравнении (12) сохранить лишь член спин-орбитального взаимодействия и перейти к уравнению для радиальных функций, окончательно будем иметь:

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + 2m[E_S - V_S - \frac{1}{m(E+m)} \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} (\vec{\sigma}, \vec{l})] \right\} G(r) = 0. \quad (13)$$

Это уравнение, в отличие от уравнения (6), содержит спинорбитальное взаимодействие и, при соблюдении условия (10), свободно от парадокса Клейна.

В частном случае для потенциальной ямы:  $U = -U_0$ , когда  $U \leq U_0$ , и  $U = 0$ , когда  $U > U_0$ ; с учетом того, что  $2(\vec{l}, \vec{\sigma}) = -l(l+1)$ , уравнение (13) принимает вид

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + 2m[E_S - V_S - \frac{1}{m(E+m)} \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} (-l(l+1))] \right\} G(r) = 0$$





$$\frac{\mathcal{P}+1}{2m(E+m)} \left( \frac{M_0}{r_c} \right) \delta(r-r_c) \Big] G(r) = 0. \quad (14)$$

Это уравнение можно применить для решения широкого круга задач, причем привлекательным является то, что учет спин-орбитального взаимодействия в рассмотренном случае эквивалентен следующему граничному условию:

$$\left( \frac{1}{G} \frac{dG}{dr} \right)_{r_c+0} - \left( \frac{1}{G} \frac{dG}{dr} \right)_{r_c-0} - \frac{\mathcal{P}+1}{E+m} \left( \frac{M_0}{r_c} \right) = 0, \quad (15)$$

где  $G(r)$  является решением уравнения (14) без последнего члена, и предполагается, что потенциал  $V(r)$  не имеет особенностей в точке  $r=r_c$ .

Рассмотрим примеры решения релятивистского уравнения Шредингера для некоторых квантовомеханических задач. В первую очередь будем изучать потенциал следующего вида:

$$V(r) = \frac{\theta V_0}{r_c^2} \delta(r-r_c), \quad (16)$$

где  $\theta = -1$  - в случае притяжения и  $\theta = +1$  - в случае отталкивания;  $V_0$  - глубина взаимодействия, а  $r_c$  - радиус сферы, где потенциал имеет бесконечное значение. Функция Дирака в качестве потенциала взаимодействия часто рассматривается в ядерной физике. Основной причиной этого, в конечном счете, является то, что для такого потенциала математические расчеты, как в случае рассеяния, так и для связанного состояния, можно провести до конца.

Такие потенциалы в нерелятивистском случае хорошо изучены. Известно, что применение потенциала в виде дельта-функции

Дирака эквивалентно определенному граничному условию в точке  $\eta = \eta_c$ . Это граничное условие достаточно для определения собственных значений энергии. В частности, собственные значения энергий определяются уравнением /12-15/

$$\alpha i_{\ell}(\alpha \eta_c) K_{\ell}(\alpha \eta_c) = \frac{1}{2\mu V_0}, \quad (17)$$

где  $\mu$  - приведенная масса,  $\alpha^2 = 2\mu E$  - параметр энергий связи, а  $i_{\ell}(z)$  и  $K_{\ell}(z)$  - модифицированные сферические функции Бесселя /17/:

$$i_{\ell}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} I_{\ell+1/2}(z), \quad K_{\ell}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} K_{\ell+1/2}(z). \quad (18)$$

Уравнение (17) для данного  $\ell$  имеет единственное решение.

Интересно рассмотрение этой же задачи в теории Дирака. Покажем, что в этой теории нахождение собственных значений в случае потенциала (16) невозможно с помощью граничных условий.

Напишем систему уравнений Дирака для радиальных функций /16/:

$$\begin{aligned} \frac{dG}{d\eta} + \frac{2}{\eta} G - (E + m - V(\eta)) F(\eta) &= 0, \\ \frac{dF}{d\eta} - \frac{2}{\eta} F + (E - m - V(\eta)) G(\eta) &= 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Подставим в эту систему потенциал (16) и проинтегрируем уравнения в малом интервале ( $\eta_c - \epsilon$ ,  $\eta_c + \epsilon$ ). Легко показать, что в точке  $\eta = \eta_c$  имеют место следующие граничные условия:



$$G(\gamma_c+0) - G(\gamma_c-0) - \frac{\theta V_0}{2\gamma_c^2} [F(\gamma_c+0) + F(\gamma_c-0)] = 0, \quad (20)$$

$$F(\gamma_c+0) - F(\gamma_c-0) - \frac{\theta V_0}{2\gamma_c^2} [G(\gamma_c+0) + G(\gamma_c-0)] = 0,$$

откуда ясно, что как  $G(\gamma)$ , так и  $F(\gamma)$ - функции в точке  $\gamma = \gamma_c$  имеют конечный разрыв, а первые производные являются бесконечными. Это значит, что задача отыскания собственных значений не сводится к граничным условиям. Поэтому, если в случае потенциала (16) необходимо каким-то образом учесть релятивистские эффекты, то мы можем обратиться к релятивистскому уравнению Шредингера. Легко показать, что для потенциала (16) уравнение (6) в точке  $\gamma = \gamma_c$  эквивалентно следующим граничным условиям:

$$G(\gamma_c+0) - G(\gamma_c-0) = 0, \quad (21)$$

$$F(\gamma_c+0) - F(\gamma_c-0) - \frac{\theta V_0}{\gamma_c^2} G(\gamma_c) = 0, \quad (22)$$

$$\left(\frac{dG}{d\gamma}\right)_{\gamma_c+0} - \left(\frac{dG}{d\gamma}\right)_{\gamma_c-0} - (E+m) \frac{\theta V_0}{\gamma_c^2} G(\gamma_c) = 0. \quad (23)$$

Как видно из этих формул, в точке  $\gamma = \gamma_c$  функция  $G(\gamma)$  непрерывна,  $F(\gamma)$  имеет разрыв конечной величины. Соответственно  $\frac{dG}{d\gamma}$  имеет конечный разрыв, а разрыв  $\frac{dF}{d\gamma}$  равен бесконечности. Ниже мы увидим, что эти граничные условия достаточны для определения собственных значений энергий.

Рассмотрим случай притяжения ( $\theta = -1$ ) и изучим связанное состояние. В этом случае  $E < m$ . Обозначим

$$w^2 = m^2 - E^2 = \epsilon(2m - \epsilon), \quad (24)$$



где  $0 \leq \epsilon \leq 2m$  - энергия связи. Уравнение (6) в случае потенциала (16) для  $\kappa < \kappa_c$  и  $\kappa > \kappa_c$  имеет следующие решения:

$$g(\kappa) = \frac{G(\kappa)}{\kappa} = A_p i_p(\omega\kappa) K_p(\omega\kappa_c), \quad \kappa < \kappa_c, \quad (25)$$

$$g(\kappa) = \frac{G(\kappa)}{\kappa} = A_p i_p(\omega\kappa_c) K_p(\omega\kappa), \quad \kappa > \kappa_c,$$

где  $A_p$  - коэффициент нормировки. Применяя функции (25) в граничном условии (23), легко получим

$$W(i_p(\omega\kappa), K_p(\omega\kappa))_{\kappa=\kappa_c} + (\epsilon + m) \frac{V_0}{\kappa_c^2} g_p(\kappa_c) = 0, \quad (26)$$

где  $W$  - детерминант Вронского. Так как он равняется  $(\omega\kappa_c)^{-2}$ , то для собственных значений энергий будем иметь выражение

$$(2m - \epsilon) \omega i_p(\omega\kappa_c) K_p(\omega\kappa_c) = \frac{1}{V_0}, \quad (27)$$

которое, как и можно было ожидать, от уравнения (17) отличается лишь кинематическими множителями.

Заметим, что с учетом (27) собственным функциям (25) можно придать и такой вид:

$$g_p(\kappa) = V_0(2m - \epsilon) \omega g_p(\kappa_c) K_p(\omega\kappa_c) i_p(\omega\kappa), \quad \kappa < \kappa_c, \quad (28)$$

$$g_p(\kappa) = V_0(2m - \epsilon) \omega g_p(\kappa_c) i_p(\omega\kappa_c) K_p(\omega\kappa), \quad \kappa > \kappa_c.$$

Ясно, что уравнение (27) также имеет единственное решение для данного  $\epsilon$ . В самом деле, левая сторона уравнения (27) - монотонно убывающая функция  $\omega\kappa_c$ , имеющая максимальное значение при  $\omega\kappa_c = 0$  (для фиксированного  $\kappa_c$ ); если применить асимптотические значения  $i_p(\omega\kappa_c)$  и  $K_p(\omega\kappa_c)$



Функций для малых  $w\eta_c$ , легко показать, что условие для существования уровня имеет следующий вид:

$$\frac{\eta_c}{2mV_0} \leq \frac{1}{2\ell+1}. \quad (29)$$

В частном случае, когда  $\ell=0$ , энергетический уровень определяется из уравнения

$$\frac{2\eta_c^2}{V_0} = \frac{2m-\epsilon}{w} (1 - e^{-2w\eta_c}). \quad (30)$$

Когда глубина ямы  $V_0 \rightarrow \infty$ , тогда  $\epsilon = 2m - \frac{\eta_c}{V_0}$ , а для  $\epsilon \rightarrow 0$ ,  $\frac{\eta_c}{V_0} = 2m$ .

Найдем теперь малый компонент дираковского биспинора. Из второго уравнения системы (3) для радиальной части  $f(r) = \frac{F(r)}{r}$  функция будем иметь:

$$f(r) = \frac{1}{E+m} \left\{ \frac{dg(r)}{dr} + \frac{2+1}{r} g(r) \right\}, \quad (31)$$

что с учетом собственных функций (25) дает

$$f_\ell(r) = \frac{A_\ell K_\ell(w\eta_c)}{E+m} \left\{ \frac{di_\ell(wr)}{dr} + \frac{2+1}{r} i_\ell(wr) \right\}, \quad r < \eta_c, \quad (32)$$

$$f_\ell(r) = \frac{A_\ell i_\ell(w\eta_c)}{E+m} \left\{ \frac{dK_\ell(wr)}{dr} + \frac{2+1}{r} K_\ell(wr) \right\}, \quad r > \eta_c.$$

Если для функций Бесселя применить рекуррентные соотношения, окончательно будем иметь:

$$\left. \begin{aligned} f_\ell(r) &= A_\ell \frac{w}{E+m} K_\ell(w\eta_c) i_{\ell-1}(wr), \quad r < \eta_c \\ f_\ell(r) &= -A_\ell \frac{w}{E+m} i_\ell(w\eta_c) K_{\ell-1}(wr), \quad r > \eta_c \end{aligned} \right\} (j = |\ell - \frac{1}{2}|) \quad (33)$$

$$\left. \begin{aligned} f_\ell(\eta) &= H_\ell \frac{W}{E+m} K_\ell(W\eta_c) i_{\ell+1}(W\eta), \quad \eta < \eta_c \\ f_\ell(\eta) &= -H_\ell \frac{W}{E+m} i_\ell(W\eta_c) K_{\ell+1}(W\eta), \quad \eta > \eta_c \end{aligned} \right\} (j = \ell + 1/2) \quad (34)$$

Из этих формул видно, что в точке  $\eta = \eta_c$  эти функции в действительности имеют разрыв. Величина разрыва не зависит от квантового числа  $j$  и определяется выражением

$$\Delta f_\ell = f_\ell(\eta_c + 0) - f_\ell(\eta_c - 0) = \frac{H_\ell}{W(E+m)\eta_c^2} \quad (35)$$

согласующимся с граничным условием (22).

Входящие в вышеполученные формулы коэффициенты  $H_\ell$ , в вышеполученных формулах можно определить из условия нормировки

$$H_\ell^2 \left( K_\ell^2(W\eta_c) \int_0^{\eta_c} i_\ell^2(W\eta) \eta^2 d\eta + i_\ell^2(W\eta_c) \int_{\eta_c}^\infty K_\ell^2(W\eta) \eta^2 d\eta \right) = 1 \quad (36)$$

Теперь для потенциала (16) найдем решение уравнения (14). Следовательно, в уравнении кроме дельта взаимодействия имеется потенциальная яма глубиной  $V_0$ . В этом случае соответствующее спинорбитальное взаимодействие также выражается дельта функцией. Таким образом, в конечном счете в уравнение (14) входят две дельта функций. Поэтому их результаты в точке  $\eta = \eta_c = \eta_0$  будут эквивалентными к следующему граничному условию:

$$\left( \frac{1}{G} \frac{dG}{d\eta} \right)_{\eta_0+0} - \left( \frac{1}{G} \frac{dG}{d\eta} \right)_{\eta_0-0} + \frac{E+m}{\eta_c^2} V_0 - \frac{\ell+1}{E+m} \left( \frac{U_0}{\eta_c} \right) = 0, \quad (37)$$

которое для собственных значений энергий дает следующее уравнение:



$$\left\{ W(2m-\epsilon) - \frac{\mathcal{P}+1}{2m-\epsilon} \left( \frac{U_0}{V_0} \gamma_c \right) \right\} i_\ell(w\gamma_c) k_\ell(w\gamma_c) = \frac{1}{V_0} \quad (38)$$

Когда спин-орбитальное взаимодействие отсутствует, тогда  $U_0 = 0$  и (38) совпадает с уравнением (27). В случае, когда  $\ell = 0$ ,  $\mathcal{P} = -1$  и в (38) поправка спин-орбитального взаимодействия равняется нулю.

Эту же задачу рассмотрим в импульсном представлении. В этом представлении взаимодействие (16) будет иметь сепарабельный вид:

$$\langle P | V_\ell | P' \rangle = \theta V_0 j_\ell(P\gamma_c) j_\ell(P'\gamma_c), \quad (39)$$

где форма потенциала определяется сферической функцией Бесселя

$$v_\ell(P) = j_\ell(P\gamma_c). \quad (40)$$

Очевидно, что эту задачу можно решить с помощью уравнения Дирака для нелокальных сепарабельных потенциалов. Потенциал нужно брать в виде (2), где надо учесть, что

$$\langle \vec{P} | V | \vec{P}' \rangle = \theta \sum_{JLM} \lambda_{JL} v_{JL}(P) v_{JL}(P') \Omega_{JLM} \left( \frac{\vec{P}}{P} \right) \Omega_{JLM} \left( \frac{\vec{P}'}{P'} \right); \quad (41)$$

$\lambda_{JL}$  - "глубина" потенциала,  $v_{JL}(P)$  - форма взаимодействия,  $\Omega_{JLM} \left( \frac{\vec{P}}{P} \right)$  - сферические гармонические функции [16]. Система уравнений Дирака будет иметь следующий вид:

$$(E-m) a_{j\ell}(P) + P b_{j\ell}(P) = \theta \lambda_{j\ell} v_{j\ell}(P) B_{j\ell} \quad (42)$$

$$(E+m) b_{j\ell}(P) + P a_{j\ell}(P) = 0,$$



где  $a_{j\ell}(p)$  и  $b_{j\ell}(p)$  являются Фурье-преобразованиями функции  $g(q)$  и  $f(q)$ , а  $B_{j\ell}$  постоянные равны

$$B_{j\ell} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} v_{j\ell}(q) a_{j\ell}(q) q^2 dq. \quad (43)$$

Из уравнения (42) определим  $b_{j\ell}(p)$ :

$$b_{j\ell}(p) = -\frac{p}{E+m} a_{j\ell}(p). \quad (44)$$

Подставив это выражение в первое уравнение системы (42), можно написать

$$a_{j\ell}(p) = B_{j\ell} \frac{\theta \lambda_{j\ell}(E+m)}{(E^2 - m^2) - p^2}. \quad (45)$$

Рассмотрим случай притяжения  $\theta = -1$  и изучим связанное состояние. Для этого допустим, что  $E < m$  и вспомним обозначение (24). Учитывая (45), из (43) легко получается уравнение для собственных значений

$$\frac{1}{\lambda_{j\ell}} = (2m - E) D_{j\ell}(w), \quad (46)$$

где

$$D_{j\ell}(w) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{v_{j\ell}^2(q) q^2 dq}{w^2 + q^2}. \quad (47)$$

Условие для существования корня выглядит следующим образом:

$$\frac{1}{2m\lambda_{j\ell}} > \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} v_{j\ell}^2(q) dq = D_{j\ell}(0). \quad (48)$$



Волновые функции будут иметь вид:

$$a_{j\ell}(p) = B_{j\ell} \lambda_{j\ell} (2m - \epsilon) \frac{v_{j\ell}(p)}{w^2 + p^2}, \quad (49)$$

$$b_{j\ell}(p) = -B_{j\ell} \lambda_{j\ell} \frac{p v_{j\ell}(p)}{w^2 + p^2}.$$

В нерелятивистском пределе  $w^2 \rightarrow 2m\epsilon = \alpha^2$ ,  $2m - \epsilon \rightarrow 2m$  из (46) и (49) получаем:

$$\frac{1}{2m\lambda_{j\ell}} = \frac{2}{\mathcal{F}} \int_0^\infty \frac{v_{j\ell}^2(q) q^2 dq}{\alpha^2 + q^2}, \quad (50)$$

$$a_{j\ell}(p) = \text{const} \frac{v_{j\ell}(p)}{\alpha^2 + p^2}, \quad b_{j\ell}(p) = 0.$$

Эти выражения совпадают с соответствующими выражениями нерелятивистской теории.

Применим полученные формулы для дельта потенциала Дирака. С учетом выражения (40) можно написать

$$D_\ell(w) = \frac{2}{\mathcal{F}} \int_0^\infty \frac{j_\ell^2(q\eta_c) q^2 dq}{w^2 + q^2} = w i_\ell(w\eta_c) K_\ell(w\eta_c). \quad (51)$$

Подстановкой этих значений в (46) опять получаем уравнение собственных значений (27). Волновые функции будут иметь следующий вид:

$$a_\ell(p) = B_\ell \lambda_\ell (E + m) \frac{j_\ell(p\eta_c)}{w^2 + p^2}, \quad (52)$$

$$b_\ell(p) = -B_\ell \lambda_\ell \frac{p j_\ell(p\eta_c)}{w^2 + p^2}.$$

Нормировочный коэффициент можно определить из условия нормировки волновых функций.

$$\int_0^{\infty} |a_p(p)|^2 p^2 dp + \int_0^{\infty} |b_p(p)|^2 p^2 dp = 1. \quad (53)$$

Если в эту формулу подставить значения  $a_p(p)$  и  $b_p(p)$  из (52), получим

$$\frac{\mathcal{P}}{2} B_p^2 \lambda_p^2 \{ (2m - \varepsilon) \Lambda_p(\omega) + L_p(\omega) \} = 1, \quad (54)$$

где

$$\Lambda_p(\omega) = \frac{2}{\mathcal{P}} \int_0^{\infty} \frac{j_p^2(q\gamma_c) q^3 dq}{(\omega^2 + q^2)^2}, \quad L_p(\omega) = \frac{2}{\mathcal{P}} \int_0^{\infty} \frac{j_p^2(q\gamma_c) q^4 dq}{(\omega^2 + q^2)^2} \quad (55)$$

Легко показать, что выражению (54) можно придать следующий вид:

$$\lambda_p^2 B_p^2 \left\{ D_p(\omega) - 2(m - \varepsilon)(2m - \varepsilon) \frac{\partial}{\partial \omega^2} D_p(\omega) \right\} = 1, \quad (56)$$

где  $D_p(\omega)$  определяется формулой (51).

Волновые функции координатного представления можно получить Фурье-преобразованием спиноров (52), при этом они совпадут с функциями (25).

Рассмотрим теперь задачу потенциальной ямы.

Предположим, что  $V(x)$  является потенциальной ямой притяжения глубиной  $V_0$  и шириной  $\eta_0$ .

Если ввести обозначения:

$$\beta^2 = (E + m)(E - m + V_0), \quad (57)$$

$$\omega^2 = m^2 - E^2,$$

где  $E - m + V_0 > 0$ , т.е.  $V_0 > m - E = \epsilon$  ( $V_0 > 2m$ ),  
то тогда решения уравнения (6) можно представить следующим  
образом:

$$G(r) = A_p \gamma j_p(\beta r), \quad r < r_0, \quad (58)$$

$$G(r) = A_p \frac{j_p(\beta r_0)}{K_p(w r_0)} \gamma K_p(w r), \quad r > r_0.$$

Собственные значения энергии в теории Дирака находятся из  
условия /16/

$$\left[ \frac{F(r)}{G(r)} \right]_{r_0+0} = \left[ \frac{F(r)}{G(r)} \right]_{r_0-0}, \quad (59)$$

которое для потенциальной ямы приводится к равенству

$$\frac{1}{E + m + V_0} \left\{ \frac{1}{G} \frac{dG}{dr} + \frac{\alpha}{r} \right\}_{r_0+0} = \frac{1}{E + m} \left\{ \frac{1}{G} \frac{dG}{dr} + \frac{\alpha}{r} \right\}_{r_0-0}. \quad (60)$$

А для релятивистского уравнения Шредингера, так же, как и  
для уравнения Шредингера, оно приводится к условию непрерыв-  
ности логарифмических производных, т.е.

$$\left( \frac{1}{G} \frac{dG}{dr} \right)_{r_0+0} = \left( \frac{1}{G} \frac{dG}{dr} \right)_{r_0-0}. \quad (61)$$

С помощью этого условия для собственных значений энергии  
получается уравнение

$$\frac{\beta j_{l-1}(\beta r_0)}{j_l(\beta r_0)} = - \frac{w K_{l-1}(w r_0)}{K_l(w r_0)}. \quad (62)$$

Это уравнение с точностью кинематических сомножителей совпа-  
дает с уравнением собственных значений потенциальной ямы в  
теории Шредингера.

Ясно, что уравнение (62) отличается от уравнения собственных значений, получаемых в теории Дирака. Это различие хорошо видно в частном случае  $l=0$ .

В самом деле, уравнение (62) дает выражение

$$\beta\gamma_0 \operatorname{ctg} \beta\gamma_0 = -w\gamma_0, \quad (63)$$

тогда, как в теории Дирака получается уравнение

$$\beta\gamma_0 \operatorname{ctg} \beta\gamma_0 = -w\gamma_0 \left(1 + \frac{V_0}{2m-E}\right) - \frac{V_0}{2m-E}. \quad (64)$$

Теперь в задачу потенциальной ямы ( $V = -V_0$ , когда  $r \leq r_0$ , и  $V = 0$ , когда  $r > r_0$ ) включим спин-орбитальное взаимодействие. Для решения этой задачи будем применять уравнение (14), в котором для определенности будем считать, что  $r_0 \geq r_c$ . Соответствующие радиальные волновые функции будут иметь следующий вид:

$$G(r) = A_l r J_l(\beta r), \quad r \leq r_0, \quad (65)$$

$$G(r) = B_l r K_l(wr) + C_l r i_l(wr), \quad r_0 < r < r_c,$$

$$G(r) = D_l r K_l(wr), \quad r > r_c,$$

где  $A_l, B_l, C_l$  и  $D_l$  — постоянные величины. Применяя условие непрерывности волновых функций в точке  $r = r_0$  и условие (15) в точке  $r = r_c$ , получим

$$\frac{\beta J_{l+1}(\beta r_0)}{J_l(\beta r_0)} = \frac{-w K_{l+1}(w r_0) + w i_{l+1}(w r_0) B_l}{K_l(w r_0) + i_l(w r_0) B_l}, \quad (66)$$

где  $B_l$  определяется формулой



$$B_l = \frac{wK_{l-1}(w\gamma_d) - \left[ w \frac{K_{l-1}(w\gamma_d)}{K_l(w\gamma_d)} - b_x \right] K_l(w\gamma_d)}{w i_{l-1}(w\gamma_d) + \left[ w \frac{K_{l-1}(w\gamma_d)}{K_l(w\gamma_d)} + b_x \right] i_l(w\gamma_d)}, \quad (67)$$

а через  $b_x$  обозначено следующее выражение:

$$b_x = \frac{l+1}{2m-\epsilon} \left( \frac{U_0}{\gamma_d} \right). \quad (68)$$

В частном случае, когда нет спин-орбитального взаимодействия  $b_x = 0$  и  $B_l = 0$ , выражение (66), как и следовало ожидать, переходит в (62). Когда  $\gamma_0 = \gamma_d$  уравнение собственных значений (66) упрощается и переходит в уравнение

$$\frac{\beta j_{l-1}(\beta\gamma_d)}{j_l(\beta\gamma_d)} = - \frac{wK_{l-1}(w\gamma_d)}{K_l(w\gamma_d)} + \frac{l+1}{2m-\epsilon} \left( \frac{U_0}{\gamma_d} \right). \quad (69)$$

В этом случае поправка спин-орбитального взаимодействия определяется вторым членом первой стороны уравнения (69). Когда  $l=0$ , то  $l+1=1$ , и поправка спин-орбитального взаимодействия равняется нулю.

В конце считаем своим приятным долгом поблагодарить профессора А.А.Хелашвили за интересную дискуссию.

Поступила 19.1.1987

Кафедра  
теоретической физики

### Литература

1. М. Гольдбергер, К.Ватсон. Теория столкновений, "Мир", М., (1967).
2. G.B.Smith, J.J.Tassie. Ann. of Phys., 65, 352 (1971).
3. А.А. Хелашвили, ТМФ, 51, 201 (1982).

4. M.G. do Amaral, N.Zagury. Phys. Rev., 27D, 2668 (1983).
5. J.S. Bell, H.Ruegg. Nucl.Phys., 98B, 151 (1975).
6. G.Eyre, H.Osborne. Nucl. Phys., 116B, 281 (1976).
7. M.Melnikoff, A.N.Zimerman. Lett. Nuovo Chim., 19, 174 (1977).
8. P.Leal Ferreira. Lett. Nuovo Chim., 20, 157 (1977).
9. P.Leal Ferreira, N.Zagury. Lett. Nuovo Chim., 20, 511 (1977).
10. M.G. do Amaral, N.Zagury. Phys.Rev., D26, 3119 (1982); D27, 2668 (1983).
11. P.Leal Ferreira, J.A.Helayuel, N.Zagury. Nuovo Chim., 55A, 215 (1980).
12. L.P.Kok, J.W. de Maay, H.H.Brouwer, H.Van Haeringen. Phys. Rev., C 26, 2381 (1982).
13. M.Bolsterli. Phys. Rev., 114, 1605 (1959).
14. Н.М.Петров, И.В.Симонов. *ЖФ*, 381 (1978).
15. В.Д.Мур, В.С.Петров. *ТМФ*, 65, 238 (1985).
16. А.И.Ахлезер, Э.Б.Берестецкий. Квантовая электродинамика. Москва, "Наука". (1981).
17. Справочник по специальным функциям, под редакцией М.Абрамовица и И.Стиган, Москва, "Наука" (1979).



რ. ვაშაკიძე, ზ. გუდავაძე, გ. ჭილაშვილი

შრედინგერის რელატივისტური ტანვარჯიშის გამოყენება  
მრავალწილი პარტონის პარამეტრულად

რეზიუმე

შენიშნულია დირაკის განტოლება, რომელიც მოყვანილია ვერტეხის სიმეტრიის  $\frac{1+\beta}{2}V$  სახით. სათანადო განტოლებას, რომელსაც "შრედინგერის რელატივისტური" განტოლება შეიძლება ვუწოდოთ, ძველი რიგი სპინორების ზედაპირი გააჩნია, მაგრამ მას აქვს დიდი ნაკლებობები არ შეიცავს სპინ-ორბიტალურ ურთიერთქმედებას.

შრომაში განხილულია, ძველი, რომელიც საშუალებას აძლევს შრედინგერის რელატივისტურ განტოლებაში სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ჩარევას. სათანადო განტოლება ამოხსნილია მოყვანილი ურთიერთობისა და დირაკის დეკლარაციის ურთიერთი მარტივი მოყვანილი განტოლების სახით.

Washakidze, P.Gudavadze, G.Chilashvili

APPLICATION OF "SCHRÖDINGER'S RELATIVISTIC EQUATION" TO  
THE SOLUTION OF SOME PROBLEMS

Summary

The Dirac equation for  $\frac{1+\beta}{2}V$  - type potentials is studied. The relevant equation, which may be called "Schrödinger's relativistic equation", has some interesting applications, but it does not involve spin-orbit interaction.

In this paper a method is considered which permits to include spin-orbit interaction in Schrödinger's relativistic equation. An appropriate equation is solved for the potential holes and Dirac's interaction type potentials.



СОДЕРЖАНИЕ

Н. П. Кекелидзе, В. А. Гогианшвили, З. В. Квиникадзе, З. Ф. Давитая. О законе дисперсии энергии электронов в соединениях $InP$ и $InAs$ .....	5
Р. В. Кантария, Т. И. Курчишвили. Оптические характерис- тики сильно вырожденных тонких слоев сульфида меди.	12
Т. П. Давиташвили, З. В. Хведелидзе. Об учете влияния орографии в региональных численных моделях прогно- за геопотенциала на среднем уровне атмосферы.....	20
Д. Ш. Цагарейшвили, Т. Д. Абашидзе. Взаимосвязь между от- носительными изменениями объема и энтропии при плавле- нии металлов.....	35
Ф. Р. Богданов, Г. Ш. Кеванишвили, М. Н. Чихладзе. Рассеяние плоских волн на многоэлементных решетках из коакси- альных цилиндров.....	42
З. С. Качлишвили, Ф. Р. Чумбуридзе. Гальваномагнитные яв- ления при зависящем от магнитного поля пороговом электрическом поле поперечного ускорения (ПУ).....	60
Ю. А. Григорьев, О. С. Гачечиладзе, Л. Ф. Линник, А. А. Мирц- хулава, Р. М. Майсурадзе. Исследование процессов ре- комбинации в полуизолирующем арсениде галлия.....	63
М. Ш. Кобахидзе, И. Д. Жгенти, С. С. Иаганашвили. К теории квадрупольных электронных линз.....	85
М. Ш. Кобахидзе, И. Д. Жгенти, С. С. Иаганашвили. К теории цилиндрических электронных линз.....	92
З. А. Кереселидзе, Т. Г. Матиашвили, В. С. Манаберидзе, Н. В. Мосашвили, З. С. Шарадзе. Некоторые результаты спектрального анализа геомагнитных данных Думетской	





геофизической обсерватории.....	105
З.В.Хведелидзе, П.Д.Джанелидзе. О методах оценки до- ступной потенциальной энергии в атмосфере и возмож- ности ее использования в целях прогноза.....	107
Г.Д.Манагадзе, Н.К.Качахидзе, Г.А.Кутелия, З.Д.Геладзе, Р.Г.Манагадзе. К исследованию Ниноцминда-Патардзе- ульской нефтеносной площади гравиметрическим методом	116
З.В.Квиникадзе, Н.П.Кекелидзе, В.А.Гогияшвили, З.Ф.Дави- тая. Влияние легирования и сплавленного разупорядочения на величину эффективной массы электронов в $InP_xAs_{1-x}$	128
М.Д.Звиададзе, А.Г.Квирикадзе. Квантовостатистическое описание динамической системы в неравновесной среде	137
Л.Я.Джавахишвили, Т.А.Хеладзе, О.Г.Хаханашвили. Изу- чение спектров ЭПР и состояния ионов $Si^{2+}$ в цеоли- тах типа Э.....	163
И.Ш.Вашакидзе, П.И.Гудавадзе, Р.А.Чилашвили. Примене- ние релятивистского уравнения Шредингера для реше- ния некоторых задач.....	171





მ. ხვედელიძე; მ. ჯანელიძე, ბისანვიკობი ამფინგოური ენერჯის  
 შეფასების მეტოქებისა და ბისი ამონტრეტიკი ბიზნესისათვის  
 გამოყენების შესაძლებლობის შესახებ . . . . . 114

მ. მანაძაძე, ნ. კახახიძე, გ. უსტოლთა, მ. ბენაძე, რ. მანაძაძე,  
 ნინო ბინია-პაჭავაძის ნავთობმომწოდელი ფერმკრთის გამოკვ-  
 ლვისათვის გრადიენტული მეტოქის . . . . . 121

მ. კონიკაძე, ნ. კვიციანი, ვ. გოგიაშვილი, მ. დავითიანი, გ. გი-  
 რგისა და შენაძის მონტაჟისგანგებობის გავლენა  $I \cdot n P_2 A_3 - x$   
 ნასაღების ელექტრონების ელექტრონი მასის სიდიდებზე . . . . . 134

ბ. გვირაძე, ა. კონიკაძე, არანონანტრული გარემოში დინამიკ-  
 რი სისხრის კვანძურსაფასისფიკური აღწერა . . . . . 161

რ. კახახიძე, თ. ხელაძე, კახახანაშვილი,  $C_{21}^{21}$  იონების ელ-  
 სპექტრების შესწავლა  $\Theta$  ფენის ცენტრში . . . . . 169

ნ. კაპაძე, გ. ბუბაძე, გ. ფილაშვილი, შრედიტორის რეა-  
 კტივისტური განვითარების გამოყენება ბიზნესში ამოცანის ამოხა-  
 ბნება . . . . . 190



C o n t e n t s

N.Kekelidze, V.Gogiashvili, Z.Kvinikadze, Z.Davitaia. On the electron energy dispersion law in InP and InAs compounds . . . . . 11

R.Kantaria, T.Kurchishvili. Optical characteristics of strongly degenerate thin films of cupric sulphide . . . . . 17

T.Davitashvili, Z.Khvedelidze. The influence of orography on the atmosphere mid-level in a regional numerical prediction models of the geopotential . . . . . 34

D.Tsagareishvili, T.Abashidze. Interconnection between relative variations of volume and entropy during metal smelting . . . . . 41

F.Bogdanov, G.Kevanishvili, M.Chikhladze. Scattering of plane waves over multiunit gratings of coaxial cylinders . . . . . 53

Z.Kachlishvili, F.Chumburidze. The galvanomagnetic characteristics of transversal running with critical values depending on the magnetic field . . . . . 64

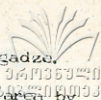
L.Grigoriev, O.Gachechiladze, L.Linnik, A.Mirtskhulava, R.Maisuradze. Investigation of the recombination processes in semi-isolated GaAs 76

M.Kobakhidze, L.Zhgenti, S.Iganashvili. On the theory of quadrupole electron lenses . . . . . 85

M.Kobakhidze, L.Zhgenti, S.Iganashvili. On the theory of cylindrical electron lenses . . . . . 93

Z.Kereselidze, T.Matiashvili, V.Matsaberidze, N.Mosashvili, Z.Gharadze. Some spectral analysis results of the geomagnetic data of the Dusheti geophysical observatory . . . . . 105

S.Khvedelidze, P.Janelidze. About the methods of estimation of the available potential energy (APE) and its possible use in weather forecasting . . . . . 115



G.Managadze, N.Kachakhidze, G.Kutelia, Z.Gelsadze, R.Managadze.  
Towards investigating the Ninotsminda-Patardzeuli oil-bearing area by  
the gravity method . . . . . 122

Z.Kvinikadze, N. Kvelidze, V.Gogiashvili, Z.Davitiaia. The effect of  
doping and alloy disorder on the value of the effective mass of  
electrons in  $\text{InP}_x\text{As}_{1-x}$  . . . . . 134

M.Zviadadze, A.Kvirikadze. Quantum statistical description of a dynamic system in a nonequilibrium medium . . . . . 162

L.Djavakhishvili, T.Kheladze, O.Khakhianashvili. Study of the EPR spectra of  $\text{Cu}^{2+}$  ions and their state in S type zeolites . . . . . 169

I.Washakidze, P.Cudavadze, G.Chilashvili. Application of "Shrodinger's relativistic equation" to the solution of some problems . . . . . 190

Редактор издательства Л.Абуашвили

Подписано в печать 30.09.87.  
 УЭ 10795      Бумага 60x84  
 Усл.печ.л. 12,25    Уч.-изд.л. 7,9  
 Заказ 1296      Тираж 300  
 Цена I р. 60 к.

---

Издательство Тбилисского университета,  
 Тбилиси, 380028, пр.И.Чавчавадзе, 14.  
 Типография Тбилисского университета,  
 Тбилиси, 380028, пр.И.Чавчавадзе, 1.