

PACS: 07.05.Tp

## COMPARATIVE ANALYSIS OF MODELS FOR COMPUTER CALCULATIONS OF CROWD BEHAVIOR

**A.N. Odeychuk<sup>1</sup>, N.I. Adamenko<sup>2</sup>, V.I. Tkachenko<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*National Science Center «Kharkiv Institute of Physics and Technology»  
Akademicheskaya str. 1, 61108 Kharkiv, Ukraine*

<sup>2</sup>*V.N. Karazin Kharkiv National University  
Svoboy Sq. 4, 61022, Kharkiv, Ukraine*

*E-mail: [anodeychuk@kipt.kharkov.ua](mailto:anodeychuk@kipt.kharkov.ua)*

Received July 2, 2015

The question of the crowd behavior description in emergency situations has been considered. The review of studies devoted to the description of real streams of people has been executed. Its main characteristics in normal and emergencies have been defined. The comparative analysis of the models which used for computer calculation of crowd behavior in emergency situations has been made. Advantages and disadvantages of the considered models have been defined. Steps on development of the computer models describing crowd behavior have been offered.

**KEYWORDS:** computer calculation, crowd, stream of people, models, emergency situation

### ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ КОМП'ЮТЕРНОГО РОЗРАХУНКУ ПОВЕДІНКИ СКУПЧЕНЬ ЛЮДЕЙ

**А.М. Одейчук<sup>1</sup>, М.І. Адаменко<sup>2</sup>, В.І. Ткаченко<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»  
61108 Україна, м. Харків, вул. Академічна, 1*

<sup>2</sup>*Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
61022, Україна, м. Харків, пл. Свободи 4*

У роботі розглядається питання опису поведінки скупчень людей у надзвичайних ситуаціях. Виконано огляд досліджень присвячених опису реальних потоків людей. Визначено його основні характеристики в нормальних і аварійних умовах. Виконано порівняльний аналіз моделей, що використовуються для комп'ютерного розрахунку поведінки скупчень людей у надзвичайних ситуаціях. Визначено переваги і недоліки розглянутих моделей. Запропоновано кроки з розвитку комп'ютерних моделей описують поведінку скупчення людей.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** комп'ютерний розрахунок, скупчення людей, потік людей, моделі, надзвичайна ситуація

### СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОГО РАСЧЕТА ПОВЕДЕНИЯ СКОПЛЕНИЙ ЛЮДЕЙ

**А.Н. Одейчук<sup>1</sup>, Н.И. Адаменко<sup>2</sup>, В.И. Ткаченко<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»  
61108, Украина, г. Харьков, ул. Академическая, 1*

<sup>2</sup>*Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина  
61022, Украина, г. Харьков, пл. Свободы 4*

В работе рассматривается вопрос описания поведения скоплений людей в чрезвычайных ситуациях. Выполнен обзор исследований посвященных описанию реальных потоков людей. Определены его основные характеристики в нормальных и аварийных условиях. Выполнен сравнительный анализ моделей используемых для компьютерного расчета поведения скоплений людей в чрезвычайных ситуациях. Определены достоинства и недостатки рассмотренных моделей. Предложены шаги по развитию компьютерных моделей описывающих поведение скопления людей.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** компьютерный расчет, скопление людей, поток людей, модели, чрезвычайная ситуация

Now situations in which the many people perish, destroyed material values, harm of environment, are in most cases associated with manifestation of uncontrolled fear at people.

The importance of studying the crowd behavior over time has not decreased. On the contrary, the reality around us concrete examples proves that modern scientists have a need again and again to refer to the works of G. Le Bon, Freud and others. It will allow understanding more clearly those mechanisms which erase identity of the person who got to crowd and force it to work and make the decisions which aren't correlated with his true desires, requirements and interests.

Systematic studying of the crowd in uncontrolled state of fear began in the second half of the XIX century. At that time interest of European scientists concentrated on properties of crowd, mechanisms of collective aggression, etc. Independently from each other two science schools were formed: German - Psychology of people (M. Lazarus, G. Shteyntal, V. Vundt) and French-Italian - psychology of masses (G. Lebon, G. Tard, V. Pareto, Sh. Siegel) [1].

In Russia the researches devoted to a question of the mass phenomena were begun at the end of XIX – the beginning of the XX century by M.G. Mikhaylovsky (subjective sociology) [2], and then continued by V.M. Behterev (collective reflexology) [3] and A.L. Chizhevskij (heliopsychology) [4].

In literature it is rather often possible to meet very general definitions of crowd in which the main focus is placed on a big people congestion that are brought together in one place [5, 6]. However for more detailed studying of this subject of such definition it isn't enough. In it a large number of details are missed, the most important of which Gustave Lebon [7] listed in the work "Psychology of the people and masses" (1895), namely: anonymity, diffusion of responsibility, impunity; distribution of emotions, opinions via the infection mechanism; suggestibility; impulsiveness, aspiration to immediately realize their desires, variability of behavior; inability to consider, lack of a reasoning and criticism; irritability, exaggerated sensitivity; moral certainty; reasonings of crowd are primitive, incoherent and are most often based only on associations; crowd is capable to perceive only images, and, the image is brighter, the perception is better; most awful things can be called by harmonious words (brotherhood, equality, democracy) which are accepted with reverence; leader is necessary for crowd.

Besides in work [1] it is noted that crowd is a people congestion who aren't united by solidarity of purpose and uniform organizational and role structure, but connected among themselves by the general center of attention and an emotional state.

In extraordinary conditions the circular reaction (in literature the term "emotional whirling" is also used [8]) has the greatest value. This is mutual infection. In other words, it is transmission of an emotional status at the psychophysiological level of contact between organisms [1]. Such emotions as fear, rage, boredom, etc. can be transferred.

At the person captured by emotional circling increased sensitivity to impulses which source is located inside crowd and at the same time reduces sensitivity to impulses from outside. Barriers against any rational argument amplify. Therefore at such moment attempt to influence crowd logical arguments can be untimely and simply dangerous.

Depending on the emotions extended in crowd there can be such destructive phenomena as aggression or fear. Experience shows that the crowd captured by fear is the most dangerous of all kinds of crowd [8].

In this state people cease to understand that it is necessary to do, refuse search of independent decisions and act only under the influence of fear. Moreover, at fear people almost always exaggerate danger from which they seek to leave [5, 6, 9].

Under the influence of a fear stability of the stream movement of people is broken, due to attempts of people to overtake each other. Thereof strongly condensed streams on some path sites, especially in places of its narrowing (for example, in the doorway) can form the "traffic jams" leading of people to death [10]. Therefore at buildings design, especially public constructions, it is always necessary to consider possibility of emergencies.

On statistical data of the USA from 1897 for 1930 at the fires at theaters about 2.5 thousand people were lost [11]. From total number of the victims of 49.8% died in communication by evacuation of people from the building, including because of discrepancy of ways of evacuation to the appointment and emergence of a fear – 46.5%. Though statistical data belong to the past, presently, despite fire extinguishing development of technology, evacuation of people at the fires continues to remain a burning issue. It is promoted by volumes increase of buildings.

Now, outdoor sports arenas are calculated on 100 and more thousands of spectators. Capacity of theaters reaches 2 thousand people and, apparently, will increase further. The closed sports constructions and concert halls are calculated on 10-50 thousand people [12].

Because crowd captured by fear is extreme danger it is necessary to pay much attention to the organization of the people movement, not only in buildings, but also on the outdoor areas where can pass evacuation path. For this purpose it is necessary to carry out simulation of all possible (or the most probable) scenarios of events.

Now, the crowd simulation is an evolving area of science. The developed models aren't universal. They have their own internal constraints, simulation accuracy and application area. It can lead to difficulties at decision-making in a model choice of people behavior in this or that situation.

Thus, carrying out the comparative analysis of crowd behavior models in emergency situations is rather actual task.

### **GOAL AND RESEARCH TASKS**

The goal of this paper is carrying out comparative analysis of models for computer calculations of crowd behavior. It will allow revealing advantages and disadvantages of existing models and making recommendations for developing new models.

For achieve this goal it is necessary to solve the following tasks:

- perform an analysis of studies devoted to research of the real stream of people;
- execute a review of the main models describing behavior of the crowd and define their advantages and disadvantages;
- carry out the comparative analysis of the main models of crowd behavior;
- formulate recommendations for development of new crowd behavior models.

### **THE REVIEW OF RESEARCHES OF THE REAL STREAM OF PEOPLE**

For the first time researches of the streams movement of people were put on a serious scientific basis by the prof. S.V. Beljaev [10]. In 1937 at Architecture institute of the All-Russian Arts Academy (ARAA) about 200 observations

over the streams movement of people in public places were made. Results of these researches formed the basis of standards for evacuation of people from buildings. The main scientific achievement of these researches should be considered establishment of dependence between the speed of a stream and its density.

At the same time researches ARAA contain also serious disadvantages. It is necessary to carry rather small number of natural observations which isn't allowing giving rather full process assessment; unsuccessfully chosen places for observations – sidewalks of streets, tram where movement of people strongly differs from the movement in buildings.

The main disadvantage of the ARAA work should be considered as acceptance of constant speeds values of the streams movement of people that significantly differs from observed parameters actually.

Further researches in this field in the USSR were conducted at the Higher school of the USSR Ministry of Internal Affairs by the prof. M.J. Roytman [9]. Unfortunately, they have not brought anything new in settlement data as were based on S.V. Beljaev 's approach and were therefore not free from the disadvantages stated above.

In 1946 – 1948 at All-Union Scientific Research Institute of Fire Protection Defense by A.I. Milinskij researches were conducted [13]. It differed from the previous researches in the wide scale and more perfect technique. More than 6000 natural observations in various public buildings were made. The physical people sizes, density and speed of the movement streams of people and doorways capacity were studied and considered.

The horizontal projection form of person accepted an ellipse which diameters correspond to width and thickness of the person (Fig. 1). Taking into account a variety of physical data and clothes the accepted assumption insignificantly distorts the actual sizes and horizontal projection form.



Fig. 1. Horizontal projection of the person in the ellipse form (a – width; c – thickness; S – area of horizontal projections)

Natural observation of streams of people show that in many buildings, for example, in shops and at stations, most of people forming stream (to 80%), have at itself a hand baggage (suitcases, backpacks, bags, briefcases, packages, etc.). Often in a stream there are people with children on hands or leading them by the hand. The most probable combinations of horizontal projections of people and baggage are given in work [9, 14].

In [13] was proposed to express stream density of people by number of people per unit area occupied by stream, people/m<sup>2</sup>:

$$D = \frac{N}{wl}, \quad (1)$$

where N – number of people in stream; w – stream width; l – stream length.

Also in [13] was proposed to express stream density of people by areas sum of horizontal projections of people per unit area occupied by stream, m<sup>2</sup>/m<sup>2</sup>:

$$D = \frac{\sum S}{wl}, \quad (2)$$

where S – area of person horizontal projection in the stream.

Besides in literature, for example in [6], determination of stream density of people through the area per one person also meets, m<sup>2</sup>/person:

$$D = \frac{wl}{N}. \quad (3)$$

Expressions for stream density of people (1) and (3) are applicable only at uniform stream, for example, when it consists only of adults in summer clothes or of adults in winter clothes. Expression (2) is applicable at any stream structure.

The maximum stream density established in natural conditions is equal 0.92 m<sup>2</sup>/m<sup>2</sup> [13]. This value corresponds to the assumption that the ellipse expressing a horizontal projection of the person isn't exposed to deformations during stream compression. Though in reality as the human body elastic, at considerable compression changes a form and decreases area of its horizontal projection. Therefore, the physical limit of density may exceed 0.92 m<sup>2</sup>/m<sup>2</sup>.

Researches of streams of people with high density in natural conditions showed that in many cases, mainly in apertures wide up to 1.2 m, density there were more than  $0.92 \text{ m}^2/\text{m}^2$ . However the maximum value didn't exceed  $1.0 \text{ m}^2/\text{m}^2$ .

In paper [15] when carrying out natural experiments it is established that the physical limit of stream density of people which is formed during a crush is equal  $1.15 \text{ m}^2/\text{m}^2$ .

Also A.I. Milinskij [13] determined the most probable stream density of people in normal conditions on the movement paths in various buildings.

In the industrial enterprises and educational institutions stream density of people from 0 to  $0.25 \text{ m}^2/\text{m}^2$ , and in spectacular buildings – from 0 to  $0.5 \text{ m}^2/\text{m}^2$  are most probable. On ladders, as a rule, low stream density of people from 0 to  $(0.25 - 0.35) \text{ m}^2/\text{m}^2$ , and stream density of people close to maximum are observed very rare.

Average speeds of the people movement for various rooms on horizontal paths and ladders in public buildings of different function are established: at theaters and educational institutions movement speed are  $(15 - 20) \text{ m}/\text{min}$ , in industrial buildings –  $(25 - 30) \text{ m}/\text{min}$  more often, in buildings of transport appointment –  $(20 - 50) \text{ m}/\text{min}$ , on ladders –  $(20 - 25) \text{ m}/\text{min}$  are most probable.

Further works in this field carried out V.M. Predtechenskij [9], Yu.V. Alekseev, R.M. Duvidzon, V.A. Kalindev, V.V. Holshchevnikov, R.G. Grigoryants and V.S. Gvozdyakov [11]. Researches were conducted with use photo and video equipment that allowed estimating not only quantitative, but also qualitative characteristics of process. Their researches confirmed reliability of the results received by A.I. Milinskij [13].

In the 1950th years foreign authors, such as V. Sholts, K. Ranier and H. Schubert, were also conducted researches on establishment of movement average stream speed of people, its density, etc. [9]. However experiments were made with participation of artificially created streams of people which consisted of people about one age (students). Therefore the speed values of the stream movement of people received under such artificial conditions are significantly overestimated. In this regard these researches can represent only private interest.

Except researches directed at the quantitative indices identification of stream of people in literature also qualitative characteristics of crowd behavior are described.

Observations show that stream of people usually an elongated cigar-shaped form (Fig. 2). Thus the head and closing parts consist of a small number of people moving according to high or small speed, than majority of people in a stream.

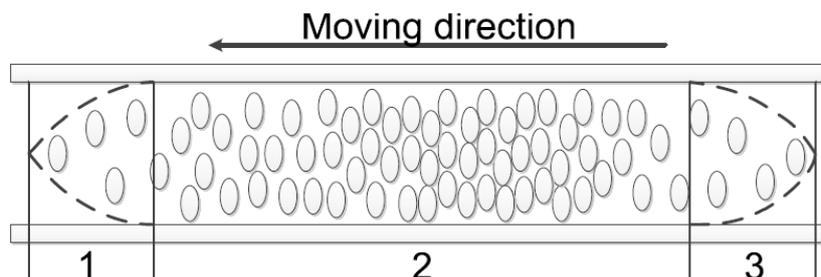


Fig. 2. People stream scheme: 1 – head part; 2 – main part; 3 – closing part

Usually head part of stream leaves with greater speed forward and there is a so-called stream rearrangement by spreading its head part. Therefore it is necessary to consider gradual change of stream density. Than stream density of people is higher, then obstruction of evacuation paths is more probable. Therefore, the probability of accidents increases.

Experience shows movement speed of people at the fire toward external exits isn't identical on length of an evacuation path. It reaches the maximum in the area close to the seat of fire, and, in process of stream of people removal from the center, rates of the movement gradually fade, coming nearer to the normal movement in a place where is already not present, not only dangers, but also noticeable signs of the fire happening in the building. Other picture of the evacuation movement should be expected in buildings at the time of an earthquake: in this case movement speed remains high up to an exit of people from buildings and some removal from them.

Besides, people seek to go the shortest path to the target. They always choose such path even despite need of overcoming of some obstacles and the difficulties associated with it.

In recent years new effects which can be watched in crowd, [14] were found. First of all, it is necessary to mark effect of "herding behavior" which is watched in case of evacuation. This effect is shown that when people aren't sure that it is necessary to do, they aim to imitate behavior of others.

Other interesting effect is formation of movement waves (Stop-and-Go Waves) [16]. It is watched when the crowd with high density is formed. At some moment people throughout some time start moving step by step, then faster, then slower. If the crowd density increases at the further movement, there can be an effect of turbulence of crowd. In more detail about effects which arise in crowd with high density, it is considered in [14, 16].

For people evacuation process modeling it is necessary to use simulation and stochastic model of the stream movement of people which most accurately reflects dynamics of process in various service conditions of buildings [12].

## THE ANALYSIS OF THE MAIN MODELS DESCRIBING CROWD BEHAVIOR

### Graphic-analytical method and ADPLV model

In the absence of a computer the most accurate and visual teaching mathematical modeling method of crowd behavior is the graphic-analytical method. It was for the first time proposed by A.I. Milinskij [13], and further was improved by V.M. Predtechenskij [20].

The essence of this method can be represented as follows.

Consider the stream movement of people on a horizontal path. In Fig. 3a the floor plan is submitted. It has length  $L$  and width  $W$ . It is a horizontal portion of the path that ends with the doorway. Moving direction is shown by an arrow. The settlement scheme of the same path is given in the form of straight lines set on a coordinate grid (Fig. 3b): on ordinate axis – path length  $L$ , and on abscissa axis – time  $t$ .

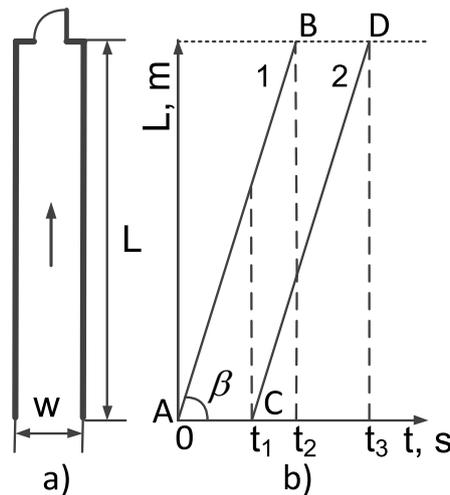


Fig. 3. The analyzed part of the path:  
a) floor plan; b) graphic-analytical representation of the stream movement of people

Let in an initial time ( $t=0$ ) on a path of the movement there is a head part of stream of people. Through time  $t_1$  all people stream enters at path, including also its closing part. Stream of people consists of  $N$  people and has density  $D$ .

Order of movement diagram creation is following. Knowing stream density of people  $D$  the movement speed  $v$ , corresponding to this density and traffic conditions (emergency, normal, comfortable) is determined by special tables based on experimental data.

Time necessary for passing of this path is determined by the stream speed of people  $v$  and path length:  $t_2 = L/v$ . Point B with coordinates  $(t_2, L)$  connects to the origin of coordinates by straight line AB. The straight line AB shows the movement character of the head part stream of people at the path.

Through time  $t_1$  all stream of people enters at the path. Considering that the stream movement speed of people remains invariable, it is possible without preliminary calculations from the point C corresponding to the beginning of path and time  $t_1$  draw straight line CD, parallel AB, to ordinate, the corresponding length  $L$ . The straight line CD expresses the movement of the stream closing part.

In more detail procedure of the stream movement analysis of people on other standard path under various conditions is described in [20].

The advantage of this method is its relative simplicity, visibility and possibility of its application without computer.

At the same time the method isn't devoid of disadvantages, which include: only average speed and average density of stream can be estimated; possibility of its application only for standard path; impossibility to apply a method to research of information distribution and moods in crowd; inapplicability for simulation of people behavior when they have to execute a certain sequence of actions.

Stream simulation of people by a graphic-analytical method, despite the simplicity, is very labor-consuming. Therefore, with the advent of computers were developed approaches to their use for the calculation of stream movement of people in buildings [21, 22].

The ADPLV model was first time presented in V.V. Holshhevnikov's work [21]. It assumes setting of evacuation path in advance and splitting them on "elementary" parts. Then simulation of stream movement of people, based on procedure similar to a graphic-analytical method, is executed. The detailed presentation of the mathematical description of the ADPLV model is presented in work [21].

Simulation model adequacy to real process of the stream movement of people was repeatedly checked by natural observations. This model has high accuracy [21].

The disadvantages of this approach include the fact that it is impossible to define nature of the individual person

movement in the crowd. Only probabilistic quantitative characteristics of groups, such as density, number of people, speed are defined. Also this approach isn't suitable for heterogeneous crowds in which different groups of people have various targets and characteristics. Besides, simulation is performed only for a predetermined path.

Consider models at which there is an essence of the individual person.

### Models based on cellular automata

Cellular automata were first proposed in Von Neumann's work [23] and had fundamental importance for the whole of science, and also diverse application. For behavior simulate of crowd the most widely used two-dimensional cellular automata to the orthogonal grid which sets space for individuals movement. The size of each cell of grid is equal to the average size of the individual and is defined at entry conditions of simulation and further doesn't change. Besides, each cell can be in one of the following states [24]: it is occupied with stationary object (building, monument, etc.); it is occupied with mobile object (person, car, etc.); movement is forbidden (prohibited zone, obstacle); movement isn't desirable (determined by the rules movement restrictions); it is free. Considered state of cells change synchronously through discrete time intervals according to beforehand set rules, depending on the state of the neighboring cells.

Each individual in the models constructed on the basis of the cellular automata can be characterized by rather extensive list of characteristics, except the linear sizes which at all are identical.

Movement simulation of the person is carried out proceeding from movement probabilities  $P_1 - P_8$  in this or that cell which is calculated according to the rules described in the model. The individual moves to that cell the movement probability in which is maximal. In case on the path there are absolute obstacles or considerable congestions of people, the individual is able to look through area round it on some distance and to choose that movement direction which has the smallest number of people and obstacles [14, 25].

The advantages of this approach is the ease of implementation of cellular automata and simple setting of rules, which is quite relevant for describing the crowd behavior, numbering hundreds or even tens of thousands of individuals.

The disadvantages of models based on cellular automata are a discrete behavior of individuals in the crowd, both in time and in space. The horizontal person projection over the width and thickness has averaged the same value that isn't true. Besides, it is known that the existing models on cellular automata are weak for simulation of the intersecting stream of people [22]. Considering that the cells size need to be set before simulating and that why results of such models strongly depend on user qualification.

Now cellular automata are successfully used when behavior simulation of crowd: in the subway [26], at evacuation from the room [27], building [28], taking into account various obstacles [29].

### Models based on the equations of psychophysical interaction

Bases of crowd behavior simulation using the equations of psychophysical interaction were put by D. Helbing in [30]. Then it approved on rather large number of examples [14, 31 – 36]. Under these models each  $i$ -th person in the crowd is abstractly represented in the form of the vertical continuous uniform cylinder by radius  $R_i$ , and rules of interaction between people are set by potential forces of a psychosocial and physical origin.

Consider a set from  $N$  person. Each has weight  $m_i$ , where  $i = \overline{1, N}$ . Let the behavior of each individual person be characterized radius vector  $\vec{r}_i$ , actual movement speed  $\vec{V}_i$  and speed with which the person would like to move  $\vec{V}_i^{\text{want}}$ . Discrepancy of desirable speed and actual speed forms the main force initiating of the movement [30]:

$$\vec{F}_i^t = m_i (\vec{V}_i^{\text{want}} - \vec{V}_i) / \tau, \quad (4)$$

where  $\tau$  – the parameter characterizing time of person involvement in the crowd, s.

Force initiating the movement (4) is arranged in such way that in case of excess of desirable speed over actual speed then person is accelerated. If the person doesn't wish to move anywhere, his movement fades over time.

Besides force initiating the movement (4) the person is affected by other forces associated with person interaction with other people and obstacles. Consider force acting on the person  $i$  from the person  $j$  [30]:

$$\vec{F}_i^p = (A \exp \frac{D_{ij}}{B} + kH(D_{ij})D_{ij})\vec{n}_{ij} + \eta H(D_{ij})D_{ij} \langle (\vec{V}_j - \vec{V}_i) \vec{\tau}_{ij} \rangle \tau_{ij}, \quad (5)$$

where  $D_{ij} = R_i + R_j - |\vec{r}_i - \vec{r}_j| = R_i + R_j - \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}$ ;  $\vec{n}_{ij}$  and  $\vec{\tau}_{ij}$  – normal and tangential unit vectors;  $H$  – Hevisayd's function defining the interaction emergence moment;  $A$ ,  $B$ ,  $k$ ,  $\eta$  – constants which set in the empirical way (in [32] suggested  $A=430$  H,  $B=0.085$  m,  $k=50000$  H/m,  $\eta = 55000$  kg/(m $\times$ s)).

First term in (5) represents force, as well as in a formula (4), the psychosocial nature. It describes person unwillingness to come into too close physical contact with other people. The value of this force is greater, than people among themselves are closer and when the distance between persons becomes less than a sum of their radiuses, force of pushing away becomes especially considerable. At long distances the contribution of this term is rather weak. The

second and third terms in (5) have traditional view for molecular dynamics. One of them describes elastic pushing away at any collision between persons, and the second – friction force at the tangent movement. Both interactions arise only at positive value therefore these terms are multiplied by Hevisayd's function  $H(D_{ij})$ .

Similarly (5) force of person interaction with an obstacle, for example with a wall is considered:

$$\vec{F}_{iz}^w = (A \exp \frac{D_{iz}^w}{B} + kH(D_{iz}^w)D_{iz}^w) \vec{n}_{iz} + \eta H(D_{iz}^w)D_{iz}^w (\vec{V}_i \vec{\tau}_{iz}) \vec{\tau}_{iz}, \quad (6)$$

where  $D_{iz}^w = R_i - |\vec{r}_i - \vec{r}_z|$ ,  $\vec{r}_z$  – radius vector from  $i$ -th person to the nearest point of a wall  $z$ . The values of other variables and parameters as in (5).

Taking into account formulas (4 – 6) equations of the crowd dynamics can be written down in a look, usual for mechanics:

$$m_i \frac{d\vec{V}_i}{dt} = \vec{F}_i^t + \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij}^p + \sum_z \vec{F}_{iz}^w, \quad (7)$$

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{V}_i.$$

Finally behavior simulation of the crowd is carried out by means of the decision of 4N differential equations system.

Advantages of these models are opportunity to describe the people movement continuously in time, unlike cellular automata. Forces which affect people and making some psychophysical sense are considered.

However, in the proposed equations describing the crowd dynamics present values aren't measured directly, so researchers have to be assigned to the values of these parameters. Existence of such coefficients, generally speaking, reduces results reliability, so and reduces the predictive force of models.

Also, psychological repulsion force equation, modeling the human reluctance to enter into close contact with other people, is constructed in such a way that makes it impossible to simulate real crush in emergency situations when there is a change or even a reduction in the horizontal projection profile of person [9]. Besides, this profile is described in these models as a circle, but not an ellipse which most precisely corresponds to empirical measurements [9].

In [30, 32], it was noted that by using these models are reproduced typical for crowd phenomena such as avalanche formation of a crush after the people speed exceeds 1.5 m/s (Fig. 4). The desirable speed is higher, the more slowly the crowd leaves the room. In crowd as a result of a crush there are affected crowds obstructing the traffic.

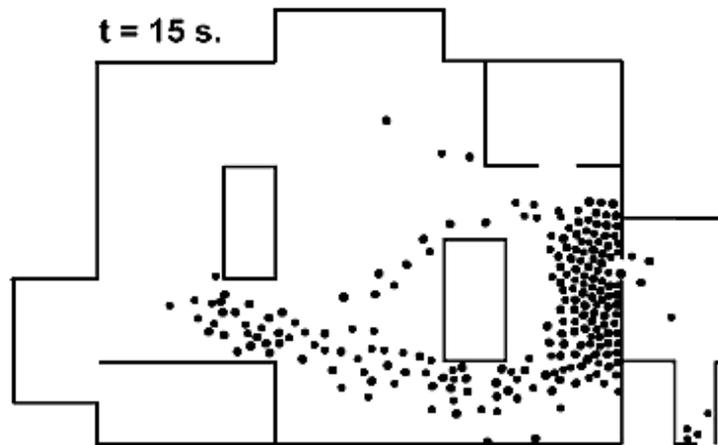


Fig. 4. Simulation of crush formation arising in the crowd [32]

#### Models based on the hybrid multiagent architecture

The main attention of the models based on cellular automata and the equations of psychophysical interaction concentrates on interaction simulation of people among themselves and obstacles. These approaches initially weren't aimed at the description of information transfer mechanisms between people, ensuring the movement to any target or following to some action plan. Any addition in them of these possibilities leads to subjectivism in the model which doesn't have physical.

Multiagent approach, in which each person is considered as the intellectual agent, allowed raising crowd simulation on new level [14, 36 – 38]. Thus, decentralized system isn't functioning within global rules and laws, but on the contrary, these global rules and laws are result of agent's individual activity.

Agent is essence which simulates of person behavior in processes of data collection and processing and independently moves in information space in the direction of the target [37 – 40].

Now there are three main creation concepts of agent architecture [22, 37, 39]: deliberative (reasoning, logical deduction); reactive (rules of action, reaction to events); hybrid (combining of the two previous).

Bases of strict formalization of knowledge and actions of the deliberative agent are put by K. Konolige in work [41]. He proposed hierarchical meta-language for the description and a logical conclusion on knowledge and actions of agents.

Each deliberative agent has library of plans (scenarios) defining options of possible actions which can be undertaken by the agent for achievement of its intentions. Plans, thus, realize procedural agent knowledge. Each plan contains some components. The trigger or conditions of a call define circumstances under which the plan has to be considered as possible for application. The plan has the context or preconditions defining circumstances under which implementation of the plan can begin. The plan also has a body which may contain the targets and primitive actions.

The advantage of deliberative architecture is application possibility of the strict formal methods and well fulfilled technologies of traditional artificial intelligence allowing it is rather easy to represent knowledge in a symbolical form. To do this we can be used languages of manipulation with formal representations, such as Prolog, JESS, etc. [22, 37, 42].

Solutions search of the problems arising when using classical methods of artificial intelligence in the agent-based systems led to appearance of a new agent's class based on reactive architecture. Considered to be the founder of this direction is R. Brooks who so formulated key ideas of a behaviorist view of intelligence [39]: intellectual behavior can be created without obvious symbolical representation of knowledge; intellectual behavior can be created without obvious abstract logical conclusion; intelligence is suddenly arising property of some difficult systems.

In the real world the intelligence isn't expert system or inference engine, and the intellectual behavior arises as interaction result of the agent with environment. Instead of world simulation and planning the reactive agents should have a collection of simple behavioral schemes which react to changes in the environment in the "stimulus – response" form.

Reactive agents, at least in several experiments, proved ability to solve limited number of simple problems in the real world [22, 33]. However they face problems when performing tasks demanding knowledge of the world which are obtained by logical deduction or from memory. Moreover, the reactive agents are often made "rigidly" and have no abilities to training.

Recently, some researchers admit [39, 40] that the agent should have a high-level and low-level output reactive abilities. It led to creation of hybrid agents.

When simulate of the crowd then the level describing reactive agent behavior is carried out, based on cellular automata [22], or on the equations of psychophysical interaction [33, 34, 43, 44]. Deliberative level is usually described by a predicate logic [34, 43, 45, 46].

Advantages of hybrid architecture are: agent's possibility to simulate the difficult behavior based on long-term planning of the actions and solutions of short-term tasks of movement in surrounding area; ability of communication simulation between people in crowd; formations of groups; possibility of training. Unfortunately, the agent's hybrid architecture isn't deprived of the disadvantages peculiar to deliberative and reactive architecture; however the basic is management complexity of interaction between different levels.

### Models based on the potential scalar field

Currently the fastest models of large-scale crowd simulation (thousands people) are models based on potential scalar fields [47]. It allows describing difficult crowd behavior in the closed room, on city streets, on the open areas with a difficult terrain. They are plausibly to movement simulation of people in a single stream, and in crossing streams. You can find more information about research of the crossed streams in [16].

Basic provisions of this approach were put in works [48, 49], and its rather complete description is presented in A. Treuille's work [47]. Subsequently approach gained further development in R.V. Grebennikov's works [50, 51].

In models based on the potential scalar fields each agent submits to a number of assumptions [47]:

Hypothesis 1: Each person tries to achieve the geographical target  $g$ .

The target field is set by the potential decreasing in proportion to a distance between the current position of the agent in a point  $x$  and the next target with coordinates  $x_g$  [48]:  $g(x) = 1/|x - x_g|$ .

Hypothesis 2: The person moves with the greatest possible speed.

Environment influences the movement speed of the person by its reduction on rises and increases on descents. Also maximum movement speed of the person depends on crowd density surrounding agent. Generally, such dependence is expressed as follows:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, q)\vec{n}_q,$$

where  $f$  – potential field of the maximum speed for the agent in a point  $x$ , moving in the target  $q$ ,

$\bar{n}_q = [\cos(q), \sin(q)]^T$  – unit vector in target  $q$ .

The field of the maximum agent speed is described by the following expressions [48]:

$$\begin{aligned} f(x, q) &= f_T(x, q) + \left( \frac{p(x + m_q) - p_{\min}}{p_{\max} - p_{\min}} \right) (f_U(x, q) - f_T(x, q)), \\ f_T(x, q) &= f_{\max} + \left( \frac{\nabla h(x) n_q - s_{\min}}{s_{\max} - s_{\min}} \right) (f_{\min} - f_{\max}), \\ f_U(x, q) &= u(x + m_q) n_q, \end{aligned}$$

where  $p$  – crowd density;  $p_{\min}$  and  $p_{\max}$  – threshold value of crowd density;  $f_T$  – topographical speed;  $f_{\min}$  and  $f_{\max}$  – minimal and maximal agent speed;  $s_{\min}$  and  $s_{\max}$  – minimal and maximal terrain slope;  $\nabla h(x) n_q$  – terrain slope in the point  $q$ ;  $f_U$  – stream speed;  $u$  – average stream speed taken in the current position of the agent with shift  $r$  aside  $q$ .

Hypothesis 3: In the process of moving a person tries to avoid collisions with other people, walls and other obstacles.

For a description of this statement in [47] it was proposed to introduce an additional field of discomfort  $g(x)$ . According to it if all other things being equal then the crowd participant will prefer to be in a point  $x$ , than in a point  $x'$ , if  $g(x') > g(x)$ . This idea can be realized by setting the linear combination of three following parameters: path length; time spent for the movement; discomfort degree.

Hypothesis 4. Let  $\Pi$  – set of all possible path from a point  $x$  to the target  $g$ . The agent chooses such path  $P \in \Pi$  which corresponds to the minimum expression:

$$\alpha \int_P ds + \beta \int_P dt + \gamma \int_P g dt \quad (8)$$

where  $\int ds$  – integral on path length;  $\int dt$  – integral on time;  $\alpha, \beta, \gamma$  – weight coefficients. Considering that  $\int ds = \int v dt$ , where  $v$  – agent speed, write formula (8) in the form:

$$\begin{aligned} &\int_P C ds, \\ C &= \frac{\alpha v + \beta + \gamma g}{v}, \\ &\alpha \int_P ds + \beta \int_P \frac{1}{v} ds + \gamma \int_P \frac{g}{v} dt. \end{aligned} \quad (9)$$

Proposed criterion (9) is used to calculate the optimal path. Let there is a function  $\varphi \in \mathbb{R}$ , on all the range of definition equal to optimality criterion value. It is obvious that for simultaneous achievement of the target and minimization of optimality criterion, the agent has to move aside, opposite to value of function gradient  $\varphi$ . This potential function in a target point of path is zero, and on all other interval satisfies to Eykonal's equation [52]:

$$\|\nabla \varphi(x)\| = C,$$

where  $\nabla \varphi(x)$  – function gradient  $\varphi(x)$ .

Thus, all people move to the opposite side from a gradient, which normalized on speed in this point:

$$\frac{dx}{dt} = -f(x, q) \frac{\nabla \varphi(x)}{\|\nabla \varphi(x)\|},$$

In Fig. 5 visual display of the fields used when simulate crowd behavior is presented.

In paper [50] it was proposed to introduce an additional hypothesis according to which each agent has a limited visibility distance out of which all fields are equal to zero. Besides, for search of an optimum path a number of methods were analyzed and was chosen particle swarm optimization method [53]. It provides the acceptable results with the minimum computing expenses (there is no need directly to calculate gradient value  $\varphi(x)$ ).

Thus, the proposed hypothesis leads to the basic movement equations of agents in a crowd stream for a two-dimensional case [54]:

$$-\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( pg(p)f^2(p) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( pg(p)f^2(p) \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) = 0$$

$$g(p)f(p) = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right)^2}},$$

where  $\varphi$  – time before the end of the movement;  $p$  – crowd density;  $f(p)$  – agents speed as function from density;  $g(p)$  – discomfort as function from density;  $(x, y, t)$  – agent's coordinates and current time.

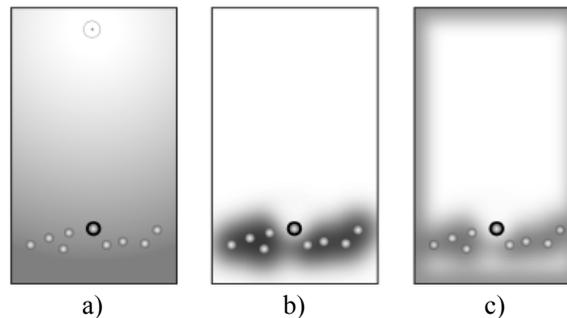


Fig. 5. Visual display of the field used when simulate crowd behavior [51]: a) global target; b) density; c) discomfort

The advantages of these models include the ability to describe the crowd as a dynamic system, and the ability to perform a large crowd simulation in real time (Fig. 6).

The disadvantage of these models is its inapplicability to the crowd simulation with a high density, when there is considerable friction between people [50].

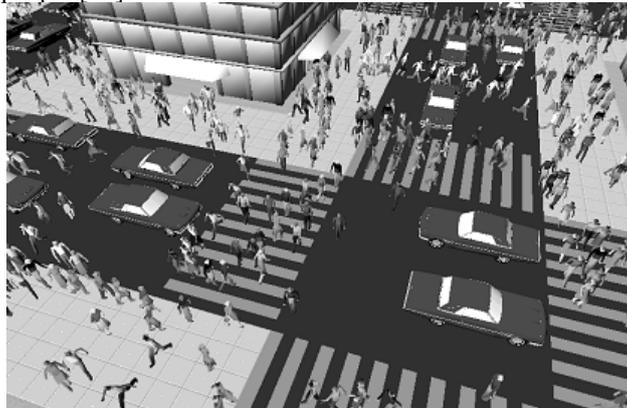


Fig. 6. Behavior simulation of pedestrians and motor transport on city streets [47]

## COMPARATIVE ANALYSIS OF MODELS FOR COMPUTER CALCULATIONS OF CROWD BEHAVIOR

The review of the main crowd models showed that now there are many models, the main ones are:

- ADLPV model based on a graphic-analytical method and assuming splitting all evacuation path into standard path and then stream simulation of people, using tabular movement speed values of people in these or those conditions [21];

- models based on cellular automata [24 – 28]. In similar models the environment on which agents moves, is presented as a set of cells forming a periodic grid with given rules of transition. These rules define the cell state in the next time through state of the neighboring cells located on it at a certain distance at the current time;

- models based on the equations of psychophysical interaction [30 – 35]. In these models all social forces acting on the agent in crowd are expressed as physical forces, and the agent movement is described on the basis of classical mechanics laws;

- models based on multi-agent approach [37 – 46], in which the simulation of agents' behavior is described by a rules set of movement and interaction of individual agents;

- models based on potential scalar fields [47, 50 – 54]. In such models for each agent it is set: a set of the potential fields describing target location to which aspire the agents; movement speed; discomfort which is felt by the agent at movement.

The review of the papers devoted to real crowd research allowed defined their main characteristics, concerning which it is necessary to carry out the comparative analysis of crowd models: profile of person horizontal projection;

simulation possibility of the crowd with a high density (more than  $0.92 \text{ m}^2/\text{m}^2$ ); simulation possibility of heterogeneous crowd; crowd behavior based on stream simulation of people in general or on individual behavior of each person; evacuation path is known before simulation; implementation possibility of the actions scenario; floor plane in which simulation is carried out.

Also it is necessary to consider of additional factors, such as: modeling accuracy; user qualification; computational complexity.

The results of the comparison of crowd models on the above parameters are presented in Table.

Table.

Comparative analysis of models for computer calculations of crowd behavior

Parameter	Model				
	1	2	3	4	5
Profile of person horizontal projection	–	Square	Circle	Circle	Circle
Crowd simulation with high density	Yes	No	No	Yes	No
Heterogeneous crowd	No	No	Yes	Yes	Yes
Stream/person	Stream	Person	Person	Person	Person
Evacuation path is known in advance	Yes	No	Yes	No	No
Running of the action scenario	No	No	No	Yes	No
Floor plane	Typically	Discrete	Any	Any	Any
Accuracy	High	Low	Middle	High	High
User qualification	Low	High	High	High	Low
Computational complexity	Low	Low	High	High	Low

1 – Model ADLPV, based on the graphic-analytical method; 2 – Models based on cellular automata; 3 – Models based on the equations of psychophysical interaction; 4 – Models based on the hybrid multiagent architecture; 5 – Models based on the potential scalar fields

The comparative analysis revealed general disadvantage of the modern models – the profile of a horizontal projection isn't an ellipse as it is noted in the researches devoted to real crowds. It in turn can lead to distortion of simulation results. Especially when trying to simulation of high-density crowd in which the crush is watched. From the models considered, based on the description of the crowd behavior through the individual person behavior, only multi-agent models allows to simulate plausible crush by setting specific rules of conduct.

Thus, it is necessary to propose the creation of new models describing the crowd's behavior, the following recommendations.

For the description difficult social and psychological behavior of people to use hybrid architecture of agents that will allow not only simulate person response to environment, but also different actions scenarios, communication between people, training, etc.

In model to consider opportunity to simulate a heterogeneous crowd in which crowd participants differ not only the speed, physiological restrictions, targets, but also overall dimensions.

Base model on the horizontal projection profile of person in the ellipse form, which would correspond to the real observations. Also to provide possibility setting of other profile configurations.

For plausibility of movement simulation of people in indoor and outdoor areas to use elements of the approach based on potential scalar fields.

The developed model should be verified by the field observations results. For this purpose the ADLPV model which has high accuracy in case of the stream description of crowd can be also used.

## CONCLUSION

The conducted researches suggest the following conclusions:

1. Analysis of studies devoted to research of the real stream of people has been executed. It allowed defining the main qualitative and quantitative crowd characteristics (horizontal projection profile of person, maximum density of crowd, person speed in standard locations, etc.) in normal and emergencies.

2. The review of the main models describing the crowd's behavior has been executed: model ADLPV, based on the graphic-analytical method; models based on cellular automata; models based on the equations of psychophysical interaction; models based on the hybrid multiagent architecture; models based on the potential scalar fields.

Advantages and disadvantages of the models have been defined.

3. The comparative analysis of the main models of crowd behavior has been executed.

4. Recommendations which need to be considered in case of new models creation have been formulated:

– use multi-agent hybrid architecture of agents that will allow describing difficult social and psychological agent's behavior in crowd besides reaction to environment;

– base model on horizontal projection profile of person in the ellipse form that will correspond to real observations. Also to provide possibility to setting of other profile configurations;

– use for the description of agent interaction with environment elements of the approach based on potential scalar

fields. It will allow is probable acting agent as indoors and on outdoor areas, and also to set influence areas of dangerous factors;

– verify developed model using results of field observations. For this purpose the ADLPV model based on a graphic-analytical method which has high accuracy in case of the stream description of crowd can be also used.

Work is performed within the Grant of the President of Ukraine for young scientists for 2014 – 2015.

#### REFERENCES

1. Nazaretjan A.P. Agressivnaja tolpa, massovaja panika, sluhi. – SPb.: «Piter», 2004. – 95 s. (in Russian)
2. Popov A.S. Subektivnaja sociologija N.K. Mihajlovskogo v strukture ego istoriosofskih postroenij: dis. kand. fil. nauk. – M., 2003. – 172 s. (in Russian)
3. Behterev V.M. Kollektivnaja refleksiologija. – Petrograd: Kolos, 1921. – 436 s. (in Russian)
4. Chizhevskij A. L. Zemnoe jehno solnechnyh bur'. – M.: Mysl', 1973. – 349 s. (in Russian)
5. Tolkovyj slovar' ruskogo jazyka. – M.: OOO «Izdatel'stvo Avtrel'»: «Izdatel'stvo AST», 2003. – 1582 s. (in Russian)
6. Bol'shoj tolkovyj slovar' ruskogo jazyka. – SPb.: «Norint», 2000. – 1536 s. (in Russian)
7. Lebon G. Psihologija narodov i mass. – M.: Akademicheskij proekt, 2011. – 238 s. (in Russian)
8. Ol'shanskij D.V. Psihologija mass. – SPb.: Piter, 2002. – 368 s. (in Russian)
9. Predtecheskij V.M. Proektirovanie zdanij s uchedom organizacii dvizhenija ljudskih potokov. – M.: Strojizdat, 1979. – 375 s. (in Russian)
10. Beljaev S.V. Jevakuacija zdanij massovogo naznachenija. – M.: Izd. Vsesojuznoj akademii arhitektury, 1938. – 72 s. (in Russian)
11. National fire protection association (NFPA). – Access mode: <http://www.nfpa.org>.
12. Holshhevnikov V.V., Parfenenko A.P. O modelirovanii jevakuacii ljudej i dinamiki opasnyh faktorov pozhara v celjah normirovanija jevakuacionnyh putej // Tehnologii tehnosfernoj bezopasnosti. Nauchnyj Internet-zhurnal. – 2014. – Vyp. 1(53). – Access mode: <http://agps-2006.narod.ru/ttb/2014-1/30-01-14.ttb.pdf>.
13. Milinskij A.I. Issledovanie processov jevakuacii zdanij massovogo naznachenija: dis. kand. tehn. nauk. – M., 1951. – 177 s. (in Russian)
14. Peacock R.D., Kuligowski E.D., Averill J.D. Pedestrian and Evacuation Dynamics. – New York: Springer. – 2011. – 907 p.
15. Kopylov V.A. Issledovanie parametrov dvizhenija ljudej pri vynuuzhdennoj jevakuacii: dis. kand. tehn. nauk. – M., 1974. – 183 s. (in Russian)
16. Helbing D., Johansson A. Pedestrian, Crowd and Evacuation Dynamics // Encyclopedia of Complexity and Systems Science. – New York: Springer. – 2014. – P. 1 – 28.
17. Odeychuk A.N., Adamenko N.I., Tkachenko V.I. Modeli panikujushhej tolpy: sovremennyj vzgljad na problem. – Har'kov: HGAFK, 2015. – 48 s. (in Russian)
18. Odeychuk A.N. et al. Sravnitel'nyj analiz modelej social'nyh situacij «Panikujushhaja tolpa» // Zbirnik naukovih prac' Harkivs'kogo universitetu Povitrjanih Sil. – H.: Harkivs'kij universitet Povitrjanih Sil imeni Ivana Kozheduba, 2015. – Vip. 2 (43). – S. 133 – 138. (in Russian)
19. Odeychuk A.N. Sovremennye modeli panikujushhej tolpy // Naukovi rozrobki, peredovi tehnologii, innovacii: II Mizhn. nauk.-prakt. konf., 05 – 07 travnja 2015, Budapesht-Praga-Kiiv. – K.: NDIER. – 2015. – S. 227 – 229. (in Russian)
20. Yanagisawa D., Kimura A., Tomoeda A. et al. Introduction of Frictional and Turning Function for Pedestrian Outflow with an Obstacle. – 2009. – 16 p. – Access mode: <http://arxiv.org/pdf/0906.0224.pdf>.
21. Holshhevnikov V.V., Samoshin D.A. Jevakuacija i povedenie ljudej pri pozharah. – M.: Akademija GPS MChS Rossii, 2009. – 212 s. (in Russian)
22. Korepanov V.O. Modeli refleksivnogo gruppovogo povedenija i upravljenija. – M.: IPU RAN, 2011. – 127 s. (in Russian)
23. Neumann J. The general and logic theory of automats // Cerebral Mechanics in Behavior. – New York: Wiley. – 1951. – P. 1–31.
24. Drobaha G.A., Rozanova L.V., Lisicin V.E. Imitacijne modeljuvanja dij natovpu u zadachah doslidzhennja jogo povedinki pid chas provedennja masovih zahodiv // Zbirnik naukovih prac' Akademii vnutrishnih vijs'k MVS Ukrayini. – 2013. – Vip. 2 (22). – S. 31 – 40. (in Russian)
25. Stepanov M.E. Matematicheskaja model' napravlenogo dvizhenija grupy ljudej // Matematicheskoe modelirovanie. – 2004. – T. 16(3). – S. 43 – 49. (in Russian)
26. Moroshita S., Shiraiishi T. Evacuation of billboards based on pedestrian flow in the concourse of the station // Lecture notes in computer science. – Berlin, Heidelberg: Springer. – 2006. – No. 4173. – P. 716 – 719.
27. Perez G.J., Tapang G., Lim M., Saloma C. Streaming, disruptive interference and power-law behavior in the exit dynamics of confined pedestrians // Physica A. – 2002. – Vol. 312. – P. 609 – 618.
28. Zhao D.L., Yang L.Z., Li J. Exit dynamics of occupant evacuation in an emergency // Physica A. – 2006. – Vol. 363. – P. 501 – 512.
29. Varas A., Cornejo M.D., Mainemer D. et al. Cellular automata model for evacuation process with obstacles // Physica A. – 2007. – Vol. 382. – P. 631 – 642.
30. Helbing D., Farkas I., Vicsek T. Simulating dynamical features of escape panic // Nature. – 2000. – Vol. 407. – R. 487 – 490.
31. Aptukov A.M., Bracun D.A. Modelirovanie gruppovoj dinamiki tolpy, panikujushhej v ogranichenom prostranstve // Vestnik Permskogo Universiteta. Serija: Matematika. Mehanika. Informatika. – 2009. – Vyp. 3(29) – S. 18 – 23. (in Russian)
32. Andrusik Ja., Chernjak P., Andrusik A. Pobudova pokrashhenoi matematichnoi modeli povedinki natovpu, shho panikue, pid chas vtechi z primishhennja // Visnik nacional'nogo universitetu «Lviv'ska politehnika». – 2010. – Vip. 687. – No. 687. – S. 148 – 155. (in Russian)
33. Grebennikov R.V. Razrabotka individual'nyh harakterov povedenija pri modelirovanii tolpy // Vestnik VGU. Serija: Sistemnyj analiz i informacionnye tehnologii. – Voronezh: VGU. – 2008. – T.2. – S. 41 – 44. (in Russian)
34. Aptukov A.M., Bracuna D.A., Ljushnin A.V. Modelirovanie povedenija panikujushhej tolpy v mnogourovnevom razvetvlenom

- pomeshhenii // Komp'yuternye issledovaniya i modelirovanie. – 2013. – T. 5. – No. 3. – S. 491 – 508. (in Russian)
35. Bogdanov K.Ju. Progulki s fizikoj. – M.: Bjuro Kvantum, 2006. – 192 s. (in Russian)
  36. Kachroo P., Al-nasur S. J., Wadoo S.A., Shende A. Pedestrian Dynamics Feedback Control of Crowd Evacuation. – New York: Springer. – 2008. – 260 p.
  37. Wooldridge M. Introduction to MultiAgent Systems. – John Wiley and Sons, 2002. – 365 p.
  38. Schweitzer F. Browning Agents and Active Particles. – New York: Springer. – 2007. – 420 p.
  39. Rassel S., Norvig P. Iskusstvennyj intellekt: sovremennyy podhod. – M.: Izdatel'skij dom «Vil'jams», 2006. – 1408 s. (in Russian)
  40. Tarasov V.B. Ot mnogoagentnyh sistem k intellektual'nym organizacijam: filosofija, psihologija, informatika: monografija. – M.: Jeditorial URSS, 2002. – 352 s. (in Russian)
  41. Konolige K. A first-order formalization of knowledge find action for multiagent planning system // Machine Intelligence. – Chichester: Ellis Horwood, 1982. – Vol. 10. – P.41 – 72.
  42. Funge J., Tu X., Terzopoulos D. Cognitive Modeling: Knowledge, Reasoning and Planning for Intelligent Characters // Computer Graphics Proceedings, In Siggraph 1999, Los Angeles, CA, August 11-13. – 1999. – P. 29 – 38.
  43. Lanovoj A.F., Lanovoj A.A. Modelirovanie povedenija tolpy na osnove diskretno-sobytnogogo mul'tiagentnogo podhoda // Vostochno-Evropskij zhurnal peredovyh tehnologij. – 2014. – No. 4/4 (70). – S. 52 – 57. (in Russian)
  44. Pis'michenko D.V., Bozhich V.I. Mul'tiagentnaja model' povedenija tolpy // Izvestija TRTU. Tematicheskij vypusk «Intellektual'nye SAPR»: Materialy mezhd. nauch.-teh. konf. «Intellektual'nye SAPR». – Taganrog: Izd-vo TRTU, 2002, – No.3(26). – S. 19 – 22. (in Russian)
  45. Abrosimov V.K., Lebid'ko V.V. Imitacionnoe modelirovanie organizacii massovyh meroprijatij (na primere XXII zimnih olimpijskih igr 2014) // Biznes-informatika. – 2013. – No.1 (23). – S. 19 – 27. (in Russian)
  46. Krasnaja S.A., Smirnov S.S. Modelirovanie processa jevakuacii ljudej iz uchebnyh uchrezhdenij na osnove mul'tiagentnogo podhoda // Nauchnyj poisk v sovremennom mire: I mezhd. nauch.-prakt. konf., 1 oktjabrja 2012 g., g. Moskva. – Moskva: Izdatel'stvo Pero. – 2012. – S. 28 – 34. (in Russian)
  47. Treuille A., Cooper S., Popovic Z. Continuum Crowds – Access mode: <http://computerscience.nl/docs/vakken/mcrs/papers/17.pdf>.
  48. Blue V.J., Adler J.L. Cellular automata microsimulation for modeling bidirectional pedestrian walkways // Transportation Research. – 2001. – Vol. 35. – P. 293 – 312.
  49. Hughes R. L. The Flow of Human Crowds // Annual review of fluid mechanics. – 2003. – Vol. 35. – P. 169 – 182.
  50. Grebennikov R.V. Modelirovanie povedenija tolpy s ispol'zovaniem lokal'nyh skaljarnyh polej: dis. kand. tehn. nauk. – Voronezh, 2011. – 113 s. (in Russian)
  51. Grebennikov R.V. Model' povedenija tolpy na osnove lokal'nyh potencial'nyh polej // Vestnik VGU. Serija: sistemnyj analiz i informacionnye tehnologii. – 2009. – No. 1. – S. 46 – 50. (in Russian)
  52. Bronshtejn, I.N., Semendjaev K.A. Spravochnik po matematike dlja inzhenerov i uchashhihsja vuzov. – M.: Nauka, Gl. red. fiz.–mat. lit., 1986. – 544 s. (in Russian)
  53. Grebennikov R.V. Reshenie zadachi ob optimal'nom povedenii tolpy s ispol'zovaniem metoda optimizacii roja chastic // Vestnik VGU. Serija: sistemnyj analiz i informacionnye tehnologii. – 2009. – No.2. – S. 107 – 111. (in Russian)
  54. Hughes R.L. A continuum theory for the flow of pedestrians // Transportation Research. – 2002. – Vol. 36. – P. 507 – 535.

PACS: 89.30.Gg, 28.41.Qb, 81.65.Tx

**THE INVESTIGATION OF Zr-Ni NON-EVAPORABLE GETTER PROPERTIES****S.D. Lavrinenko, M.M. Pylypenko, H.M. Aksonova, A.P. Svinarenko,  
Yu.P. Bobrov, I.V. Kolodiy***National Science Center «Kharkiv Institute of Physics and Technology»,  
1, Akademicheskaya Str., Kharkov 61108, Ukraine**E-mail: [aksyonova\\_anya@mail.ru](mailto:aksyonova_anya@mail.ru)*

Received September 26, 2015

The investigation results for the non-evaporable getter with the chemical composition Zr (60) – Ni (40 wt.%), that was prepared by calciumthermic technology and comprised two phases: ZrNi and Zr<sub>2</sub>Ni are presented. The phase composition, microstructure and gas release spectrum from the alloy sample are investigated. It has been concluded that the tested material can be used as a getter component for hydrogen “traps” creation in the NPP's constructional materials and welds.

**KEY WORDS:** non-evaporable getter, alloy, phase composition, microstructure, gas emission**ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ГЕТЕРА, ЩО НЕВИПАРОВУЄТЬСЯ, НА ОСНОВІ СПЛАВУ СИСТЕМИ  
Zr-Ni****С.Д. Лавриненко, М.М. Пилипенко, Г.М. Аксьонова, А.П. Свиначенко, Ю.П. Бобров, І.В. Колодій***Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»**вул. Академічна 1, м. Харків 61108, Україна*

Наведено результати дослідження гетерного матеріалу, хімічного складу Zr (60) – Ni (40 мас.%), який отримано по кальцієтермічній технології, і який містить фази: ZrNi і Zr<sub>2</sub>Ni. Досліджено фазовий склад, мікроструктуру та спектр газовиділення із зразка сплаву. Зроблено висновок, що цей матеріал може розглядатися в якості гетерного додатку для створення “пасток” водню в конструкційних матеріалах та зварних з'єднаннях устаткування АЕС.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** гетер, що не випаровується, сплав, фазовий склад, мікроструктура, газовиділення**ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ НЕРАСПЫЛЯЕМОГО ГЕТТЕРА НА ОСНОВЕ СПЛАВА СИСТЕМЫ Zr-Ni****С.Д. Лавриненко, Н.Н. Пилипенко, А.Н. Аксенова, А.П. Свиначенко, Ю.П. Бобров, И.В. Колодий***Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»**ул. Академическая 1, г. Харьков 61108, Украина*

В работе представлены результаты исследований геттерного материала, имеющего химический состав Zr (60) - Ni (40 мас.%), полученного по кальциетермической технологии и содержащего фазы: Zr<sub>2</sub>Ni и ZrNi. Исследованы фазовый состав, микроструктура и газовыделение из образцов сплава. Сделан вывод, что этот материал может рассматриваться в качестве геттерной добавки при создании “ловушек” водорода в материалах и сварных соединениях конструкций АЭС.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** нераспыляемый геттер, сплав, фазовый состав, микроструктура, газовыделение

Improvement in quality of structural materials in construction of nuclear power stations (NPPs) is the most important direction for the development of the nowadays material sciences.

Very tight specifications impose to quality of welds that in used structural materials broadly determine their reliability and durability.

It has been established that, strength characteristics loss of welds depends significantly on hydrogen that contained in weld zone and round about it. Hydrogen is a detrimental impurity because it deteriorates many characteristics of welds. It causes to the embrittlement and the uncontrolled stabilization that hinders inelastic deformation under mechanical metal-working of structural materials. It also adversely affects on long-term stress and thermal stability; static and thermal fatigue, endurance, endurance strength and also, adversely affects on creep flow characteristics.

One of the ways to decrease this negative hydrogen influence is bonding it in hydrogen “traps” which can be non-evaporable getters, added in weld zone and round about it. Such “traps” blocks up hydrogen diffusion, absorb, collect and hold down it effectively [1].

In the present paper as the hydrogen “trap” the alloy Zr (60) – Ni (40 wt.%), comprised two phases: ZrNi and Zr<sub>2</sub>Ni, is provided. According to the earlier studies [2] ZrNi and Zr<sub>2</sub>Ni intermetallic compounds can absorb ~ 2 wt.% hydrogen under ambient temperature and atmospheric pressure. In spite of hydrogen ZrNi absorbs extensively CO, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O. Intermetallide Zr<sub>2</sub>Ni absorbs extensively O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O. These intermetallics also activate easy start with ~ 250 °C, under 900 °C they activate during less than 1 min.

The elements of this alloy (Zr, Ni) have nuclear characteristics that correspond for nuclear chain reactor under working conditions [3].

These alloys technology is well proven; they can be getting in right amounts. The alloys are crushed in grits or powder in required dimensions. It is essential when the technologic adding them in weld zone and round about it and also another construction material is developing.

The experiments in cooperation of hydrogen with the NPS construction materials, including studying of process gas release spectrum from materials, can be used as a powerful method of materials nondestructive testing because it makes it possible to determine flow density, their changing under various impacts, output performances, dimensions, capacity, hydrogen occupation density. It can be an effective contribution in materials quality improvement that is developing for construction materials using in NPS building.

This present work aims at investigation the phase composition, microstructure and gas release spectrum from the alloy sample with the chemical composition Zr (60) – Ni (40 wt.%), that was prepared by calciumthermic technology.

### ALLOY TECHNOLOGY AND EXPERIMENTAL SETUP

The examination alloy was prepared by calciumthermic technology [4]. This technology has a simple design, energy-efficiency and provides high quality of alloys. For alloying chemical reactions are used:



If is used nickel tetrafluoride, then



For present research the alloy was obtained by reaction (1).

The ingots of alloy are chemically homogeneous. The Ni content in the top and bottom parts can be different by less than 3.5 wt.%.

### The investigation of sorption characteristic

The investigation of hydrogen and other gas impurities sorption characteristics from tested alloy under heated in the vacuum was examined on the setup that is shown in fig.1. The setup involves the vacuum chamber (1) that consists of two parts, connected together by the vacuum seal (2). The tested sample (3) is disposed on the top, which falls under experiment in the bottom of the heater (4) of the furnace (5). The temperature in the furnace (5) is measured of Pt-Pt/Rd thermocouple (6) that connected to the isothermal temperature regulator (7). Pumpdown in the chamber (1) is provided by the MX 7203 mass-spectrometer vacuum system through the nipple (8).

The investigation of sorption characteristic was held within the temperature range from room to ~ 730 °C in the first-ever experiment and to a maximum of ~ 900 °C in the next experiment.

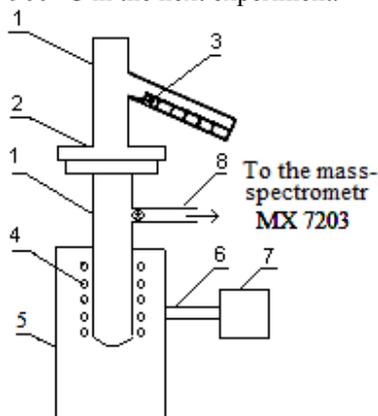


Fig.1. Schematic of setup for sorption characteristics measurement:

1 - chamber, 2 - vacuum seal, 3 – tested sample, 4 – heater, 5 – furnace, 6 – Pt-Pt/Rd thermocouple, 7 – isothermal temperature regulator, 8 – nipple

### X-ray diffraction analysis

The x-ray diffraction analysis of sample alloys were taken on DRON-4-07 with copper radiation. Registered profiles of the x-ray diffraction curves are digitized and printed on the computer screen. For the indexing of x-ray photographs the PCPDF database [5] and the software applications for the x-ray structure analysis of the polycrystals are used [6].

### Metallographic analysis

Metallographic analyses were performed by optical microscopy MMR-4. The surfaces of the samples before research were prepared by polishing on the abrasive papers then sanding on the diamond pastes with decrease grit size. For alloy microstructure developing the chemical etching was made with nitrogen acid, fluoric acid and hydrogen peroxide mixture. The most tailored composition was: nitrogen acid – 37.5 ml; fluoric acid – 25 ml; hydrogen peroxide – 37.5 ml. Time etching – 2 s.

### RESEARCH RESULTS AND DISCUSSION

Fig. 2 shows the sections of the samples before chemical etching, which were cut out from different parts of the alloy in the longitudinal section and cross-cut of the surface. It is impressive to see pores that have a right round figure

overall and show distinct limits (dark spots on the polished section). Openness in the alloy that proposed as hydrogen sorbent it is advantage because increases active surface of the sorbent and give absorbed gas plumb into bulk quickly.

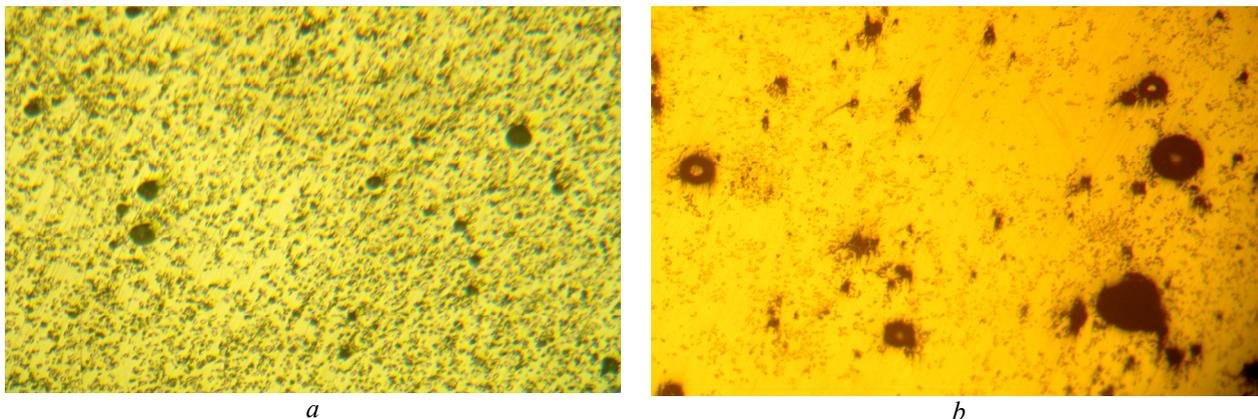


Fig. 2. The sections of the samples before chemical etching which were cut out from different parts of the alloy: *a* longitudinal section of the surface, *b* cross-cut of the surface. Magnification  $\times 80$

Fig. 3,4 show the longitudinal and cross-cut of sections of the surface sample after chemical etching in nonpolarized and polarized light.

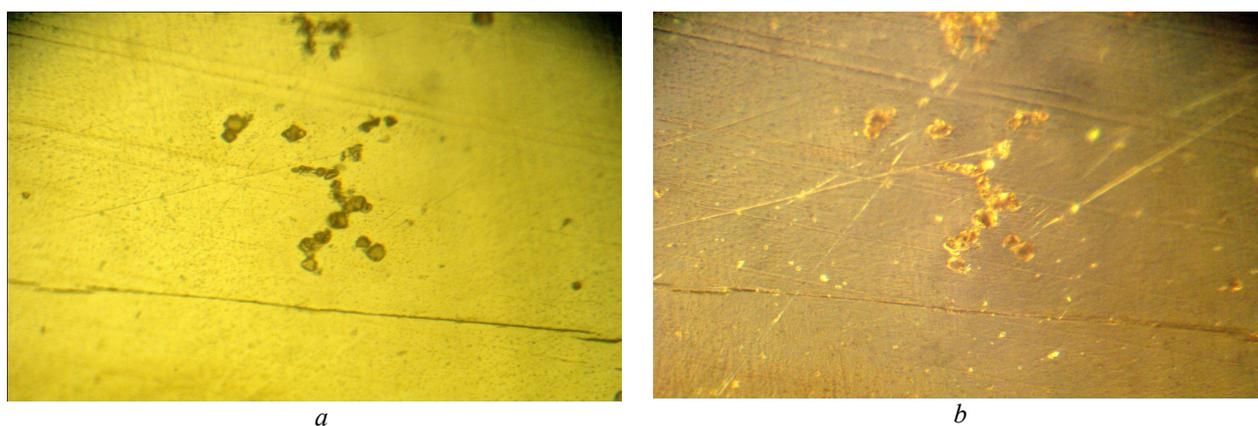


Fig. 3. Longitudinal section of the surface sample after chemical etching: *a* - nonpolarized light; *b* - polarized light. Magnification  $\times 300$

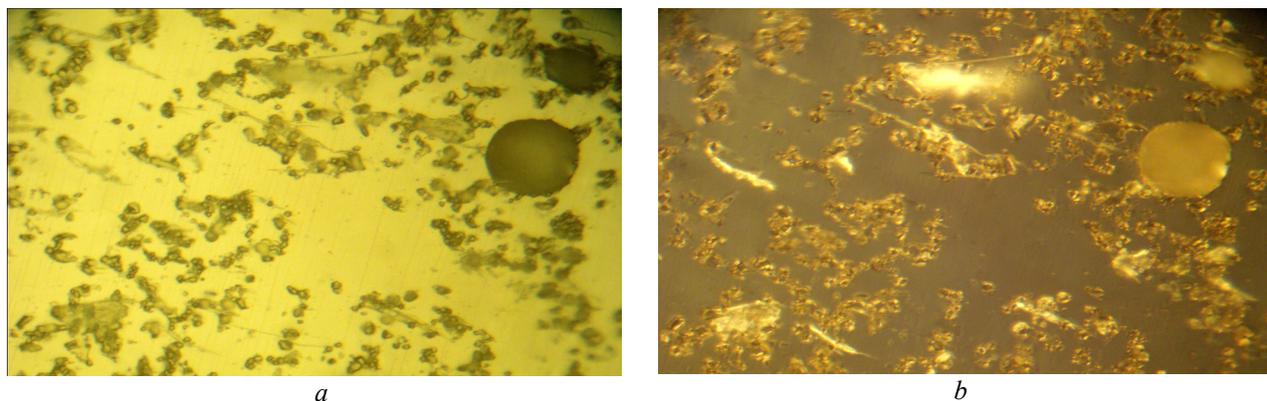


Fig 4 Cross-cut of the surface sample after chemical etching: *a* - nonpolarized light; *b* - polarized light. Magnification  $\times 300$

On the longitudinal and cross-cut sections of the samples after their chemical etching are clearly seen two phases that are different own abundance ratio. Quantitative evaluations of presented phases that were examined visually show the values  $\sim 80\%$  for the phase that submit on the cross-sections of the surface, as a big light area and the small precipitations of the same color,  $\sim 10\%$  for the phase that submit as the small precipitations dark color. This proportion agrees with  $Zr_2Ni$  and  $ZrNi$  phase proportion which was calculated from view of the Zr-Ni phase diagram according to

the segments rule. Thus we can interpret this phases as  $Zr_2Ni$  and  $ZrNi$ .

Metallographic analyses are used in polarized light showed that observed phases can't be related to the cubic system.

The x-ray data also showed presence two phases. Fig. 5 shows diffraction pattern of the examination alloy.

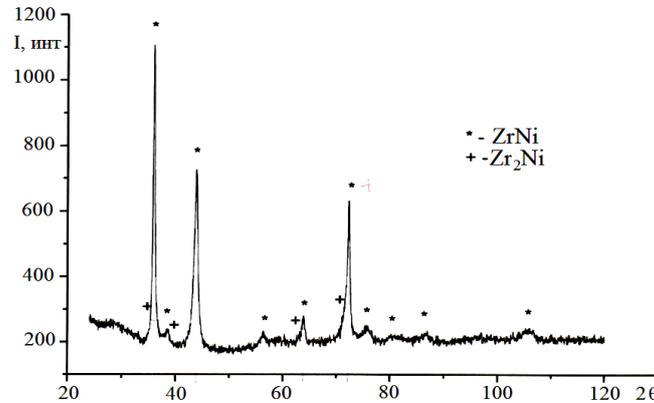


Fig. 5. The diffraction pattern of the Zr-Ni alloy under examination

One phase is indexing in orthorhombic system with the lattice parameters:  $a = 3.257 \text{ \AA}$ ;  $b = 9.944 \text{ \AA}$ ;  $c = 4.118 \text{ \AA}$ ; another one is indexing in tetragonal system with the lattice parameters:  $a = 6.483 \text{ \AA}$ ;  $c = 5.267 \text{ \AA}$ . These dates in good agreement with PCPDF databases for  $Zr_2Ni$  and  $ZrNi$  intermetallic compounds.

Fig. 6 shows the gas release spectrum from the examination alloy which was held for a month in contact with atmosphere only, underwent neither addition annealing nor hydrogenation. Observable peaks on the desorption curve on the initial part of it up to  $\sim 140 \text{ }^\circ\text{C}$  are associated with gas release of easily volatile compounds of the carbon and hydrogen ( $C_nH_m$ ) which contained in passive surface of the alloy. The sulfur and its oxides that also can be at the surface of getters based on Zr weren't specified because the mass-spectrometer which is used in present work could register gases with the mass number only up to 60 [7]. The gas release spectrum in the temperature interval from  $\sim 190 - 240 \text{ }^\circ\text{C}$  with the maximum under  $\sim 210 \text{ }^\circ\text{C}$  is typical for the hydrogen release from  $Zr_2Ni$  intermetallic compound. The low-level spike amplitude depends on small equilibrium hydrogen pressure, which is equal to  $\sim 10^{-6} \text{ Pa}$  under the referred temperature [8].

Significant gas release appears in the temperature interval from  $\sim 370 - 710 \text{ }^\circ\text{C}$ . Sharp peaks in this temperature interval can be associated with water release under  $\sim 400 - 450 \text{ }^\circ\text{C}$  and hydrogen release under  $\sim 450 - 710 \text{ }^\circ\text{C}$  mainly from  $ZrNi$  and by a negligible margin from  $Zr_2Ni$  intermetallic compounds. The first peak of hydrogen release with a maximum under  $\sim 480 \text{ }^\circ\text{C}$  is defined as being it release from the surface of  $ZrNi$  intermetallic compound, the second peak appearance with a maximum under  $\sim 570 \text{ }^\circ\text{C}$  is interpreted as hydrogen release from the bulk  $ZrNi$  intermetallic compound. Desorption curve also shows small amount of hydrogen which is confined in the alloy under temperature above  $\sim 700 \text{ }^\circ\text{C}$ .

Fig 7. shows the gas release spectrum from the examination alloy which was anneald additionally under  $926 \text{ }^\circ\text{C}$  during 1 min. and pressure was  $\sim 2 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$ . Selected annealing cycle provides full surface activation of the non-evaporable getter [9].

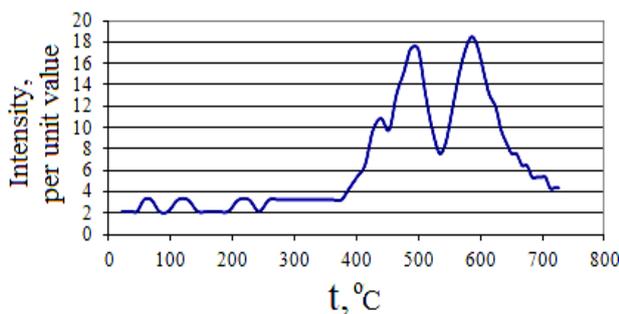


Fig. 6. The gas release spectrum from the Zr-Ni alloy before annealing

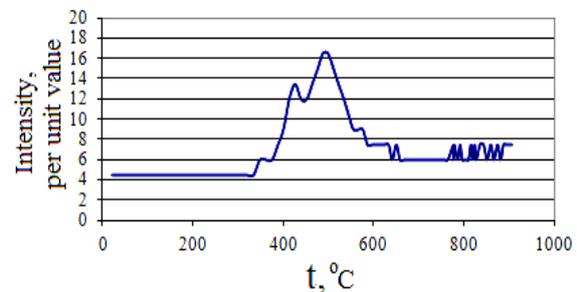


Fig. 7. The gas release spectrum from the Zr-Ni alloy after annealing

Gas release curve begin with temperature  $\sim 350 \text{ }^\circ\text{C}$  and up to  $\sim 900 \text{ }^\circ\text{C}$  similar in curve configuration that was presented in Fig.6. Secondary maximum of hydrogen release under temperature  $\sim 576 \text{ }^\circ\text{C}$  is much less by a magnitude in comparisson with similar maximum in Fig. 6. This is due to on the one hand in the interior of the annealed sample in the bulk of it the quantity of residual hydrogen is much less then in the non - annealed sample. On the other hand this decrease of peak, uprise and location of it in general case depend on hydrogen bond energy in the intermetallid and

hydrogen diffusion rate in the bulk of alloy. Even though the least hydrogen quantity in the bulk sample during heating gets inside of bulk intermetallide (ZrNi) and after raise of temperature wherein bonds desintegration with intermetallide happen it sets up second thermodesorption peak. This fact has been described in details previously [10].

Curved line in the temperature interval from  $\sim 770$  °C and above  $\sim 900$  °C where is seen intensive release of hydrogen corresponds with predict curved line in the context of phenomeno-logical theory of hydrogen diffusoin in defective environments and has been confirmed in many experimental works [11, 12]. Irregular curve shape on this temperature interval firstly may be due to hydrogen which risede in various kind positions in ZrNi lattice split a bonds whith it, secondly hydrogen can be in lattice positions whith differing degrees of defect structure.

Irregular shapes of gas release curves, presented in Fig. 6,7 are typical not only for selected getter. Bimodal mode of curves was predicted by hydrogen diffusion theory in defective mediums [13]. Similar curve shapes were found experimentally and on other materials [14].

Examination alloy ability holds on small amount of hydrogen under temperature above  $\sim 700$  °C is essential for the getter which is proposed as hydrogen “traps”.

### CONCLUSIONS

The phase composition, microstructure and gas release spectrum up to temperature above  $\sim 900$  °C from the sample of the alloy Zr(60) – Ni (40 wt.%) which prepared by calciumthermic technology were investigated. This alloy can contain small hydrogen amounts up to temperature above  $\sim 900$  °C, thus it may be regarded as a getter component for hydrogen “traps” creation in the NPP's constructional materials and welds for their performance characteristics improvement by decrease hydrogen detrimental effect. For the purposes of possibility this getter as hydrogen “traps” it is necessary to develop the injection procedure of this hydrogen “traps” in the welds and field around it for the NPP's constructional materials.

### REFERENCES

1. Pokhodnya I.K., Yavdoshin I.R., Paltsevich A.P. et al. Metallurgy of arc welding. The interaction of metal with gases. – Kiev: Naukova Dumka, 2004. - 506 p.
2. Sokolenko V.I., Tikhonovsky M.A., Volchok O.Y., Sibiliva R.M., Grigorova T.K., Gorbatenko V.M., Svinarenko A.P. et al. Development of technology for recycling sewage sludge to obtain hydrogen as fuel. Project Report No. 4960, 2011. - 27 p.
3. Beckman I.N. The nuclear industry. Lecture course. – Moscow, 2005. - 34 p.
4. Azhazha V.M., Lavrinenko S.D., V'yugov P.N., Lindt K.A., Mukhachev A.P., Pylypenko M.M. Zirconium and its alloys. Production technology, application field. Kharkov: NSC KIPT, 1998. - 88 p.
5. Database PCPDF // International Center for Diffraction Data, 1996. - P. 20-23.
6. Serykh V.P., Serykh L.M. Computer Methods in X-ray diffraction of polycrystalline: Review. Kharkov: NSC KIPT, 2004. - 76 p.
7. Bykov D.V., Klimov S.V., Panina E.G. The results of studies of low temperature activation process non-evaporable getters based on titanium and zirconium // Second National Workshop on non-evaporable getters. – Moscow, 1991. - P.10 – 13.
8. Dantzer P., Orgaz E. Thermodynamics of hydride chemical heat pump – II. How to select a pair of alloys // Int. J. Hydrogen Energy. – 1986. – Vol.11. – No.12. – P. 797- 806.
9. Bykov D.V., Kondrashova O.I., Smirnov S.N., Klimov S.V. The investigation of the activation process Ti non-evaporable getters: Review NSC, MIEM, 1989. - P. 9 – 25.
10. Mavrikakis M., Schwank W., Gland L. The effect of exposure time and pressure on the temperature-programmed desorption spectra of system with bulk states // Surface Science. – 1996. – Vol. 355. – P. L385 – L392.
11. Beckman I.N., Gabisov I.E., Kompanietz T.N., etc. The investigation of the hydrogen permeability in manufacturing technique of electronic products: Electronics review. M.: CRI «Electronics». – 1985. - 66 p. (Line: Technology, industry engineering and facility. - Vol.1. - P. 1084)
12. Tazhibaeva I.L., Beckman I.N., Shestakov V.P., Rudenko N.V. // Physico-chemical mechanics of material. – 1985. – Vol. 21. – No.1. - P. 18-23
13. Ageev A.V., Beckman I.N., Burmistrova O.P. et al. Hydrogen interaction with metals. – M.: Nauka, 1987. - 294 p.
14. Gorodetsky A.E., Zakharov A.P., Sharapov V.M. // Journal of Physical Chemistry. – 1980. – Vol. 64. - Iss. I.S. – P. 2874 – 2881.

PACS: 61.46. – w, 62.20. Qp, 62-65. – g

## MECHANICAL PROPERTIES OF MULTILAYERED COATINGS MoN/CrN OBTAINED BY MEANS OF VACUUM-ARC DEPOSITION METHOD

S.S. Grankin<sup>1</sup>, V.M. Beresnev<sup>1</sup>, O.V. Sobol<sup>2</sup>, U.S. Nyemchenko<sup>1</sup>,  
V.A. Stolbovoy<sup>3</sup>, P.V. Turbin<sup>1,4</sup>, A.A. Meylehov<sup>2</sup>, M.Ju. Arsenko<sup>5</sup>

<sup>1</sup> Karazin Kharkiv National University  
Svobody Sq. 4, Kharkiv, 61022 Ukraine

<sup>2</sup> National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute"  
Frunze St., 21, Kharkiv, 61002 Ukraine

<sup>3</sup> National Science Center "Kharkiv Institute of Physics and Technology"  
Academicheskaya St., 1, Kharkiv, 61108, Ukraine

<sup>4</sup> Scientific Center of Physical Technologies of MES and NAS  
Svobody Sq. 6, Kharkiv, 61022 Ukraine

<sup>5</sup> Belgorod National Research University  
Koroleva St., 2a, Belgorod, 308015 Russia

e-mail: [beresnev-scpt@yandex.ru](mailto:beresnev-scpt@yandex.ru)

Received September 19, 2015

Transition metal nitrides of Mo and Cr are characterized by a relatively low heat of formation. The possibilities of elemental and structural engineering of vacuum-arc coatings based on Mo and Cr under the influence of the bias potential  $U_s$  and the reaction gas pressure  $P_N$  have been studied. It was found that at a relatively small thickness of the layers of nanometer range, which provides superhard state of the coatings, the supply of  $U_s$  with the value of above the critical leads to a drop in hardness, which can be explained by mixing of layers at the interphase boundary.

**KEYWORDS:** vacuum-arc coatings, vacuum-arc, multilayered coatings, nanocomposite coatings

## МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ПОКРЫТИЙ MoN/CrN, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ВАКУУМНО-ДУГОВОГО ОСАЖДЕНИЯ

С.С. Гранкин<sup>1</sup>, В.М. Береснев<sup>1</sup>, О.В. Соболев<sup>2</sup>, У.С. Немченко<sup>1</sup>,  
В.А. Столбовой<sup>3</sup>, П.В. Турбин<sup>1,4</sup>, А.А. Мейлехов<sup>2</sup>, М.Ю. Арсенко<sup>5</sup>

<sup>1</sup> Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина  
пл. Свободы 4, Харьков, Украина, 61022

<sup>2</sup> Национальный технический университет "Харьковский политехнический институт"  
ул. Фрунзе 21, Харьков, Украина, 61002

<sup>3</sup> Национальный научный центр "Харьковский физико-технический институт"  
ул. Академическая 1, Харьков, Украина, 61108

<sup>4</sup> Научный центр физических технологий МОН и НАН Украины  
пл. Свободы 6, Харьков, Украина, 61022

<sup>5</sup> Белгородский национальный исследовательский университет  
ул. Королева 2а, Белгород, Россия, 308015

Нитриды переходных металлов Мо и Сг характеризуются сравнительно низкой теплотой образования. Были изучены возможности элементной и структурной инженерии вакуумно-дуговых покрытий на основе Мо и Сг под влиянием потенциала смещения  $U_s$  и давления реакционного газа  $P_N$ . Было обнаружено, что при сравнительно небольшой толщине слоев нанометрового порядка, который обеспечивает сверхтвердое состояние покрытий, подача  $U_s$  величиной, превышающей критическое значение, приводит к падению твердости, что можно объяснить перемешиванием слоев межфазной границы.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** вакуумно-дуговые покрытия, многослойные покрытия, нанокompозитные покрытия

## МЕХАНИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ БАГАТОЕЛЕМЕНТНИХ ПОКРИТТІВ MoN/CrN, ОТРИМАНИХ МЕТОДОМ ВАКУУМНО-ДУГОВОГО ОСАДЖЕННЯ

С.С. Гранкін<sup>1</sup>, В.М. Береснев<sup>1</sup>, О.В. Соболев<sup>2</sup>, У.С. Немченко<sup>1</sup>,  
В.А. Столбовой<sup>3</sup>, П.В. Турбін<sup>1,4</sup>, А.А. Мейлехов<sup>2</sup>, М.Ю. Арсенко<sup>5</sup>

<sup>1</sup> Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
м. Свободи 4, Харків, Україна, 61022

<sup>2</sup> Національний технічний університет "Харківський політехнічний інститут"  
вул. Фрунзе 21, Харків, Україна, 61002

<sup>3</sup> Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут"  
вул. Академічна 1, Харків, Україна, 61108

<sup>4</sup> Науковий центр фізичних технологій МОН та НАН України  
м. Свободи 6, Харків, Україна, 61022

<sup>5</sup> Белгородський національний дослідницький університет  
вул. Корольова 2а, Белгород, Росія, 308015

Нітриди перехідних металів Мо та Сг характеризуються порівняно низькою теплою утворення. Було вивчено можливості елементної та структурної інженерії вакуумно-дугових покриттів на основі Мо та Сг під впливом потенціалу зсуву  $U_s$  та тиску реакційного газу  $P_N$ . Було виявлено, що при порівняно невеликій товщині шарів нанометрового порядку, який забезпечує надтвердий стан покриттів, подача  $U_s$  величиною, що перевищує критичне значення, призводить до падіння твердості, що можна пояснити перемішуванням шарів міжфазної границі.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** вакуумно-дугові покриття, багат шарові покриття, нанокompозитні покриття

Using multilayer systems allows to carry out simulation during the deposition, not only for the structural state of each of the layers individually, but also by adjusting the thickness, the type of material and the number of layers in a period; creation of artificial structures with unique functional properties is also possible [1 - 5].

Structure and properties of the coatings based on MoN and CrN in monolayer state may vary in a wide range depending on the potential applied to the substrate and the pressure of nitrogen atmosphere during the deposition process [6, 7]. In connection to this, we can expect considerable sensitivity of structural states and properties of the coatings obtained by combining CrN and MoN as layers of the multilayer system.

Thus, the greatest effects can be expected in the nanometer size of the layers, which is due to the high mechanical properties of nitrides in this size range [8, 9].

Thus, the aim of this work was to obtain the coatings MoN/CrNc with nanometer sizes of the layers by means of vacuum-arc deposition and study of their physical and mechanical characteristics.

### EXPERIMENTAL PART

The samples of multilayer coating were obtained by means of vacuum-arc method by means of the modernized "Bulat-6" installation [10]. The pressure of working atmosphere (nitrogen) during the deposition was  $P_N = (7 \dots 30) \times 10^{-4}$  Torr, the deposition speed was about 3 nm/s.

The deposition was implemented from two sources (Mo and Cr) with continuous rotation with a speed of 8 rpm of fixed samples on the substrates, which allowed to obtain the layers with a thickness of about 10 nm, with a total amount of layers 960 (or 480 bilayer periods) and total thickness of the coating of about 9  $\mu\text{m}$  during one hour deposition. In the process of deposition the constant negative potential with a value of  $U_s = -20$  V, -70 V, -150 V and -300 V was applied to the substrates.

Phase and structural analysis was carried out by means of X-ray diffraction method in the emission of Cu-K $\alpha$ . The separation of profiles into components was carried out by means of the software package "New Profile". The elemental composition was investigated by energy dispersive method by means of scanning electron microscope FEI Nova NanoSEM 450. The hardness of the coatings was measured by means of durometer DM-8 by micro-Vickers method, at a load on indenter of 0.2 N.

### RESULTS AND DISCUSSION

Fig. 1 shows the data of elemental analysis depending on the pressure  $P_N$  and the applied negative bias potential  $U_s$ . It can be seen that the content of nitrogen as a light interstitial element in determining way depends on the magnitude of  $P_N$  during the deposition (Fig. 1a). The effect of  $U_s$  affects lesser (Fig. 1b) and appears in a relative decrease (due to selective secondary sputtering from the growth surface) of the atomic concentration of nitrogen at high  $U_s$ .

It should be noted, that the strengthening of connections between the deposited metal and the atmospheric nitrogen at high pressure  $P_N$  leads to stabilization of the coating composition to a substantially larger in magnitude  $U_s$  (Figure 1b, dependence 2).

Increasing the bias potential  $U_s$  leads to a significant increase in uniformity (reduction of dropping component) of the coatings (microscopic image of the morphology on the left of fig. 1c for  $U_s = -20$  V, and on the right for  $U_s = -150$  V).

It should be also noted, that using of pulsed beams to vaporize the material deposited on the substrate allows to eliminates the presence of drop component [11, 12].

The change in the content of metal components of the coating (Mo and Cr) from the bias potential  $U_s$  are shown in Figure 1c, which implies a significant change of Mo/Cr ratio depending on the  $U_s$  at low pressure. The cause of the observed effect is a higher average energy of ions, bombarding the growing coating of the ions Mo and Cr, which is due to smaller losses of energy on collision at low  $P_N$ .

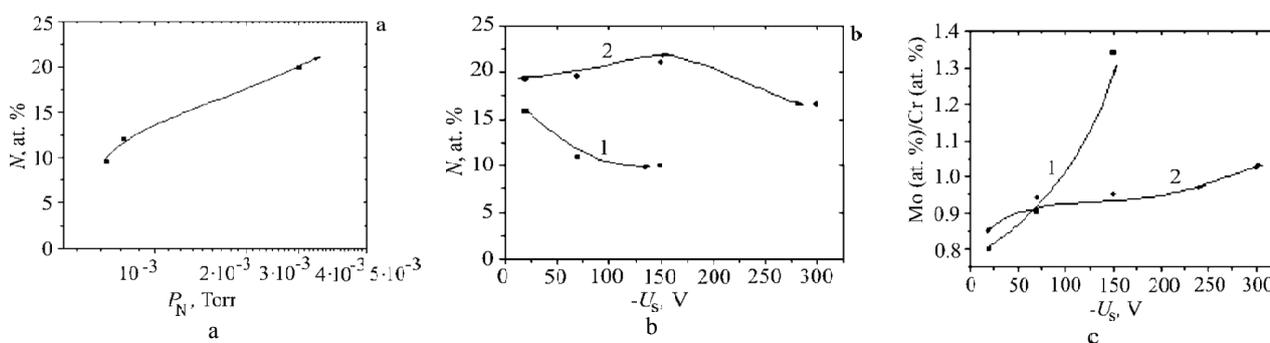


Fig. 1. The changing the content of nitrogen in the coating depends on:

a – pressures during the deposition ( $P_N$ ) at a constant  $U_s = -70$  V; b – from  $U_s$  at a constant  $P_N = 7 \cdot 10^{-4}$  Torr (curve 1) and  $P_N = 3 \cdot 10^{-3}$  Torr (curve 2); c – dependence of the correlation of the atoms Mo/Cr from  $U_s$  at  $P_N = 7 \cdot 10^{-4}$  Torr (curve 1) and  $P_N = 3 \cdot 10^{-3}$  Torr (curve 2).

For structural studies of the influence of the main technological parameters during the deposition (values of the negative bias

potential and pressure) two series of coatings were obtained: series 1, formed at  $P_N = 7 \times 10^{-4}$  Torr and  $U_s = -20$  V,  $-70$  V,  $-150$  V and series 2, formed at  $P_N = 3 \times 10^{-3}$  Torr and  $U_s = -20$  V,  $-70$  V,  $-150$  V and  $-300$  V. At low pressure of  $P_N = 7 \times 10^{-4}$  Torr the formation of lower nitrides  $\beta$ -Cr<sub>2</sub>N (hexagonal lattice, JCPDS 35-0803) и  $\gamma$ -Mo<sub>2</sub>N (cubic fcc, JCPDS 25-1366) takes place, with the compliance of interplane distances of the planes (111) $\beta$ -Cr<sub>2</sub>N/(200) $\gamma$ -Mo<sub>2</sub>N and (110) $\beta$ -Cr<sub>2</sub>N/(111) $\gamma$ -Mo<sub>2</sub>N. The presence of structures with the same interplanar spacings in the contacting layers may indicate the correlated growth of these two structures. With the increase of bias potential  $U_s$  predominant growth of (111) $\beta$ -Cr<sub>2</sub>N/(200) $\gamma$ -Mo<sub>2</sub>N is observed.

At a pressure  $P_N = 3 \times 10^{-3}$  Torr, occurs the formation of cubic (structural type NaCl) lattice in both layers. At the same time, with an increase of  $U_s$ , the transition from polycrystalline non-oriented state at  $U_s = -20$  V to the preferred orientation of the growth of crystallites during the deposition with the axis of the axial texture [100] at the bias potential  $U_s$ , which is greater than the absolute value of  $-70$  V. The appearance of this type of texture is apparently due to the relative decrease in the nitrogen content in the coating with the increase in the absolute value of  $U_s$ , which is expressed by the appearance in of chromium nitride phase  $\beta$ -Cr<sub>2</sub> in the layers at  $U_s = -300$  V.

The obtained wide range of structural states of multilayer coatings defines the significant changes in its mechanical characteristics. Thus, from the dependence of hardness on the bias potential  $U_s$  shown in Fig.2 it is seen, that the highest hardness value is achieved at the lowest  $U_s$  and high pressure  $P_N$ , providing stoichiometric nitrogen composition.

The reduction of hardness at lower pressure can be associated with the formation of vacancies in the nitrogen sublattice due to its smaller content in the coating in comparison with the stoichiometric composition.

The reason of the decrease in hardness with increasing  $U_s$  is the intensification of the mixing process in the border area, which leads to the formation of a significant part of the solid solution with low hardness for relatively thin (about 10 nm) layers.

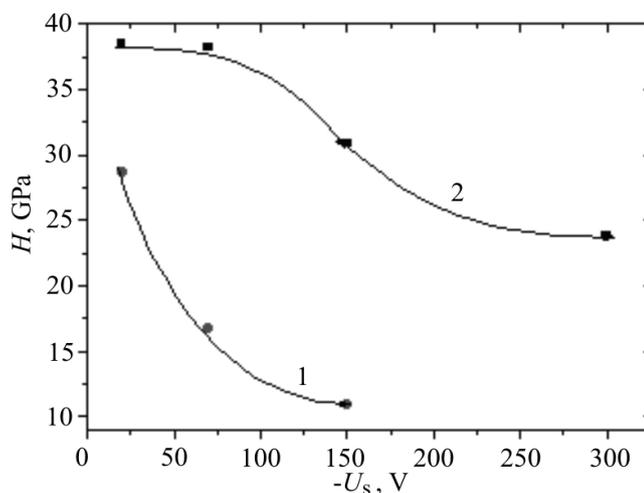


Fig. 2. The dependence of hardness of the coatings of the applied negative bias potential during the deposition: 1 -  $P_N = 7 \times 10^{-4}$  Torr, 2 -  $P_N = 3 \times 10^{-3}$  Torr

### CONCLUSIONS

1. With the decrease of working pressure of nitrogen atmosphere from  $3 \times 10^{-3}$  Torr to  $7 \times 10^{-4}$  Torr, the depletion of the coating MoN/CrN by the nitrogen compound takes place. On a phase and structural level this leads to transition from two alike cubic structures  $\gamma$ -Mo<sub>2</sub>N with a wide homogeneity area in the layers of MoN and Cr<sub>2</sub>N in the layers of CrN, to formation of lower phase by nitrogen  $\beta$ -Cr<sub>2</sub>N with hexagonal crystal lattice.

2. The hardness of the coatings corresponds to high hardness state reaching 38 GPa which lowers with the decrease of pressure during the deposition and applying of negative bias potential, which stimulates selective secondary spraying and depletion by light nitrogen atoms.

This work has been implemented with a partial financial support of the Ministry of Education and Science of Ukraine in the frame of scientific research topics 0113U001079. The part of research has been carried out on the scientific equipment of the Center for collective use "Diagnostics of the structure and properties of nanomaterials" of Belgorod National Research University, under the financial support of the Ministry of Education and Science of Russian Federation in the framework of a project No. 14.594.21.0010, unique code RFMEFI59414X0010.

### REFERENCES

1. Xie Z.H., Hoffman M., Munroe P., Singh R., Bendavid A., Martin P.J. Microstructural response of TiN monolithic and multilayer coatings during microscratch testing // *Journal of Materials Research*. - 2007. - Vol. 22. - No. 08. - P. 2312–2318.
2. Sobol' O.V., Andreev A.A., Grigoriev S.N., Gorban' V.F., Volosova M.A., Aleshin S.V., Stolbovoi V.A. Effect of high-voltage pulses on the structure and properties of titanium nitride vacuum-arc coatings // *Metal Science and Heat Treatment*. - 2012. - Vol. 54. - No. 3-4. - P. 195–203.
3. Lackner J.M., Major L., Kot M. Microscale interpretation of tribological phenomena in Ti/TiN soft-hard multilayer coatings on soft austenite steel substrates // *Bulletin of the polish academy of sciences technical sciences*. - 2011. - Vol. 59. - No. 3. - P. 343–355.
4. Gilewicz A., Warcholinski B. Tribological properties of CrCN/CrN multilayer coatings // *Tribology International*. - 2014. - Vol.80. - P. 34–40.

5. Ertas M., Onel A.C., Ekinci G., Toydemir B., Durdu S., Usta M., Colakerol L. Investigation of VN/TiN Multilayer Coatings on AZ910 Mg Alloys // *International Journal of Chemical, Nuclear, Materials and Metallurgical Engineering*. - 2015. - Vol. 9. – No.1. - P. 53–57.
6. Sobol' O.V., Andreev A.A., Stolbovoi V.A., Fil'chikov V.E. Structural-phase and stressed state of vacuum-arc-deposited nanostructural Mo-N coatings controlled by substrate bias during deposition // *Technical Physics Letters*. - 2012. - Vol. 38. – No. 2. - P. 168–171.
7. Guglya A.G., Neklyudov I.M. Coatings on the Basis of Chromium Nitride. Experience of Design and Investigation // *Progress in Physics of Metals*. - 2005. - Vol. 6. - P. 197–232.
8. Pogrebnyak A.D., Shpak A.P., Azarenkov N.A., Beresnev V.M. Structures and properties of hard and superhard nanocomposite coatings // *Advances in Physical Sciences*. - 2009. - Vol. 179. - No. 1. - P. 35–64.
9. Beresnev V.M., Sobol' O.V., Pogrebnyak A.D., Turbin P.V., Litovchenko S.V. Thermal stability of the phase composition, structure, and stressed state of ion-plasma condensates in the Zr-Ti-Si-N system // *Technical Physics*. - 2010. - Vol. 55. – No. 6. - P. 871–873.
10. Andreev A.A., Sablev L.P., Grigoryev S.N. Vacuum-arc coatings. - Kharkiv: NSC KIPT, 2010. – 318 p.
11. Klepikov V.F., Lonin Yu.F., Lytvynenko V.V., Pashenko A.V., Ponomarev A.G., Uvarov V.V., Uvarov V.T., Sheremet V.I. The formation of strengthening coats by microsecond duration high-current relativistic electron beam // *Problems of Atomic Science and Technology. Ser. Nucl. Phys. Inv.* - 2008. – No. 5(50). - P. 91–95.
12. Batracov A.B., Bazaleev M.I., Donets S.E., Klepikov V.F., Lytvynenko V.V., Lonin Yu.F., Ponomarev A.G., Uvarov V.V., Uvarov V.T. The particularities of the high current relativistic electron beams influence on construction materials targets // *Problems of atomic Science and Technology. Ser. Nucl. Phys. Inv.* - 2013. – No. 6(88). - P. 225–229.

PACS: 66.30.-h, 05.40.Fb

## THE SOLUTION OF ONE CLASS OF EQUATIONS WITH FRACTIONAL SPATIAL DERIVATIVE

**L.V. Tanatarov, V.Yu. Gonchar, A.I. Kirdin**

*National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"  
1, Akademicheskaya Str., Kharkov 61108, Ukraine*

*E-mail: [kirdin@kipt.kharkov.ua](mailto:kirdin@kipt.kharkov.ua)*

*Received October 15, 2015*

The equations of particle motion were analytically solved using model Levy flight for the probability density of finding a particle in the given interval, the average particle residence time in this interval, and the particle probability to leave this interval by the given moment. The solution is presented in an arbitrary orthogonal system of functions. This representation provides additional opportunities for studies of systems with anomalous diffusion in a variety of practical applications.

**KEY WORDS:** anomalous diffusion, theoretical model, Levy flights, finite interval, the solution of equations, fractional spatial derivative, any orthogonal system of functions

### ПРО РОЗВ'ЯЗОК ОДНОГО КЛАСУ РІВНЯНЬ З ДРОБОВОЮ ПРОСТОРОВОЮ ПОХІДНОЮ

**Л.В. Танатаров, В.Ю. Гончар, А.І. Кірдін**

*Національний Науковий Центр «Харківський фізико-технічний інститут»  
вул. Академічна 1, м. Харків 61108, Україна*

У моделі польотів Леві аналітично розв'язано рівняння руху частинок для щільності ймовірності знаходження частинки в заданому інтервалі, середнього часу перебування частинки в ньому та ймовірності покинути інтервал до даного моменту. Рішення надано в довільній ортогональній системі функцій. Таке уявлення відкриває додаткові можливості для досліджень систем з аномальною дифузиею в різних практичних додатках.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** аномальна дифузія, теоретична модель, польоти Леві, кінцевий інтервал, розв'язок рівнянь, дробова просторова похідна, довільна ортогональна система функцій

### О РЕШЕНИЯХ ОДНОГО КЛАССА УРАВНЕНИЙ С ДРОБНОЙ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ПРОИЗВОДНОЙ

**Л.В. Танатаров, В.Ю. Гончар, А.И. Кирдин**

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»  
ул. Академическая 1, г. Харьков 61108, Украина*

В модели полетов Леви аналитически решены уравнения движения частиц для плотности вероятности нахождения частицы в заданном интервале, среднего времени пребывания частицы в нем и вероятности покинуть интервал к данному моменту. Решение представлено в произвольной ортогональной системе функций. Такое представление открывает дополнительные возможности для исследований систем с аномальной диффузией в различных практических приложениях.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** аномальная диффузия, теоретическая модель, полеты Леви, конечный интервал, решение уравнений, дробная пространственная производная, произвольная ортогональная система функций

Процесс случайного движения макроскопической частицы в среде (броуновского движения) давно является одной из центральных тем статистической физики. В связи с открытием в природе систем с аномальной диффузией и насущной потребностью создания теоретических моделей для описания такого рода систем, эта тема продолжает оставаться актуальной и в настоящее время. Одной из таких моделей является модель полетов Леви, в которой механизм аномальной диффузии реализуется под действием внешней случайной силы с устойчивым законом распределения Леви [1]. Экспериментальное детальное исследование процесса супердиффузии осуществить непросто, и удача случается нечасто. Как положительный пример отметим работу [2], в которой для анализа использована модель полетов Леви. Теория аномальной диффузии основана на обобщении уравнений диффузии путем замены обычных операторов дифференцирования соответствующими операторами дробного порядка [3,4]. Обычная схема построения уравнения диффузии следующая. Левая его часть содержит производную по времени от плотности или концентрации в бесконечно малом пространственном интервале рассматриваемого вещества, правая часть – расход вещества из этого объема (интервала), равный разности его градиентов плотности (концентрации) на обоих концах интервала. В случае обычной диффузии расход равен разнице плотности (концентрации). В более сложном случае расход пропорционален его доле, идущей на построение нового вещества или на другое взаимодействие, то есть, свертке с неким ядром, описывающим конкретный процесс взаимодействия с рассматриваемым веществом. Если для случая полубесконечной геометрии задача аномальной диффузии рассмотрена довольно подробно, то решение уравнения супердиффузии на конечном интервале с заданными граничными условиями методом разделения переменных является существенно более сложным, и, насколько нам известно, в общем виде такое решение пока не получено. Отметим, что в работе [5] приведено решение дробно-линейного уравнения одномерной супердиффузии на конечном интервале, но, по нашему мнению, оно не является математически корректным. Эти обстоятельства и послужили стимулом для данной работы.

Целью работы является получение точного решения одномерного уравнения Фоккера-Планка с дробной пространственной производной для полубесконечного и конечного интервала. Найденное точное решение дает возможность достоверно вычислять физические характеристики процесса аномальной диффузии, в частности, такие как плотность вероятности нахождения частицы в данном интервале, среднее время пребывания частицы в этом интервале и вероятность для частицы покинуть интервал к данному моменту времени.

### РЕШЕНИЕ НА ПОЛУБЕСКОНЕЧНОМ ИНТЕРВАЛЕ

Речь будет идти о решении уравнений типа

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^{\infty} K(x-x')P(x',t)dx'. \quad (1)$$

Это интегродифференциальное уравнение, в котором дифференциальный и интегральный операторы присутствуют не в виде линейной комбинации, а в виде произведения. Прежде всего, так как это дифференциальное уравнение первого порядка по времени, необходимо задать начальное условие для искомой функции распределения плотности вещества:

$$P(x,t)|_{t=0} = P_0(x),$$

где  $P_0(x)$  - функция, заданная на положительной полуоси  $x > 0$ . Решение уравнения (1) также ищем на этом интервале. Доопределим искомую функцию нулем при  $x < 0$ . Тогда можем записать:

$$\int_0^{\infty} K(x-x')P(x',t)dx' = \int_{-\infty}^{\infty} K(x-x')P(x',t)dx'.$$

Здесь  $K(x)$ , по предположению, четная функция своего аргумента. Поскольку правая часть этого равенства представляет собой свертку, ее можно представить в виде:

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(x-x')P(x',t)dx' = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{K}(k)\tilde{P}(k,t)e^{-ikx} dk,$$

тогда

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^{\infty} K(x-x')P(x',t)dx' = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} k^2 \tilde{K}(k)\tilde{P}(k,t)e^{-ikx} dk.$$

Подставляя в уравнение (1), запишем:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} k^2 \tilde{K}(k)\tilde{P}(k,t)e^{-ikx} dk = 0, \quad x > 0.$$

Проведем одностороннее преобразование Лапласа по времени:

$$sP(x,s) + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} k^2 \tilde{K}(k)\tilde{P}(k,s)e^{-ikx} dk = P_0(x).$$

Проведем обобщенное преобразование Фурье  $F^+$  от обеих частей равенства по переменной  $x$  [6]. В результате получаем:

$$s\tilde{P}(k,s) + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} e^{ikx} dx \int_{-\infty}^{\infty} k'^2 \tilde{K}(k')\tilde{P}(k',s)e^{-ik'x} dk' = \tilde{P}_0(k). \quad (2)$$

Функции  $\tilde{P}(k,s)$ ,  $\tilde{P}_0(k)$  голоморфны в верхней полуплоскости комплексного переменного  $k$ , следовательно, представимы в виде интегралов Коши:

$$\tilde{P}(k,s) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq\tilde{P}(q,s)}{q-k}, \quad \tilde{P}_0(k) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq\tilde{P}_0(q)}{q-k}, \quad \text{Im } k > 0. \quad (3)$$

Изменим порядок интегрирования в (2). Сначала проведем интегрирование по  $x$ :

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dx e^{i(k-k')x} = \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{k'-k}. \quad (4)$$

Соотношение (2), с учетом (3) и (4), можем переписать в виде

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{H(q) dq}{q-k} = 0, \quad \text{Im } k > 0, \quad (5)$$

где

$$H(k) \equiv [s + k^2 \tilde{K}(k)] \tilde{P}(k, s) - \tilde{P}_0(k). \quad (6)$$

Условие (5), необходимое и достаточное для того, чтобы функция  $H(k)$  была голоморфна в нижней полуплоскости  $\text{Im } k < 0$  [7]. Факторизуем множитель перед  $\tilde{P}(k, s)$  [8]:

$$s + k^2 \tilde{K}(k) = \frac{N^+}{N^-}.$$

Функция  $N^+$  голоморфна в верхней полуплоскости, а  $N^-$  - в нижней. Подставляя в (6), получаем:

$$N^-(k)H(k) = N^+(k)\tilde{P}(k, s) - \tilde{P}_0(k)N^-(k). \quad (7)$$

Представим произведение  $\tilde{P}_0(k)N^-(k)$  в виде разности предельных значений функций голоморфных в верхней и нижней полуплоскостях:  $\tilde{P}_0(k)N^-(k) = S^+ - S^-$ , где

$$S^+(k) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{P}_0(q)N^-(q) dq}{q-k}, \quad \text{Im } k > 0, \quad S^-(k) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{P}_0(q)N^-(q) dq}{q-k}, \quad \text{Im } k < 0.$$

Подставляя эту разность в  $\tilde{P}_0(k)N^-(k)$  в уравнение (7), получаем:

$$N^-(k)H(k) - S^-(k) = N^+(k)\tilde{P}(k, s) - S^+(k), \quad \text{Im } k = 0. \quad (8)$$

Левая и правая части равенства (8) продолжают единую аналитическую функцию  $Q(k)$  через действительную ось, так как слева стоит функция голоморфная в нижней, а справа – в верхней полуплоскостях, то есть,

$$N^+(k)\tilde{P}(k, s) - S^+(k) = Q(k). \quad (9)$$

Если функция  $s + k^2 \tilde{K}(k)$  имеет индекс, равный нулю на действительной оси, то функция  $Q(k)$ , которая в общем случае является полиномом, степень которого зависит от индекса, оказывается не зависящей от  $k$ . Подробнее об этом см. в [8]. Из (9) получаем:

$$\tilde{P}(k, s) = [S^+(k) + Q(k)] / N^+(k). \quad (10)$$

Для функций  $N^+, N^-$  получаем выражения:

$$N^+(k) = \exp\left[\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{q-k} \ln(s + q^2 \tilde{K}(q))\right], \quad \text{Im } k > 0, \quad \text{Im } k = +0,$$

$$N^-(k) = \exp\left[\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{q-k} \ln(s + q^2 \tilde{K}(q))\right], \quad \text{Im } k < 0, \quad \text{Im } k = -0.$$

Оригинал функции  $P(x, s)$  получаем по формуле:

$$P(x, s) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty+i\varepsilon}^{\infty+i\varepsilon} dk e^{-ikx} [S^+(k) + Q(k)] / N^+(k).$$

Если  $x < 0$ , то контур интегрирования можно замкнуть по дуге бесконечно большого радиуса в верхней полуплоскости, и интеграл будет равен нулю, поскольку функция  $N^+(k)$  голоморфна и не имеет нулей в этой полуплоскости, а функции  $S^+(k), Q(k)$  также голоморфны. Если  $x > 0$ , то контур можно замкнуть по дуге бесконечного радиуса в нижней полуплоскости, но мы не знаем аналитического продолжения подынтегральной функции в нижнюю полуплоскость. Остается одна возможность: устремить  $\varepsilon$  к нулю и воспользоваться формулами Сохоцкого [9] для предельных значений подынтегральных функций на действительной оси:

$$N^+(k) = \sqrt{s + k^2 \tilde{K}(k)} \exp\left(\frac{\Phi(k)}{2\pi i}\right), \quad N^-(k) = (\sqrt{s + k^2 \tilde{K}(k)})^{-1} \exp\left(\frac{\Phi(k)}{2\pi i}\right),$$

$$\begin{aligned} \Phi(k) &\equiv VP \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{q-k} \ln(s + q^2 \tilde{K}(q)), \\ S^+(k) &= \frac{1}{2} N^-(k) \tilde{P}_0(k) + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{q-k} \tilde{P}_0(q) N^-(q), \text{Im } k > 0, \text{Im } k = +0, \\ S^-(k) &= -\frac{1}{2} N^-(k) \tilde{P}_0(k) + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{q-k} \tilde{P}_0(q) N^-(q), \text{Im } k < 0, \text{Im } k = -0. \end{aligned} \tag{11}$$

Интегралы по действительной оси понимаются в смысле главного значения. В формулу (10) входит функция  $Q$ . Мы уже говорили, что от  $k$  она не зависит, то есть, это функция только  $s$ . Для ее определения необходимо выполнить условие, вытекающее из постановки задачи. Это может быть, например, условие обращения в нуль плотности  $P(x, t)$  при  $x = 0$  (условие «прилипания» частицы). Если индекс полинома  $\nu$  в функции  $Q$  отличен от нуля (см. в [8]), то произвольными функциями  $s$  являются коэффициенты полинома  $Q(k, s)$ , число которых равно  $\nu + 1$ .

Уравнение Фоккера-Планка, описывающее полеты Леви на всей оси, записывают в виде [10]:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{1}{\kappa} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{P(\xi, t) d\xi}{|x - \xi|^{\alpha-1}}, \quad \kappa \equiv -2\Gamma(2 - \alpha) \cos \frac{\alpha\pi}{2}, \quad 1 < \alpha < 2,$$

и решают с помощью преобразования Фурье. Решение это хорошо известно (см. [10]). Если полеты Леви происходят только на положительной полуоси, то нижний предел интегрирования логично заменить на нуль. Если решать это уравнение методом интегральных преобразований, то нужно доопределить функцию распределения при отрицательных значениях  $x$ . Естественно доопределить ее нулем. Если частица впрыскивается в точку  $x = x_0 > 0$  в начальный момент, то начальное условие:  $P(x, 0) = \delta(x - x_0)$ . В этом случае

$$\tilde{P}_0(k) = e^{ikx_0}, \quad s + k^2 \tilde{K}(k) = s + |k|^\alpha.$$

Нас интересует вероятность нахождения частицы на положительной полуоси в произвольный момент времени (вероятность выживания). Она равна

$$\int_0^{\infty} P(x, t) dx = \tilde{P}(k, t) \Big|_{k=0}.$$

Плотность вероятности того, что частица покинет положительную полуось в момент времени  $t$ :

$$p(t) = -\frac{d}{dt} \int_0^{\infty} P(x, t) dx = -\frac{\partial \tilde{P}(k, t)}{\partial t} \Big|_{k=0}.$$

Образ Лапласа (по времени) этой функции:

$$\tilde{p}(s) = -\int_0^{\infty} e^{-st} \frac{\partial \tilde{P}(k, t)}{\partial t} \Big|_{k=0} dt = \tilde{P}(k, t) \Big|_{k=0, t=0} - s \tilde{P}(k, s) \Big|_{k=0}.$$

Но  $\tilde{P}(k, t) \Big|_{k=0, t=0} = \int_0^{\infty} P(x, 0) dx = 1$ , то есть,  $\tilde{p}(s) = 1 - s \tilde{P}(k, s) \Big|_{k=0}$ .

С помощью (10), полагая  $Q = 0$ , получаем:

$$\tilde{P}(k, s) = \frac{\tilde{P}_0(k)}{2(s + |k|^\alpha)} + \frac{\exp(-\Phi(k)/(2\pi i)}{(s + |k|^\alpha)^{1/2}} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{q-k} \frac{\tilde{P}_0(q) \exp\left(\frac{\Phi(q)}{2\pi i}\right)}{(s + |q|^\alpha)^{1/2}},$$

откуда

$$\tilde{p}(s) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dq}{q\sqrt{1+q^\alpha}} \sin\left[\frac{1}{2\pi} \Phi(qs^{1/\alpha}) - qs^{1/\alpha}\right].$$

Совершим обратное преобразование, перейдя от  $s$  к  $t$ :

$$p(t) = \frac{1}{2\pi^2 i} \int_{-i\infty}^{i\infty} ds e^{st} \int_0^\infty \frac{dq}{q\sqrt{1+q^\alpha}} \sin\left[\frac{1}{2\pi} \Phi(qs^{1/\alpha}) - qx_0 s^{1/\alpha}\right].$$

Поскольку  $\Phi(0) = 0$ , внутренний интеграл сходится. Переходя к новой переменной интегрирования  $s/t$ , запишем:

$$p(t) = \frac{1}{2i\pi^2 t} \int_{-i\infty}^{i\infty} e^s ds \int_0^\infty \frac{dq}{q\sqrt{1+q^\alpha}} \sin\left[\frac{1}{2\pi} \Phi\left(q \frac{s^{1/\alpha}}{t^{1/\alpha}}\right) - qx_0 \frac{s^{1/\alpha}}{t^{1/\alpha}}\right],$$

$$\Phi\left(q \frac{s^{1/\alpha}}{t^{1/\alpha}}\right) = 2VP \int_0^\infty \frac{dq'}{q'^2 - 1} \ln\left(1 + q'^\alpha \frac{q^\alpha}{t}\right).$$

Пользуясь формулой для синуса разности, можно переписать эту формулу в виде:

$$p(t) = \frac{1}{2i\pi^2 t} \int_0^\infty \frac{dq}{q\sqrt{1+q^\alpha}} \sin\left[\frac{1}{\pi} VP \int_0^\infty \frac{dq'}{q'^2 - 1} \ln\left(1 + q'^\alpha \frac{q^\alpha}{t}\right)\right] \int_{-i\infty}^{i\infty} e^s ds \cos\left(qx_0 \frac{s^{1/\alpha}}{t^{1/\alpha}}\right) -$$

$$- \frac{1}{2i\pi^2 t} \int_0^\infty \frac{dq}{q\sqrt{1+q^\alpha}} \cos\left[\frac{1}{\pi} VP \int_0^\infty \frac{dq'}{q'^2 - 1} \ln\left(1 + q'^\alpha \frac{q^\alpha}{t}\right)\right] \int_{-i\infty}^{i\infty} e^s ds \sin\left(qx_0 \frac{s^{1/\alpha}}{t^{1/\alpha}}\right).$$

Первый интеграл при  $t \rightarrow \infty$  убывает не медленнее чем  $t^{-2}$ . Оценим последнее слагаемое. Во-первых, заменим косинус единицей. Будем сначала интегрировать по  $q$ , затем по  $s$ . Поскольку  $t \rightarrow \infty$ , в интеграле

$\int_0^\infty \frac{dq}{q\sqrt{1+q^\alpha}} \sin\left(qx_0 \frac{s^{1/\alpha}}{t^{1/\alpha}}\right)$  играют роль большие значения  $q$ . Но тогда можно под корнем пренебречь

единицей, по сравнению с  $q^\alpha$ , то есть, вычислять  $\int_0^\infty \frac{dq}{q^{1+\alpha/2}} \sin\left(qx_0 \frac{s^{1/\alpha}}{t^{1/\alpha}}\right)$ . В справочнике [11] приведен

интеграл:

$$\int_0^\infty x^{\mu-1} \sin ax dx = \frac{\Gamma(\mu)}{a^\mu} \sin \frac{\mu\pi}{2}.$$

Воспользовавшись этим, получаем

$$- \int_0^\infty \frac{dq}{q^{1+\alpha/2}} \sin\left(qx_0 \frac{s^{1/\alpha}}{t^{1/\alpha}}\right) = \Gamma(-\alpha/2) \sin \frac{\alpha\pi}{4} \cdot \frac{x_0^{\alpha/2} s^{1/2}}{t^{1/2}}.$$

То есть,

$$- \frac{1}{2\pi^2 it} \int_0^\infty \frac{dq}{q\sqrt{1+q^\alpha}} \int_{-i\infty}^{i\infty} e^s \left(qx_0 \frac{s^{1/\alpha}}{t^{1/\alpha}}\right) = \frac{\Gamma(-\alpha/2) \sin \frac{\alpha\pi}{4}}{2\pi^2 it^{3/2}} x_0^{\alpha/2} \int_{-i\infty}^{i\infty} e^s s^{1/2} ds.$$

Изогнем контур интегрирования на плоскости  $s$  влево вокруг начала координат:

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} e^s s^{1/2} ds = \frac{1}{2\pi i} \int_C e^s s^{1/2} ds = -\frac{1}{2\sqrt{\pi}}.$$

Таким образом, асимптотика функции  $p(t)$  такова:

$$p(t) = \frac{\Gamma(1-\alpha/2) \sin \frac{\alpha\pi}{4}}{\alpha\pi^{3/2} t^{3/2}} x_0^{\alpha/2}. \tag{12}$$

Отметим, что такая зависимость от времени согласуется с общим результатом, полученным в работе [12]. Отметим, что использовано частное решение, соответствующее  $Q = 0$ . Если не полагать  $Q(s) = 0$ , то все равно асимптотика  $p(t) \sim t^{-3/2}$ . Действительно, большим  $t$  соответствуют малые  $s$ . Если существует

$\lim Q(s) = Q(0)$  при  $s \rightarrow 0$ , то, как это следует из выражения для  $N^+$  и формулы (10), слагаемое в выражении для  $P(k, s)|_{k=0}$ , пропорциональное  $Q$ , оказывается пропорциональным  $\sqrt{s}$ , что соответствует  $t^{-3/2}$  в выражении для  $p(t)$ . Следующие члены разложения по  $s$  дают  $t^{-5/2}$  и т.д. Асимптотическая зависимость  $t^{-3/2}$ , по-видимому, справедлива для любого ядра  $K$ , для которого  $\lim k^2 K(k, s) = 0$  при  $k \rightarrow 0$ .

Если в качестве ядра интегрального уравнения использовать антисимметричную комбинацию  $K(x, x') = |x - x'|^{1-\alpha} - |x + x'|^{1-\alpha}$ , то условие  $P(x, t)|_{x=0} = 0$  выполняется автоматически. Однако, решать это уравнение методом Винера-Хопфа уже нельзя.

Если доопределить функцию распределения нечетным образом, т.е., положить  $P(-x, t) = -P(x, t)$ , то в уравнении (1) можно нижний предел интегрирования заменить на  $-\infty$ . При этом начальное условие также нужно сделать антисимметричным:

$$P(x, t)|_{t=0} = \delta(x - x_0) - \delta(x + x_0).$$

При этом  $P(x, t) = G(x, x_0; t) - G(x, -x_0; t)$ , где  $G$  - функция Грина для всей оси. Образ Лапласа-Фурье функции распределения в этом случае равен

$$\tilde{P}(k, s) = 2i \sin kx_0 \cdot \frac{1}{s + |k|^\alpha}.$$

Асимптотика функции  $p(t)$  при больших временах имеет вид:

$$p(t) \approx \frac{2}{\pi\alpha} \Gamma(1 + 1/\alpha) \frac{x_0}{t^{1+1/\alpha}}, \tag{13}$$

т.е., ее временной ход зависит от величины  $\alpha$ . Большого доверия заслуживает полученная выше асимптотика, пропорциональная  $t^{-3/2}$ .

### СЛУЧАЙ КОНЕЧНОГО ИНТЕРВАЛА

Изучение полетов Леви на конечном отрезке действительной оси приводит к необходимости решать уравнение для плотности вероятности  $P(x, t)$  вида

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} + v \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} = D \frac{\partial^\alpha P(x, t)}{\partial x^\alpha}, \quad \frac{\partial^\alpha P}{\partial x^\alpha} \equiv \frac{1}{\kappa} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^L \frac{P(\xi, t)}{|x - \xi|^{\alpha-1}}. \tag{14}$$

Скорость дрейфа  $v$  считаем постоянной. Пусть в начальный момент частица вводится в точке  $x = x_0$ , что приводит к начальному условию к уравнению (14):

$$P(x, 0) = \delta(x - x_0). \tag{15}$$

Показатель  $\alpha$  заключен в пределах интервала (1,2). Для однозначного решения дифференциальной задачи необходимо задать граничные условия на концах отрезка (0,1). Будем считать, что условием поглощения частицы на границах интервала являются условия:

$$P(0, t) = P(L, t) = 0. \tag{16}$$

Прежде всего, перейдем к безразмерным переменным, положив  $x' = x/L, t' = t/t_0$ . Характерное время  $t_0$  определим условием  $L^\alpha = Dt_0$ . В безразмерных переменных уравнение (14) приобретает вид:

$$\frac{\partial P}{\partial t'} + F \frac{\partial P}{\partial x'} - \frac{\partial^\alpha P}{\partial x'^\alpha} = 0, \quad F \equiv \frac{vL^{\alpha-1}}{D}. \tag{17}$$

В дальнейшем штрихи мы будем опускать. Условие (15) сохраняет свой вид, а условие (16) записывается в виде:

$$P(0, t) = P(1, t) = 0. \tag{18}$$

Уравнение (14) выполняется только на интервале (0,1), но мы будем считать его справедливым на всей числовой оси.

Выразим среднее время  $T$  пребывания блуждающей частицы в интервале (0,1) в терминах плотности вероятности. Разобьем интервал времени  $(0 < t < \infty)$  на промежутки длиной  $\Delta t$ , тогда

$$T_{\Delta t} = \sum_i t_i \left[ \int_0^1 P(x, t_i) dx - \int_0^1 P(x, t_i + \Delta t) dx \right].$$

При  $\Delta t \rightarrow 0$  эта сумма переходит в выражение:

$$T = - \int_0^{\infty} t dt \int_0^1 \frac{\partial P(x, t) dx}{\partial t}. \tag{19}$$

Введем величину  $p(t)$  - вероятность частице покинуть интервал (0,1) к моменту  $t$ . Очевидно, что

$$p(t) = - \int_0^1 \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} dx, \tag{20}$$

или

$$T = \int_0^{\infty} dt tp(t). \tag{21}$$

Проведя преобразование Фурье над обеими частями уравнения (25), получим:

$$\frac{\partial \tilde{P}(q, t)}{\partial t} - iqF\tilde{P}(q, t) - \frac{1}{\kappa} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{iqx} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^1 \frac{P(\xi, t) d\xi}{|\xi - x|^{\alpha-1}} = 0. \tag{22}$$

$$\int_0^1 \frac{P(\xi, t) d\xi}{|\xi - x|^{\alpha-1}} = \begin{cases} \int_0^1 \frac{P(\xi, t) d\xi}{(\xi - x)^{\alpha-1}}, & x < 0 \\ \int_0^x \frac{P(\xi, t) d\xi}{(x - \xi)^{\alpha-1}} + \int_x^1 \frac{P(\xi, t) d\xi}{(\xi - x)^{\alpha-1}}, & 0 < x < 1 \\ \int_0^1 \frac{P(\xi, t) d\xi}{(x - \xi)^{\alpha-1}}, & 1 < x < \infty. \end{cases} \tag{23}$$

С учетом (23) выражение

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{iqx} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^1 \frac{P(\xi, t) d\xi}{|\xi - x|^{\alpha-1}}$$

приобретает вид:

$$A(t) + B(t)e^{iq} - |q|^{\alpha} \tilde{P}(q, t).$$

Подставляя его в (22), получаем уравнение для  $\tilde{P}(q, t)$ :

$$\frac{\partial \tilde{P}(q, t)}{\partial t} - iqF\tilde{P}(q, t) + |q|^{\alpha} \tilde{P}(q, t) = A(t) + e^{iq} B(t), \tag{24}$$

с начальным условием

$$\tilde{P}(q, 0) = e^{ix_0 q}. \tag{25}$$

$A(t), B(t)$  выражаются через  $P(x, t)$  следующим образом:

$$\begin{aligned} \kappa A(t) &\equiv \frac{\partial}{\partial x} \int_0^1 \frac{P(\xi, t) d\xi}{(\xi - x)^{\alpha-1}} \Big|_{x=-0} - \frac{\partial}{\partial x} \int_0^1 \frac{P(\xi, t) d\xi}{|\xi - x|^{\alpha-1}} \Big|_{x=+0}; \\ \kappa B(t) &= \frac{\partial}{\partial x} \int_0^1 \frac{P(\xi, t) d\xi}{|x - \xi|^{\alpha-1}} \Big|_{x=1-0} - \frac{\partial}{\partial x} \int_0^1 \frac{P(\xi, t) d\xi}{(x - \xi)^{\alpha-1}} \Big|_{x=1+0}. \end{aligned} \tag{26}$$

Проводя преобразование Лапласа над уравнением (24) и используя (25), получаем для образа Фурье-Лапласа выражение:

$$\tilde{P}(q, s) = \frac{e^{iqx_0} + A(s) + e^{iq} B(s)}{s + |q|^{\alpha} - iqF}. \tag{27}$$

Граничные условия (16), преобразованные по Лапласу, принимают вид:

$$P(x, s)|_{x=0} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(q, s) dq = P(x, s)|_{x=1} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iq} \tilde{P}(q, s) dq = 0. \tag{28}$$

Воспользуемся ими для определения неизвестных функций  $A(s), B(s)$ . Получаем систему уравнений для этих величин:

$$\begin{aligned} A(s)\psi(s, 0) + B(s)\psi(s, 1) &= -\psi(s, x_0), \\ A(s)\psi(s, -1) + B(s)\psi(s, 0) &= -\psi(s, -1 + x_0), \end{aligned} \tag{29}$$

где

$$\psi(s, x) \equiv 2 \int_0^{\infty} \frac{dq [(s + q^\alpha) \cos qx - qF \sin qx]}{(s + q^\alpha)^2 + F^2 q^2}. \tag{30}$$

Определяя  $A(s), B(s)$  из (29), получаем:

$$\begin{aligned} A(s) + e^{iq} B(s) &= [\psi^2(s, 0) - \psi(s, 1)\psi(s, -1)]^{-1} [\psi(s, 1)\psi(s, -1 + x_0) - \\ &- \psi(s, 0)\psi(s, x_0) + e^{iq} (\psi(s, -1)\psi(s, x_0) - \psi(s, 0)\psi(s, -1 + x_0))]. \end{aligned} \tag{31}$$

Можно показать, что  $1 + A(0) + B(0) = 0$ . Это следует из соотношения для малых значений  $s$ :

$$\begin{aligned} e^{iqx_0} + A(s) + e^{iq} B(s) &= e^{iqx_0} - \frac{1}{2}(1 + e^{iq}) + \frac{1 - e^{iq}}{2} [x_0^{\alpha-1} - (1 - x_0)^{\alpha-1}] + \\ &+ \frac{\alpha \sin \pi / \alpha}{8\pi} s^{1-1/\alpha} [(3 - e^{iq})(1 - x_0)^{\alpha-1} + (1 + e^{iq})(1 + x_0^{\alpha-1})], \end{aligned} \tag{32}$$

если положить в нем  $s = 0, q = 0, F = 0$ .

Образ Лапласа функции  $p(t)$  продифференцируем по  $s$  и получим:

$$-\frac{dp(s)}{ds} \Big|_{s=0} = \int_0^{\infty} tp(t) dt = T.$$

Найдем  $p(s)$  с помощью (35).

$$p(t) = \frac{1}{2\pi i} \cdot \frac{i}{2\pi} \int_{-i\infty}^{i\infty} se^{st} ds \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{q} (1 - e^{-iq}) \frac{e^{iqx_0} + A(s) + B(s)e^{iq}}{s + |q|^\alpha - iqF}.$$

Отсюда видно, что

$$\begin{aligned} p(s) &= -\frac{s}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{q} (1 - e^{-iq}) \frac{e^{iqx_0} + A(s) + B(s)e^{iq}}{s + |q|^\alpha - iqF}, \\ -\frac{dp(s)}{ds} \Big|_{s=0} &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{q} (1 - e^{-iq}) \frac{e^{iqx_0} + A + Be^{iq}}{|q|^\alpha - iqF}. \end{aligned}$$

Здесь  $A(0) \equiv A, B(0) \equiv B$ . Положив  $F = 0$ , можем записать:

$$\frac{1 - e^{-iq}}{2i} = e^{-i\frac{q}{2}} \sin q / 2, \quad A + Be^{iq} = -1 + 2iBe^{iq/2} \sin q / 2.$$

Действительно,

$$1 + A + Be^{iq} = 1 + A + B + B(e^{iq} - 1), \quad e^{iq} - 1 = 2ie^{iq/2} \sin q / 2.$$

Далее

$$\frac{e^{iqx_0} + A + Be^{iq}}{2i} = e^{iqx_0/2} \sin qx_0 / 2.$$

В итоге получаем:

$$T = \frac{4}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dq}{q^{1+\alpha}} \sin \frac{q}{2} \cdot \sin \frac{qx_0}{2} \cdot \sin \frac{q(1-x_0)}{2},$$

или, после интегрирования:

$$T = \frac{1}{2\alpha\Gamma(\alpha)\sin\frac{\pi}{2}(\alpha-1)} [1 - x_0^\alpha - (1-x_0)^\alpha].$$

Для вероятности пребывания частицы на отрезке (0,1) до момента  $t$   $W(t) = \int_0^1 P(x,t)dx$  получаем:

$$W(t) = -\frac{1}{4\pi^2} \int_{-i\infty}^{i\infty} ds e^{st} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq(1-e^{-iq})}{q} \tilde{P}(q,s),$$

где  $\tilde{P}(q,s)$  определено формулой (27). Для больших времен  $P(q,s)$  определяется с помощью формулы (32). По определению,

$$p(t) = -\frac{dW}{dt} = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-i\infty}^{i\infty} se^{st} ds \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq(1-e^{-iq})}{q} \frac{e^{iqx_0} + A(s) + B(s)e^{iq}}{s + |q|^\alpha - iqF}. \quad (33)$$

Положим  $F = 0$ . Как уже говорилось, большим временам соответствуют малые  $s$ , поэтому воспользуемся (32) и представим подынтегральное выражение в (33) следующим образом:

$$\begin{aligned} & \frac{s}{s+Q} [F_1(q) + s^{1-\frac{1}{\alpha}} F_2(q)], \quad Q \equiv |q|^\alpha, \\ F_1(q) &= \frac{1-e^{-iq}}{q} \left\{ e^{iqx_0} - \frac{1+e^{iq}}{2} + \frac{1-e^{iq}}{2} [x_0^{\alpha-1} - (1-x_0)^{\alpha-1}] \right\}, \\ F_2(q) &= \frac{\alpha \sin \pi / \alpha}{8\pi} [(3-e^{iq})(1-x_0)^{\alpha-1} + (1+e^{iq})(1+x_0^{\alpha-1})]. \end{aligned}$$

Проведем сначала интегрирование по  $s$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} e^{st} \frac{s ds}{s+Q} [F_1(q) + s^{1-\frac{1}{\alpha}} F_2(q)] &= e^{-Qt} \{ F_2(q)(-Q)^{2-\frac{1}{\alpha}} - QF_1(q) \} + \\ &+ \frac{1}{2\pi i} \frac{F_2(q)}{Qt^{3-1/\alpha}} \int_{-i\infty}^{i\infty} ds s^{2-1/\alpha} e^s. \end{aligned}$$

При  $q \rightarrow 0$   $F_2 \rightarrow const$ ,  $F_1 \sim q$ . Оценим первые два слагаемых.

$$\int_0^\infty e^{-Qt} Q^{2-\frac{1}{\alpha}} dq = \frac{1}{t^2} \int_0^\infty e^{-Q} Q dQ, \quad \int_0^\infty e^{-Qt} q Q dQ = \frac{1}{t^{2/\alpha+1}} \int_0^\infty e^{-Q} Q^{2/\alpha} dQ.$$

Как видим, нужно сравнивать быстроту убывания функций  $t^{-(3-1/\alpha)}$ ,  $t^{-(3-1/\alpha)}$  и  $t^{-2}$ . Поскольку  $t^{-2} > t^{-(1+2/\alpha)}$ ,  $1 < \alpha < 2$ , медленнее всех убывает  $t^{-2}$ . Это и есть искомая асимптотика.

Вернемся к формуле (26). Уже из уравнения (14) следует, что правые части (26) представляют собой скачки плотности диффузионного потока в точках  $x = 0$ ,  $x = 1$ . Покажем, что эти скачки (и сами плотности) конечны только при условиях (16) или (17). Проведя преобразование Лапласа по времени над обеими частями равенств (26), получим:

$$\begin{aligned} \kappa A(s) &= \frac{\partial}{\partial x} \int_0^1 \frac{\tilde{P}(\xi,s)d\xi}{(\xi-x)^{\alpha-1}} \Big|_{x=0} - \frac{\partial}{\partial x} \int_0^1 \frac{\tilde{P}(\xi,s)d\xi}{|\xi-x|^{\alpha-1}} \Big|_{x=+0}, \\ \kappa B(s) &= \frac{\partial}{\partial x} \int_0^1 \frac{\tilde{P}(\xi,s)d\xi}{|x-\xi|^{\alpha-1}} \Big|_{x=1-0} - \frac{\partial}{\partial x} \int_0^1 \frac{\tilde{P}(\xi,s)d\xi}{(x-\xi)^{\alpha-1}} \Big|_{x=1+0}. \end{aligned} \quad (34)$$

Рассмотрим слагаемые в правой части первой строки. Воспользуемся Фурье представлением функции  $\tilde{P}(\xi,s) = \frac{1}{2\pi} \int \tilde{P}(q,s) e^{-iq\xi} dq$ :

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial x} \int_0^1 \frac{\tilde{P}(\xi, s) d\xi}{(\xi - x)^{\alpha-1}} \right|_{x < 0} &= \frac{1}{2\pi} \int dq \tilde{P}(q, s) \frac{\partial}{\partial x} \left( e^{-iqx} \int_{-x}^{1-x} \frac{d\eta}{\eta^{\alpha-1}} e^{-iq\eta} \right) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dq \tilde{P}(q, s) \left\{ -iqe^{-iqx} \int_{-x}^{1-x} \frac{d\eta}{\eta^{\alpha-1}} e^{-iq\eta} + \frac{1}{(-x)^{\alpha-1}} - \frac{e^{-iq}}{(1-x)^{\alpha-1}} \right\}. \\ \left. \frac{\partial}{\partial x} \int_0^1 \frac{\tilde{P}(\xi, s) d\xi}{|\xi - x|^{\alpha-1}} \right|_{x > 0} &= \frac{1}{2\pi} \int \tilde{P}(q, s) dq \left\{ -iqe^{-iqx} \left( \int_0^x \frac{d\eta e^{iq\eta}}{\eta^{\alpha-1}} + \int_0^{1-x} \frac{d\eta e^{-iq\eta}}{\eta^{\alpha-1}} \right) + \frac{1}{x^{\alpha-1}} - e^{-iq} \right\}, \\ \left. \frac{\partial}{\partial x} \int_0^1 \frac{\tilde{P}(\xi, s) d\xi}{(\xi - x)^{\alpha-1}} \right|_{x=0} - \left. \frac{\partial}{\partial x} \int_0^1 \frac{\tilde{P}(\xi, s) d\xi}{|\xi - x|^{\alpha-1}} \right|_{x=+0} &= \frac{1}{2\pi} \int dq \tilde{P}(q, s) \left\{ \frac{1}{|x|^{\alpha-1}} - \frac{1}{x'^{\alpha-1}} \right\}, \quad x, x' \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Здесь  $x, x'$  стремятся к нулю независимо друг от друга. Для того, чтобы  $A(s)$  оставалось конечным необходимо, чтобы выполнялось условие  $\int \tilde{P}(q, s) dq = 0$ , или, что то же, при  $P(x, t)|_{x=0} = 0$ . Аналогичным образом доказываем, что  $B(s)$  конечно только при условии  $P(x, t)|_{x=1} = 0$ , или, что то же, при  $\int \tilde{P}(q, s) e^{iq} dq = 0$ .

Формула для времени пребывания частицы на интервале (0,1) получена при условии  $F = 0$ . Если это условие не выполнено, то не удастся получить столь прозрачную зависимость для этой величины. В предельном случае ( $F \gg 1$ ) для  $T$  получаем:

$$T \approx \frac{1 - x_0}{F}.$$

Объяснение такой зависимости следующее. При  $F \gg 1$  диффузионное слагаемое, содержащее дробную производную, не играет существенной роли, и его, в нулевом приближении, можно опустить: «работают» только первые производные. Тогда получаем волновое уравнение первого порядка, решением которого является волна, бегущая вправо со скоростью  $F$ . Граничное условие  $P(x, t)|_{x=1} = 0$  обеспечивает «прилипание» частицы к правой границе, где она «погибает». Время существования ее равно длине пути, равной  $1 - x_0$ , деленной на скорость  $F$ . Диффузионное слагаемое просто «размывает» бегущую волну.

Приведенное рассуждение, конечно, нельзя считать математически строгим. Вообще говоря, неясно, существует ли точное решение задачи Дирихле для рассматриваемого уравнения на интервале (-1,1) при  $F \neq 0$ . Чтобы выяснить это, попытаемся еще раз решить нашу задачу методом разделения переменных.

Запишем нашу задачу в форме:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{L}f - F \frac{\partial f}{\partial x}, \quad f(x, t)|_{x=\pm 1} = 0, \quad f(x, t)|_{t=0} = f(x), \\ \tilde{L}f \equiv \int_{-1}^1 K(|x - x'|) f(x', t) dx'. \end{aligned} \tag{35}$$

Функцию  $f(x)$  считаем известной. Ищем решение в виде суперпозиции:

$$f(x, t) = \sum_n f_n(t) \varphi_n(x), \tag{36}$$

где  $\varphi_n(x)$  - полная система функций на интервале (-2,+2). Подставляя в уравнение (43), получаем для каждого  $n$ :

$$\frac{f'_n(t)}{f_n(t)} = \frac{1}{\varphi_n(x)} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{L}\varphi_n(x) - F \frac{\partial \varphi_n(x)}{\partial x} \right] = -\mu_n. \tag{37}$$

Из уравнения (37) следует, что  $f_n(t) = f_n(0) \exp(-\mu_n t)$ . Здесь  $f_n(0)$  - коэффициенты разложения функции  $f(x)$  по полной системе  $\varphi_n(x)$ . Для  $\varphi_n(x)$  выполняется уравнение:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{L}\varphi_n(x) - F \frac{\partial}{\partial x} \varphi_n(x) + \mu_n \varphi_n(x) = 0. \quad (38)$$

Представим  $\varphi_n(x)$  в виде суммы четной и нечетной части:  $\varphi_n(x) = \xi_n(x) + \eta_n(x)$ . В этом качестве могут быть взяты  $f_n^{(2)} \cos \lambda_n x$  и  $f_n^{(1)} \sin \lambda_n x$ , где  $\lambda_n = n\pi/2$ . Поскольку ядро интегрального оператора есть четная функция, оно раскладывается по  $\cos \lambda_n x$ :

$$K(|x|) = \sum_m b_m \cos \lambda_m x, \quad b_m = \int_0^2 \frac{dx}{x^{\alpha-1}} \cos \lambda_m x. \quad (39)$$

Последний интеграл может быть выражен через вырожденную гипергеометрическую функцию:

$$b_m = \frac{2^{2-\alpha}}{2-\alpha} \operatorname{Re}\{F_1(2-\alpha, 3-\alpha; 2i\lambda_m)\}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \tilde{L}\varphi_n(x) &= \sum_m b_m \int_{-1}^1 \cos \lambda_m (x-x') [\xi_n(x') + \eta_n(x')] dx' = \\ &= \sum_m b_m \left\{ \cos \lambda_m x \cdot \int_{-1}^1 \cos \lambda_m x' \cdot \xi_n(x') dx' + \sin \lambda_m x \cdot \int_{-1}^1 \sin \lambda_m x' \cdot \eta_n(x') dx' \right\}. \end{aligned}$$

Подставляя в уравнение (38), получаем два уравнения: равенства нулю коэффициентов при  $\cos \lambda_m x$  и  $\sin \lambda_m x$  для каждого  $m$ :

$$\begin{aligned} f_m^{(2)} (\mu_m - \lambda_m^2 b_m) - F \lambda_m f_m^{(1)} &= 0 \\ F \lambda_m f_m^{(2)} + (\mu_m - \lambda_m^2 b_m) f_m^{(1)} &= 0. \end{aligned} \quad (40)$$

Для нетривиальности решения необходимо равенство нулю определителя:

$$(\mu_m - \lambda_m^2 b_m)^2 + (F \lambda_m)^2 = 0. \quad (41)$$

Из этого уравнения находим  $\mu_m$ . Для того, чтобы оно было действительным, необходимо чтобы  $F$  равнялось нулю. Тогда  $\mu_m = \lambda_m^2 b_m$ ,  $f_m(t) = f_m(0) \exp(-\lambda_m^2 b_m t)$  и решение, соответствующее индексу  $m$ :

$$\chi_m(x, t) \equiv f_m(t) \varphi_m(x) = \exp(-\lambda_m^2 b_m t) [f_m^{(2)} \cos \lambda_m x + f_m^{(1)} \sin \lambda_m x] \quad (42)$$

$$f_m^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-2}^2 f(x) \cos \lambda_m x dx, \quad f_m^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-2}^2 f(x) \sin \lambda_m x dx. \quad (43)$$

При четном  $m$  обращается в нуль  $\sin \lambda_m x$ , а при нечетном -  $\cos \lambda_m x$  при  $x = \pm 1$ . Пусть начальное распределение  $f(x) = \delta(x - x_0)$ , тогда  $f_m^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \lambda_m x_0$ ,  $f_m^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \lambda_m x_0$ , и решение

$$f(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\lambda_n^2 b_n t) \cos \lambda_n (x - x_0). \quad (44)$$

По сути, это функция Грина неоднородного уравнения

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{L}f = g(x, t),$$

если в ней заменить  $t$  на  $t - t'$ , а  $x_0$  на  $x'$ .

$$\text{Если } F \neq 0, \quad \mu_n = \lambda_n^2 b_n \pm iF\lambda_n \text{ и } \exp(-\mu_n t) = \exp(-\lambda_n^2 b_n t) \cdot [\cos \lambda_n Ft + \sin \lambda_n Ft].$$

Оставляем вещественную часть. Она периодически во времени меняет свой знак и непригодна для плотности вероятности. Итак, пусть  $F = 0$ .

До сих пор мы нигде не использовали граничные условия  $f(x, t)|_{x=\pm 1} = 0$ . В частности, оно должно выполняться и при  $t = 0$ , т.е., для  $f(x)$

$$\begin{aligned} \sum_n [f_n^{(2)} \cos \lambda_n + f_n^{(1)} \sin \lambda_n] &= 0, \\ \sum_n [f_n^{(2)} \cos \lambda_n - f_n^{(1)} \sin \lambda_n] &= 0, \end{aligned} \tag{45}$$

или  $\sum_n f_n^{(2)} \cos \lambda_n = 0$ ,  $\sum_n f_n^{(1)} \sin \lambda_n = 0$ , но из (45) не следует выполнение граничных условий при  $t \neq 0$ , поэтому потребуем их выполнения при каждом  $n$ : при четном его значении должно быть  $f_n^{(2)} = 0$ , при нечетном  $f_n^{(1)} = 0$ . Поэтому можно записать решение так:

$$\begin{aligned} f(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \exp[-(n+1/2)^2 \pi^2 b_{n+1/2} t] f_{2m+1}^{(2)} \cos(n+1/2)\pi x + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-n^2 \pi^2 b_{2n} t) f_{2n}^{(1)} \sin n\pi x \end{aligned} \tag{46}$$

Если начальная функция распределения  $f(x) = \delta(x - x_0)$ , то

$$\begin{aligned} f(x, t) &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \exp[-(n+1/2)^2 \pi^2 b_{2n+1} t] \cos(n+1/2)\pi x \cdot \cos(n+1/2)\pi x_0 + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-n^2 \pi^2 b_{2n} t) \sin n\pi x \cdot \sin n\pi x_0. \end{aligned} \tag{47}$$

Теперь о единственности решения (46) на интервале (-1,1). Казалось бы, что формула (46) и определяет решение, но дело в том, что коэффициенты  $f_m^{(1)}$ ,  $f_m^{(2)}$  определяются через функцию  $f(x)$ , известную лишь на интервале (-1,1) по формулам (45). На интервалах (-2,-1) и (1,2) ее нужно доопределить. Естественно доопределить ее нулем, что мы и сделаем. Если доопределить ее не нулем, то  $f(x)$  можно представить в виде  $f(x) + f_1(x)$ , где  $f_1(x) = 0$  при  $x \in (-1,1)$ , а  $f(x) = 0$  при  $x \in (-2,-1)$ ,  $x \in (1,2)$ .

Тогда решение будет равно выражению (46) при  $x \in (-1,1)$  и  $f_1(x)$  при  $x \in (-2,-1)$ ,  $x \in (1,2)$ , поскольку свертка с нулем дает нуль, а производная от  $f_1$  по времени, в силу уравнения (43), равна нулю, поскольку  $\tilde{L}f_1 = 0$ . Поэтому решение (46) не зависит от способа доопределения функции  $f(x)$ . Коэффициенты  $f_{2n+1}^{(2)}$ ,  $f_{2n}^{(1)}$  определяются интегралами в пределах от -1 до +1.

Если начальная функция  $f(x) = \delta(x - x')$ , то

$$\begin{aligned} f(x, t) &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \exp[-(n+1/2)^2 \pi^2 b_{2n+1} t] \cos(n+1/2)\pi x \cdot \cos(n+1/2)\pi x_0 + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-n^2 \pi^2 b_{2n} t) \sin n\pi x \cdot \sin n\pi x_0. \end{aligned} \tag{48}$$

Если заменить в этой формуле  $t$  на  $t - t'$ , а  $x_0$  на  $x'$ , то получим функцию Грина неоднородного уравнения, соответствующего задаче Дирихле. Можно ее назвать «проекцией» функции Грина на пространство функций, удовлетворяющих данным краевым условиям.

Пользуясь формулой (48) и выражением для времени  $T$  пребывания частицы в интервале (-1,1), можем записать:

$$T \equiv \int_0^{\infty} p(t) t dt = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\cos \pi(n+1/2)x_0}{b_{2n+1} \pi^3 (n+1/2)^3}.$$

Если ограничиться первым членом ряда, то

$$T = \frac{2^{1+\alpha} \cdot (2 - \alpha)}{\pi^3 \left( 1 - \frac{\pi^2}{2!} \frac{2 - \alpha}{4 - \alpha} + \dots \right)} \cos \frac{\pi x_0}{2}.$$

Воспользовавшись формулой (48) для функции Грина можно получить выражение для плотности

вероятности  $p(x, \tau; x_0)$  первого прохождения точки  $x$  в момент  $\tau$  частицей, выпрыснутой в точке  $x_0$  в момент  $\tau = 0$ . Если  $G(x, t; x_0)$  - функция Грина в точке  $x$  в момент  $t$ ,  $x_0$  - точка выпрыска в момент  $t = 0$ , то

$$G(x, t; x_0) = \int_0^t d\tau p(x, \tau; x_0) \cdot G(x, t - \tau; x).$$

Справа стоит свертка. Делая преобразование Лапласа по  $t$ , получаем:

$$G(x, s; x_0) = p(x, s; x_0) \cdot G(x, s; x).$$

Определяя  $p(x, s; x_0)$  и совершая обратное преобразование по  $s$ , получаем:

$$p(x, \tau; x_0) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} ds e^{s\tau} \cdot \frac{G(x, s; x_0)}{G(x, s; x)} = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \operatorname{Re} \left\{ e^{ist} \cdot \frac{G(x, is; x_0)}{G(x, is; x)} \right\} ds,$$

$$\operatorname{Re} \left\{ e^{ist} \cdot \frac{G(x, is; x_0)}{G(x, is; x)} \right\} = \cos s\tau \cdot \operatorname{Re} \frac{G(x, is; x_0)}{G(x, is; x)} - \sin s\tau \cdot \operatorname{Im} \frac{G(x, is; x_0)}{G(x, is; x)}.$$

$$G(x, is; x_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\cos \pi \left( n + \frac{1}{2} \right) x \cdot \cos \pi \left( n + \frac{1}{2} \right) x_0}{\pi^2 \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 b_{2n+1} + is} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin \pi n x \cdot \sin \pi n x_0}{\pi^2 n^2 b_{2n} + is}.$$

Возвращаясь к случаю  $F \neq 0$ , следовало бы уточнить утверждение о том, что решение задачи Дирихле в этом случае не существует, фразой: решение не существует при всех  $t$ . При достаточно больших временах решение определяется первым слагаемым ряда по косинусам. Оно пропорционально  $\cos \frac{1}{2} \pi Ft$ , поэтому, когда  $Ft$  становится порядка единицы, оно становится отрицательным. При достаточно больших  $F$  это времена порядка  $1/F$ . Достаточно большие  $F$ , это такие, при которых можно ограничиться членом  $F \frac{\partial f}{\partial x}$  в уравнении для  $f$ . Обратное преобразованию Лапласа имеет вид:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} \exp(xs) \cdot \varphi(s) ds.$$

Пусть  $\varphi(x)$  имеет предел при  $s \rightarrow 0$ , тогда

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i x} \int_{-i\infty}^{i\infty} ds e^s \cdot \varphi\left(\frac{s}{x}\right),$$

$$\left| \int_{i\infty}^{i\infty} ds e^s \cdot \varphi\left(\frac{s}{x}\right) \right| = |\varphi(0) \cdot 2 \sin Nx|,$$

Поэтому можно утверждать, что  $f(x)$  убывает быстрее чем  $\frac{1}{x}$  при  $x \rightarrow \infty$ . Следуя этому, можем сказать, что

$p(x, \tau; x_0)$  убывает с ростом  $\tau$  не медленней чем  $\frac{1}{\tau}$ .

Для нахождения предела  $\varphi(0)$  необходимо просуммировать ряд для  $G(x, is; x_0)$  при  $s = 0$ . Можно для этого воспользоваться формулой Абеля-Плана, позволяющей выразить сумму ряда  $\sum_{n=1}^{\infty} f(n)$  через контурный интеграл от функции  $f(z)$  в комплексной плоскости [13]. После громоздких выкладок убеждаемся в том, что этот предел отличен от нуля.

Если все же  $F \neq 0$ , но мало, то можно воспользоваться теорией возмущений, переписав уравнение (35) в виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{L}f = F \frac{\partial f_0}{\partial x}, \quad (49)$$

где  $f_0$  - функция Грина уравнения

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} \right) f_0 = 0.$$

Величину скорости дрейфа  $F$  считаем постоянной. Если  $F$  велико, то в уравнении для  $f$  можно оставить только дрейфовый член, при этом начальное распределение просто переносится со скоростью  $F$ . Достаточно большие  $F$  - это такие, при которых можно ограничиться членом с первой производной по координате в уравнении для искомой функции. При этом уравнение (17) превращается в волновое уравнение первого порядка, решения которого исследованы в книге [14].

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как уже установлено, процесс одномерной аномальной диффузии для случая полубесконечного пространства удается успешно описать дробно-линейным уравнением. Отметим, однако, что до настоящего времени пока не существует строгого доказательства, что такое описание является справедливым и для случая конечного интервала с заданными граничными условиями. В настоящей работе в предположении, что полеты Леви на конечном интервале, адекватно описываются дробно-линейным уравнением супердиффузии, удалось получить его аналитическое решение. Найденное решение позволяет вычислить ряд физических характеристик процесса аномальной диффузии, в частности, следующие: плотность вероятности нахождения частицы в данном интервале, среднее время пребывания частицы в этом интервале и вероятность для частицы покинуть интервал к данному моменту времени. Следует отметить, что решение уравнения супердиффузии на конечном интервале является очень непростой задачей, корректное решение которой до настоящего времени получить не удавалось. Наш поиск решения уравнения аномальной диффузии на конечном интервале в системе собственных функций операторов не привел к результату, поэтому в настоящей работе реализован иной подход. Решение уравнения удалось получить в терминах произвольной ортогональной системы функций. Такое представление решения, возможно, является удачным, так как открывает дополнительные возможности для исследований систем с аномальной диффузией в различных практических приложениях.

Авторы выражают благодарность А.В. Чечкину за полезное обсуждение статьи.

### REFERENCES

1. Metzler R., Chechkin A.V., Klafter J. Levy Statistics and Anomalous Transport: Levy Flights and Subdiffusion. In: Encyclopedia of Complexity and System Science, edited by R. Mayers. Springer Science + Business Media, LLC, New York, 2009. - P. 1724-1745.
2. Mohammed A.M.S., Koh Y.R., Vermeersch B., Lu H., Burke P.G., Gossard A.C., and Shakouri A. Fractal Lévy Heat Transport in Nanoparticle Embedded Semiconductor Alloys // Nano Lett. – 2015. - Vol. 15. – No 7. – P. 4269–4273.
3. Chechkin A., Metzler R., Klafter J., Gonchar V. Introduction to the Theory of Levy Flights. In: R. Klages, G. Radons, I.M. Sokolov (Eds), Anomalous Transport: Foundations and Applications, Wiley-VCH, Weinheim, 2008. - P. 129 - 162.
4. Zolotarev V.M., Uchajkin V.V., Saenko V.V. Superdiffuzija i ustojchivje zakony // ZhETF. – 1999. - Tom. 115. - Vyp. 4. - S. 1411-1425. (in Russian)
5. Gitterman M. Mean first passage time for anomalous diffusion // Phys. Rev. E. – 2000. - Vol. 62. - P. 6065-6070.
6. Titchmarsh E.Ch. Vvedenie v teoriju integralov Fur'e. Moskva-Leningrad: OGIZ, 1948. – 418 s. (in Russian)
7. Smirnov V.I. Kurs vysshej matematiki. Tom 4. Moskva-Leningrad: GITTL, 1951. – 804 s. (in Russian)
8. Gakhov F.D. Kraevye zadachi. Moskva: Gos. izd. fiz.-mat. lit., 1958. – 545 s. (in Russian)
9. Sokhotskiy Yu.V. Ob opredelennykh integralakh i funktsiyakh, upotrebljaemykh pri razlozhenijakh v rjady. Sankt-Peterburg, 1873. (in Russian)
10. Metzler R., Chechkin A.V., Gonchar V.Yu., Klafter R. Some fundamental aspect of Levy flights // Chaos, Solutions and Fractals. – 2007. – Vol. 34. – P. 129-142.
11. Uizem J. Linejnye i nelinejnye volny. - Moskva: Izdatel'stvo Mir, 1977. – 624 s. (in Russian)
12. Gradshtejn I.S., Ryzhik I.M. Tablitsy integralov, summ, rjadov i proizvedenij. 4-e izd. – Moskva: Fizmatgiz, 1963. - 1100 s. (in Russian)
13. Zumofen G., Klafter J. Absorbing boundary in one-dimensional anomalous transport // Phys. Rev. E. – 1995. - Vol. 51. - P. 2805-2814.
14. Evgrafov M.A. Analiticheskie funktsii. - Moskva: Izdatel'stvo «Nauka», 1968. – 471 s. (in Russian)

PACS: 05.30.Ch; 05.30.Fk; 05.70.-a

## THE EQUATION OF STATE AND THE QUASIPARTICLE MASS IN THE DEGENERATE FERMI SYSTEM WITH AN EFFECTIVE INTERACTION

**Yu.M. Poluektov, A.A. Soroka**

*National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"*

*1, Akademicheskaya Str., 61108 Kharkov, Ukraine*

*e-mail: [yuripoluektov@kipt.kharkov.ua](mailto:yuripoluektov@kipt.kharkov.ua)*

Received August 31, 2015

General formulas are derived for the quasiparticle effective mass and the equation of state of the Fermi system with account of the interparticle attraction at long distances and repulsion at short distances. Calculations are carried out of the equation of state and the effective mass of the Fermi system at zero temperature with the use of the modified Morse potential. It is shown that pair repulsive forces promote decrease of the effective mass, and attractive forces promote its increase. With certain choice of parameters of the potential the dependence of the pressure on the density has a nonmonotonic character, which enables to describe the coexistence of the liquid and gaseous phases. The influence of three-body interactions on the equation of state and the effective mass is considered. The calculation results are compared with experimental data concerning the quasiparticle effective mass in the liquid  $^3\text{He}$ .

**KEY WORDS:** normal Fermi liquid, effective mass, quasiparticle, equation of state, interaction

### УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ И МАССА КВАЗИЧАСТИЦЫ В ВЫРОЖДЕННОЙ ФЕРМИ-СИСТЕМЕ С ЭФФЕКТИВНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

**Ю.М. Полуктов, А.А. Сорока**

*Национальный научный центр "Харьковский физико-технический институт"*

*61108, Академическая, 1, Харьков, Украина*

Получены общие формулы для эффективной массы квазичастицы и уравнения состояния в ферми-системе с учетом межчастичного притяжения на далеких и отталкивания на малых расстояниях. Выполнены расчеты уравнения состояния и эффективной массы для ферми-системы при нулевой температуре с использованием модифицированного потенциала Морзе. Показано, что парные силы отталкивания способствуют уменьшению эффективной массы, а силы притяжения – ее возрастанию. При определенном выборе параметров потенциала зависимость давления от плотности имеет немонотонный характер, что позволяет описать сосуществование жидкой и газообразной фаз. Рассмотрено влияние на уравнение состояния и эффективную массу трехчастичных взаимодействий. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными об эффективной массе квазичастицы в жидком  $^3\text{He}$ .

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** нормальная ферми-жидкость, эффективная масса, квазичастица, уравнение состояния, потенциал взаимодействия

### РІВНЯННЯ СТАНУ І МАССА КВАЗИЧАСТИНКИ У ВИРОДЖЕНІЙ ФЕРМІ-СИСТЕМІ З ЕФЕКТИВНОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ

**Ю.М. Полуктов, О.О. Сорока**

*Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут"*

*61108, вул. Академічна, 1, Харків, Україна*

Отримано загальні формули для ефективної маси квазичастинок і рівняння стану в фермі-системі з урахуванням міжчастинкового притягання на далеких і відштовхування на малих відстанях. Проведено розрахунки рівняння стану та ефективної маси для фермі-системи при нульовій температурі з використанням модифікованого потенціалу Морзе. Показано, що парні сили відштовхування сприяють зменшенню ефективної маси, а сили притягання – її зростанню. При певному виборі параметрів потенціалу залежність тиску від щільності має немонотонний характер, що дозволяє описати співіснування рідкої та газової фаз. Розглянуто вплив на рівняння стану і ефективну масу трьохчастинкових взаємодій. Результати розрахунків порівнюються з експериментальними даними щодо ефективної маси квазичастинок в рідкому  $^3\text{He}$ .

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** нормальна фермі-система, ефективна маса, квазичастинка, рівняння стану, потенціал взаємодії

Термодинамические свойства вырожденной ферми-жидкости определяются квазичастицами вблизи поверхности Ферми, закон дисперсии которых имеет такой же вид, как и у свободных частиц, но с эффективной массой, зависящей от термодинамических величин [1,2]. В ферми-жидкостном подходе эффективная масса выражается через феноменологическую амплитуду, описывающую взаимодействие квазичастиц. На микроскопическом уровне эффективная масса вычислялась для слабо неидеального ферми-газа [3]. Однако такие расчеты справедливы только для разреженных систем, в предположении применимости борновского приближения, когда взаимодействие между частицами может быть охарактеризовано единственным параметром – длиной рассеяния, которая может быть либо положительной, либо отрицательной, как в случае атомов  $^3\text{He}$ .

При более реалистическом описании с помощью модельных потенциалов следует учитывать, что взаимодействие между частицами на малых расстояниях имеет характер сильного отталкивания, а на больших – притяжения. Поэтому в достаточно плотных средах характеристики системы существенно зависят от

конкретного вида потенциала взаимодействия частиц и его параметров, а также плотности. При малой плотности числа частиц, когда среднее расстояние между ними сравнимо или превосходит радиус действия сил притяжения, существенную роль играют именно дальнедействующая составляющая межчастичного потенциала. С увеличением плотности и уменьшением среднего расстояния между частицами, все больше проявляются эффекты сильного отталкивания между частицами. При упрощенном описании взаимодействия с помощью единственного параметра, длины рассеяния, эффекты, связанные с вкладами дальнедействующего притяжения и короткодействующего отталкивания, естественно, учтены быть не могут. Отметим также, что для реалистических потенциалов с отталкиванием на малых расстояниях борновское приближение, как правило, неприменимо. Известно, что учет сильного отталкивания (жесткая сердцевина) на малых расстояниях приводит к значительным трудностям при расчетах в модели самосогласованного поля [4,5]. В частности, вклад в энергию системы короткодействующих сил оказывается существенно завышенным. Чтобы обойти эту трудность в данной работе предлагается использовать эффективный потенциал взаимодействия между частицами, отличный от потенциала взаимодействия свободных частиц, как это принято в расчетах методом самосогласованного поля в ядерной физике [6,7]. При этом «жесткая» сердцевина заменяется «мягкой», величина которой является подгоночным параметром.

Целью данной работы является расчет эффективной массы и нахождение уравнения состояния ферми-системы в микроскопическом подходе в рамках варианта модели самосогласованного поля, сформулированного в работах [8,9], с помощью потенциалов взаимодействия, учитывающих как отталкивание, так и притяжения частиц. Получена общая формула для эффективной массы квазичастицы в ферми-системе. Исследовано влияние короткодействующих сил отталкивания и дальнедействующих сил межчастичного притяжения на величину эффективной массы и уравнение состояния. Показано, что силы отталкивания способствуют уменьшению эффективной массы, а силы притяжения – ее возрастанию. Конкретные расчеты эффективной массы и уравнения состояния проведены для нулевой температуры с использованием модифицированного потенциала Морзе. При определенном выборе параметров потенциала зависимость полного давления от плотности оказывается немонотонной, и уравнение состояния описывает сосуществование газообразной и жидкой фаз. С увеличением плотности вычисленная эффективная масса квазичастицы убывает, что не соответствует экспериментальным данным для жидкого  ${}^3\text{He}$ . В работе высказано предположение, что возможная причина несоответствия связана с эффектами трехчастичных сил в ферми-жидкости. Рассмотрена роль трехчастичных взаимодействий и показано, что учет трехчастичных сил притяжения способствует росту эффективной массы.

### ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА И УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ В МОДЕЛИ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ

В данном разделе получим общие формулы для эффективной массы квазичастицы и давления. Волновая функция квазичастицы ферми-системы  $\phi_j(q)$  в рамках модели самосогласованного поля в формулировке работ [8,9] находится из уравнения

$$\int dq' [H(q, q') + W(q, q')] \phi_j(q') = \varepsilon_j \phi_j(q), \quad (1)$$

где  $H(q, q') = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \delta(q - q') - \mu \delta(q - q')$ ,  $m$  – масса свободного фермиона,  $\mu$  – химический потенциал,  $q \equiv (\mathbf{r}, \sigma)$  обозначает пространственную координату  $\mathbf{r}$  и проекцию спина  $\sigma$ ,  $j \equiv (\nu, \sigma')$ , где  $\nu$  – полный набор квантовых чисел, описывающих состояние частицы, за исключением проекции спина  $\sigma'$ . Полагаем спин  $s = 1/2$ . В формуле (1) самосогласованный потенциал  $W(q, q')$  имеет смысл среднего поля, действующего на отдельную частицу [8,9]. В отсутствие внешнего поля в пространственно-однородных условиях состояние отдельной частицы может быть охарактеризовано ее волновым вектором  $\mathbf{k}$ , а ее волновая функция имеет вид плоской волны:

$$\phi_j(q) = \frac{\delta_{\sigma\sigma'}}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (2)$$

В этих условиях в пренебрежении магнитными эффектами самосогласованный потенциал имеет вид  $W(q, q') = \delta_{\sigma\sigma'} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , где

$$W(\mathbf{r}) = W_0 \delta(\mathbf{r}) + W_C(r). \quad (3)$$

Вид полей  $W_0, W_C(r)$ , обусловленных прямым и обменным взаимодействиями, приведен ниже. В пространственно-однородных условиях из (1) следует выражение для энергии квазичастицы

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu + W_0 + \frac{4\pi}{k} \int_0^\infty dr r W_C(r) \sin kr. \quad (4)$$

При низких, но конечных температурах для вырожденной системы волновое число Ферми определим

соотношением

$$\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} - \mu + W_0 + \frac{4\pi}{k_F} \int_0^\infty dr r W_C(r) \sin k_F r = 0. \quad (5)$$

Это соотношение устанавливает связь химического потенциала с волновым числом Ферми. С помощью формулы (5), исключая из (4) химический потенциал, имеем

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + 4\pi \int_0^\infty dr r W_C(r) \left( \frac{\sin kr}{k} - \frac{\sin k_F r}{k_F} \right). \quad (6)$$

Вблизи поверхности Ферми  $k = k_F + \Delta k$ , и эффективная масса определяется соотношением

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{m_*} k_F \Delta k = \frac{\hbar^2}{m_*} k_F (k - k_F). \text{ Она может быть представлена в виде}$$

$$\frac{m}{m_*} = 1 + \frac{2k_F m}{\pi \hbar^2} J, \quad (7)$$

где

$$J \equiv -\frac{2\pi^2}{k_F^2} \int_0^\infty dr r^3 W_C(r) j_1(k_F r), \quad (8)$$

$j_1(x) = (\sin x - x \cos x)/x^2$  – сферическая функция Бесселя. В таком виде формула для эффективной массы справедлива при конечной температуре и произвольном характере межчастичного взаимодействия, и применима как для парных, так и для многочастичных сил. Отметим, что определение эффективной массы может быть дано несколько иначе, а именно  $m_* = \hbar k_F / v_F$ , где  $v_F = \partial \varepsilon_k / \partial k|_{k=k_F}$  [3], но приводит к тому же результату (7).

Полное давление в ферми-системе в модели самосогласованного поля определяется суммой двух вкладов  $p = p_F + p_I$ : положительным давлением газа квазичастиц с эффективной массой

$$p_F = \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{5} \frac{\hbar^2}{m_*} n^{5/3}, \quad (9)$$

и давлением, обусловленным парным межчастичным взаимодействием, которое может иметь как положительный, так и отрицательный знак:

$$p_I = 4\pi \int_0^\infty dr r^2 U(r) (2\rho^2(0) - \rho^2(r)) = 2\pi n^2 \int_0^\infty dr r^2 U(r) g(k_F r), \quad (10)$$

где  $n$  – плотность числа частиц,  $g(k_F r) \equiv 1 - \frac{9}{2} \left( \frac{j_1(k_F r)}{k_F r} \right)^2$ . Поскольку парная корреляционная функция  $g(k_F r)$

везде положительна, то, короткодействующая положительная часть потенциала вносит в давление положительный вклад, а дальнедействующая часть – отрицательный.

### ЭФФЕКТИВНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Потенциальная энергия системы  $N$  частиц, обладающих внутренней структурой, может быть представлена в виде суммы парных, тройных и т.д. взаимодействий

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i < j} U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_{i < j < k} U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots, \quad (11)$$

где  $U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = U(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i)$ ,  $U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k)$  – симметричная по всем перестановкам координат функция. Теория самосогласованного поля для ферми систем с учетом вклада трехчастичных взаимодействий рассмотрена в работе [9].

Обсудим вопрос о выборе потенциалов межчастичного взаимодействия. Начнем с анализа парных потенциалов. Для описания взаимодействия частиц используются модельные потенциалы, зависящие в простейшем случае только от расстояния между частицами. Примером таких потенциалов может служить часто употребляемый потенциал Леннарда-Джонса

$$U_{LJ}(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (12)$$

содержащий два параметра: расстояние  $\sigma$  и энергию  $\varepsilon$ . На малых расстояниях этот потенциал быстро стремится к бесконечности. При  $r_* = \sigma$  он обращается в нуль, становясь при  $r > r_*$  отрицательным. Потенциал (12) и ему подобные можно записать в общем виде

$$U(r) = \begin{cases} U_C(r), & r < r_*, \\ U_L(r), & r > r_*, \end{cases} \quad (13)$$

где  $U_C(r) > 0$  – короткодействующая часть потенциала, для которой во многих случаях полагают  $U_C(r) \rightarrow \infty$  при  $r \rightarrow 0$ , а  $U_L(r) < 0$  – далекодействующая часть потенциала, такая что  $U_L(r) \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$ . Использование в квантово-механических расчетах потенциалов с твердой сердцевиной, как известно [4,5], приводит к значительным трудностям. Для потенциалов с бесконечной сердцевиной отсутствует Фурье-образ, и самосогласованное поле при использовании этих потенциалов обращается в бесконечность. Иногда это обстоятельство используется в качестве аргумента в подтверждение неприменимости модели самосогласованного поля в том или ином случае, например для описания жидкости [10]. Использование потенциала, быстро стремящегося к бесконечности на малых расстояниях, означает, что атом или другая сложная частица сохраняет свою индивидуальность при как угодно высоких давлениях. Между тем очевидно, что должно существовать критическое давление, при котором атомы сблизятся настолько, что будут «раздавлены» и потеряют свою индивидуальность. Поэтому требование абсолютной непроницаемости частиц при как угодно больших давлениях является излишне жестким и нефизичным и, на наш взгляд, более правильно использовать потенциалы, стремящиеся к конечному значению при малых расстояниях. Примером такого потенциала является известный потенциал Морзе

$$U_M(r) = \varepsilon \left\{ \exp[-2(r-r_0)/a] - 2 \exp[-(r-r_0)/a] \right\}, \quad (14)$$

$\varepsilon$  – параметр размерности энергии,  $r_0$ ,  $a$  – характерные расстояния. Необходимо также отметить, что квантово-химические расчеты приводят к потенциалам с конечной величиной энергии в нуле [11,12]. Эта энергия оказывается довольно большой. Так для потенциала взаимодействия гелий-гелий она имеет порядок  $10^6$  К.

Но даже при конечной, но большой энергии отталкивания роль эффектов, обусловленных твердой сердцевиной, оказывается значительно завышенной. Это связано с тем, что если для описания состояния квазичастицы, как это обычно бывает, использовать волновую функцию, модуль которой медленно меняется в пространстве, то твердая сердцевина дает существенно завышенный вклад в энергию и другие характеристики системы, на что давно было обращено внимание Ястровым [4,5]. Действительно, наличие твердой сердцевины, не позволяет частицам сблизиться на расстояния, меньше ее радиуса, так что реальная волновая функция, в отличие, например, от плоской волны, должна быстро убывать на таких расстояниях. Чтобы исправить отмеченный недостаток, Ястровым [4] была предложена волновая функция, учитывающая данное обстоятельство, однако использовать такую функцию в расчетах оказалось весьма сложно.

Можно попытаться исправить ситуацию другим способом, а именно, сохранив описание квазичастиц с помощью плоских волн, отказаться от использования «реалистических» потенциалов, с помощью которых взаимодействуют свободные частицы. Вместо «жестких» потенциалов с большим значением энергии отталкивания на малых расстояниях можно использовать «мягкие» эффективные потенциалы, у которых энергия на малых расстояниях является феноменологическим подгоночным параметром, определяемым из сравнения с экспериментом для какой-либо измеримой величины. Именно такая идея положена в основу расчетов методом самосогласованного поля в ядрах [6,7]. В таких расчетах, чтобы обойти проблемы, возникающие из-за сильной отталкивающей сердцевины [13], вводят эффективное взаимодействие вне связи с базисным взаимодействием свободных нуклонов [6,7].

Простейшим способом модификации потенциалов (13) может служить замена их короткодействующей части постоянной величиной, так что

$$\tilde{U}(r) = \begin{cases} U_m, & r < r_*, \\ U_L(r), & r > r_*, \end{cases} \quad (15)$$

где  $U_m > 0$ . В качестве далекодействующей части может быть выбран какой-либо из известных модельных потенциалов. Так для потенциала Сюзерленда

$$U_L(r) = -\varepsilon (\sigma/r)^6. \quad (16)$$

Более реалистичным является потенциал Кихары

$$U_L(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r-a} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r-a} \right)^6 \right], \quad (17)$$

который в сравнении с потенциалом Леннард-Джонса содержит добавочный параметр размерности длины  $a$  и переходит в потенциал Леннард-Джонса при  $a = 0$  (12).

При численных расчетах в данной работе мы в качестве далекодействующей части будем использовать потенциал Морзе (14). Хотя потенциал Морзе конечен при всех расстояниях, но значение энергии в нуле у него все еще велико, так что положительную часть этого потенциала, в соответствии со сказанным выше, будем заменять постоянной величиной, вводя тем самым дополнительный подгоночный параметр размерности

энергии.

Что касается выбора потенциала для трехчастичных взаимодействий, то о таких потенциалах известно очень мало. Отметим, что нахождение из первых принципов потенциала взаимодействия трех атомов как бесструктурных единиц является сложной квантово-механической задачей [14]. Обзор современного состояния проблемы трехчастичных сил дан в работе [15].

В частности, трехчастичный потенциал может быть выбран в виде, предложенном в [16]:

$$U(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, |\mathbf{r}-\mathbf{r}''|) = u_0 \exp[-(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| + |\mathbf{r}-\mathbf{r}''|)/r_0]. \quad (18)$$

Возможен также выбор потенциала в виде гауссовой функции:

$$U(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, |\mathbf{r}-\mathbf{r}''|) = \frac{u_0}{\pi^{3/2} r_0^3} \exp\left\{-\frac{[(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2 + (\mathbf{r}-\mathbf{r}'')^2]}{r_0^2}\right\}. \quad (19)$$

Такой выбор характерен тем, что в пределе  $r_0 \rightarrow 0$  потенциал (19) переходит в трехчастичный потенциал нулевого радиуса, который, как показано в работе [9], не дает вклад в самосогласованное поле. В принципе, возможен выбор модельного трехчастичного потенциала, зависящего от трех расстояний между тремя частицами

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{r}'') = U_3(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, |\mathbf{r}-\mathbf{r}''|, |\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|). \quad (20)$$

В данной работе в расчетах будем использовать потенциал именно такого типа, взятого в виде потенциала «полупрозрачной сферы»:

$$U_3(r, r', r'') = \begin{cases} U_{3m}, & r < r_3, \quad r' < r_3, \quad r'' < r_3, \\ 0, & \text{else.} \end{cases} \quad (21)$$

Потенциал (21) отличен от нуля только в том случае, если расстояние между каждой парой из тройки частиц меньше  $r_3$ .

В самосогласованный потенциал (3) дают вклад как парные, так и трехчастичные взаимодействия  $W_0 = W_0^{(2)} + W_0^{(3)}$ ,  $W_C(r) = W_C^{(2)}(r) + W_C^{(3)}(r)$ . В случае парных сил

$$W_0^{(2)} = nU_0, \quad W_C^{(2)} = -U(r)\rho(r). \quad (22)$$

Здесь  $U(r)$  – потенциал парного взаимодействия,  $U_0 = \int U(r) dr$ . Одночастичная матрица плотности имеет вид

$$\rho(r) = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^\infty dk k \sin(kr) f(\varepsilon_k), \quad (23)$$

где  $f(\varepsilon_k) = (\exp \beta \varepsilon_k + 1)^{-1}$ , а плотность числа частиц  $n = 2\rho(0)$ .

Вклад трехчастичных сил определяется соотношениями [9]:

$$W_0^{(3)} = 2b_1 - b_2, \quad W_C^{(3)} = a_1(r) - 2\rho(r)a_2(r). \quad (24)$$

Для трехчастичного потенциала, зависящего от расстояний между частицами (20):

$$\begin{aligned} a_1(r) &= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2l+1} \int_0^\infty \underline{U}_{3l}(r, r') \rho_l(r, r') \rho(r') r'^2 dr', & a_2(r) &= 4\pi \rho(0) \int_0^\infty \underline{U}_{30}(r, r') r'^2 dr', \\ b_1 &= 16\pi^2 \rho^2(0) \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\infty \underline{U}_{30}(r, r') r'^2 dr', & b_2 &= 16\pi^2 \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\infty \underline{U}_{30}(r, r') \rho^2(r') r'^2 dr'. \end{aligned} \quad (25)$$

Здесь

$$U_3(r, r', |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) = \sum_{l=0}^{\infty} \underline{U}_{3l}(r, r') P_l(\cos \theta), \quad (26)$$

$$\underline{U}_{3l}(r, r') = \frac{(2l+1)}{2} \int_{-1}^1 U_3(r, r', \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr'x}) P_l(x) dx,$$

$$\rho(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) = \sum_{l=0}^{\infty} \rho_l(r, r') P_l(\cos \theta), \quad (27)$$

$$\rho_l(r, r') = \frac{2l+1}{2\pi^2} \int_0^\infty f(\varepsilon_k) j_l(kr) j_l(kr') k^2 dk.$$

### ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА, УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЕ И ХИМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ДЛЯ МОДИФИЦИРОВАННОГО ПОТЕНЦИАЛА МОРЗЕ

В данном разделе приведем результаты расчета зависимостей эффективной массы, давления и химического потенциала от плотности числа частиц при нулевой температуре, для эффективного парного

потенциала типа (15), выбрав в качестве дальнедействующей части потенциал Морзе (14). Результаты расчетов будем сравнивать с экспериментальными данными для жидкого  ${}^3\text{He}$  [17,18] при температуре близкой к нулю. Заметим, что в данной работе рассматривается нормальная ферми-система, тогда как  ${}^3\text{He}$  при низких температурах переходит в сверхтекучее состояние [18]. Однако, поскольку температура сверхтекучего перехода  $T_C$  весьма низка, порядка нескольких милликельвинов, и она много меньше температуры Ферми  $T_F \sim 1\text{K}$ , то при выполнении условия  $T_C < T \ll T_F$  с достаточной точностью можно рассматривать нормальную систему, полагая, что она находится при нулевой температуре.

Выбор в качестве дальнедействующей части потенциала Морзе удобен в частности, потому, что он допускает получение в некоторых случаях аналитических выражений. Так интеграл (8), определяющий эффективную массу (7), в этом случае дается формулой:

$$J = \frac{U_m}{k_F^3} B_2(k_F r_*) + \frac{\varepsilon}{k_F^3} \left[ e^{2\gamma} I_M \left( k_F r_*, \frac{2\gamma}{k_F r_0} \right) - 2e^\gamma I_M \left( k_F r_*, \frac{\gamma}{k_F r_0} \right) \right]. \quad (28)$$

Здесь использованы обозначения:

$$B_2(z) \equiv \int_0^z y^2 j_1^2(y) dy, \quad I_M(z, \alpha) \equiv \int_z^\infty e^{-\alpha y} j_1^2(y) y^2 dy, \quad (29)$$

$\gamma = r_0/a$  и  $r_*/r_0 = 1 - \ln 2/\gamma$ . С учетом связи волнового числа Ферми с плотностью  $n = k_F^3/3\pi^2$ , формулы (7), (8), (28) определяют зависимость эффективной массы от плотности, которая показана на рис. 1 (кривая 1). Выбор подгоночных параметров в парном потенциале обсудим ниже. Как видим, эффективная масса квазичастицы при малых плотностях возрастает с увеличением плотности, что находится в качественном соответствии с расчетом для разреженного ферми-газа [3], а затем с ростом плотности убывает. Качественно этот результат можно понять на основе общей формулы (7). Как можно убедиться, положительная часть потенциала, описывающая отталкивание, приводит к уменьшению эффективной массы, а его притягивающая отрицательная часть дает вклад, увеличивающий эффективную массу. С увеличением плотности, среднее расстояние между частицами уменьшается и, следовательно, возрастает роль межчастичного отталкивания, приводящего к уменьшению массы. Полученный результат не отвечает экспериментально наблюдаемой зависимости эффективной массы от давления в жидком  ${}^3\text{He}$ , которая возрастает с увеличением давления [17,18]. Возможную причину несоответствия обсудим в следующем разделе.

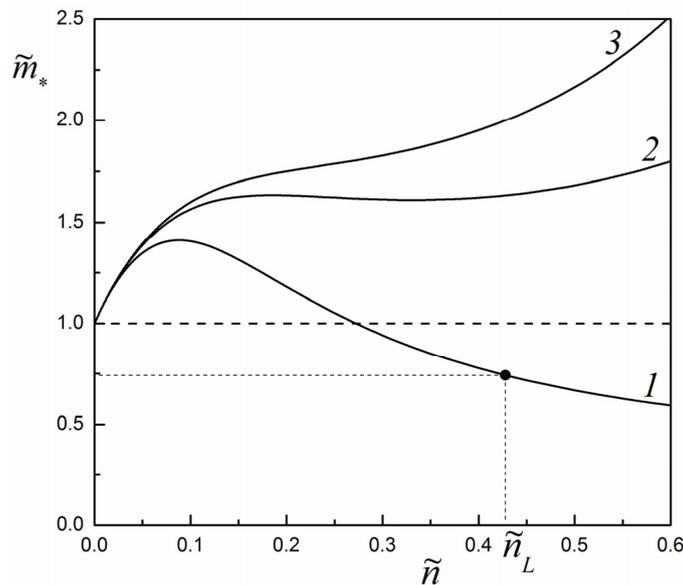


Рис. 1. Зависимости эффективной массы квазичастиц ферми-жидкости  $\tilde{m}_* = m_*/m$  от безразмерной плотности  $\tilde{n} = n/n_0$ , где  $n_0 = r_0^{-3}$ . Кривая 1 рассчитана с эффективным парным потенциалом Морзе и параметрами  $U_m = 46,55\text{K}$ ,  $\gamma = 4,16$ . Значение  $\tilde{n}_L = 0,43$  соответствует плотности жидкого  ${}^3\text{He}$  при нулевом давлении и температуре,  $\tilde{m}_*(\tilde{n}_L) = 0,74$ . Кривые 2 и 3 показывают зависимости эффективной массы при учете как парных, так и трехчастичных сил для параметров: 2 –  $U_{3m} = -4\varepsilon_0$ ,  $r_3 = 1,27r_0$ , 3 –  $U_{3m} = -4\varepsilon_0$ ,  $r_3 = 1,30r_0$ .

Вклад в давление, обусловленный взаимодействием, для модифицированного потенциала Морзе определяется формулой

$$p_l = \frac{2\pi n^2}{k_F^3} \left\{ U_m I_{P1}(k_F r_*) + \varepsilon \left[ e^{2\gamma} I_{P2}\left(k_F r_*, \frac{2\gamma}{k_F r_0}\right) - 2e^\gamma I_{P2}\left(k_F r_*, \frac{\gamma}{k_F r_0}\right) \right] \right\}, \quad (30)$$

где

$$I_{P1}(z) \equiv \int_0^z g(y) y^2 dy, \quad I_{P2}(z, \alpha) \equiv \int_z^\infty e^{-\alpha y} g(y) y^2 dy, \quad g(y) \equiv 1 - \frac{9}{2} \left( \frac{j_1(y)}{y} \right)^2. \quad (31)$$

Зависимость полного давления  $p = p_f + p_l$  от плотности показана на рис. 2.

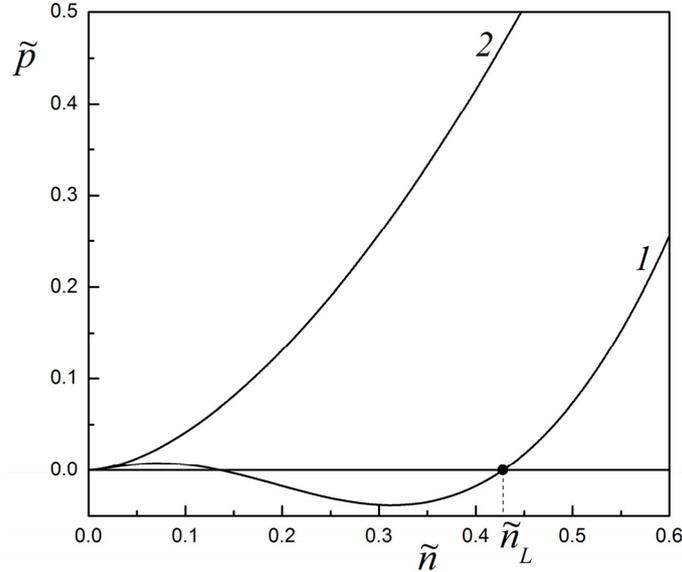


Рис. 2. Зависимость полного давления  $\tilde{p} = p / p_0$  ( $p_0 = \hbar^2 / m r_0^5$ ) от плотности  $\tilde{n} = n / n_0$ , где  $n_0 = r_0^{-3}$ . Кривая 1 отвечает ферми-жидкости с эффективным парным потенциалом Морзе ( $U_m = 46,55 \text{ K}$ ,  $\gamma = 4,16$ ), а кривая 2 – идеальному ферми-газу.

Как видим, учет взаимодействия между атомами приводит к качественному изменению зависимости давления от плотности в сравнении с ферми-газом. При выбранных параметрах потенциала межчастичного взаимодействия давление оказывается немонотонной функцией плотности. Имеется интервал давлений, в котором каждому значению давления соответствует две плотности, большая из которых отвечает жидкости, а меньшая – газу. Для нахождения условия равновесия между фазами, из формулы (5) рассчитаем химический потенциал, который для модифицированного потенциала Морзе имеет вид

$$\mu = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \frac{4U_m}{9\pi} \left[ (k_F r_*)^3 - \frac{9}{2} I_{\mu 2}(k_F r_*) \right] + \frac{4}{3\pi} \varepsilon e^{2\gamma} \left[ I_{\mu 1}\left(k_F r_*, \frac{2\gamma}{k_F r_0}\right) - \frac{3}{2} I_{\mu 3}\left(k_F r_*, \frac{2\gamma}{k_F r_0}\right) \right] - \frac{8}{3\pi} \varepsilon e^\gamma \left[ I_{\mu 1}\left(k_F r_*, \frac{\gamma}{k_F r_0}\right) - \frac{3}{2} I_{\mu 3}\left(k_F r_*, \frac{\gamma}{k_F r_0}\right) \right]. \quad (32)$$

Здесь использованы обозначения:

$$I_{\mu 1}(z, \alpha) \equiv \int_z^\infty e^{-\alpha y} y^2 dy, \quad I_{\mu 2}(z) \equiv \int_0^z j_1(y) \sin(y) dy, \quad I_{\mu 3}(z, \alpha) \equiv \int_z^\infty e^{-\alpha y} j_1(y) \sin(y) dy. \quad (33)$$

Зависимость химического потенциала от плотности показана на рис. 3. В идеальном ферми-газе при нулевой температуре химический потенциал положителен и совпадает с энергией Ферми. Наличие взаимодействия между частицами, в частности, притяжения на далеких расстояниях, приводит к существенному изменению зависимости химического потенциала от плотности числа частиц в сравнении со случаем идеального газа. Как видим (рис. 3), эта зависимость может оказаться немонотонной, а знак химического потенциала отрицательным.

Обсудим вопрос о выборе параметров эффективного потенциала. Расстояние до минимума и глубина ямы стандартных модельных потенциалов известны [19]. Для гелия они равны  $\varepsilon = 10,7 \text{ K}$ ,  $r_0 = 2,97 \text{ \AA}$ . Вообще говоря, при использовании эффективного потенциала, нет оснований выбирать значения этих параметров равными параметрам потенциала взаимодействия свободных частиц. Тем не менее, при численных расчетах в данной работе предполагаем, что  $\varepsilon, r_0$  не отличаются существенно от приведенных выше значений. Остаются два подгоночных параметра  $\gamma = r_0/a$  и  $U_m$ , которые необходимо выбрать из дополнительных соображений.

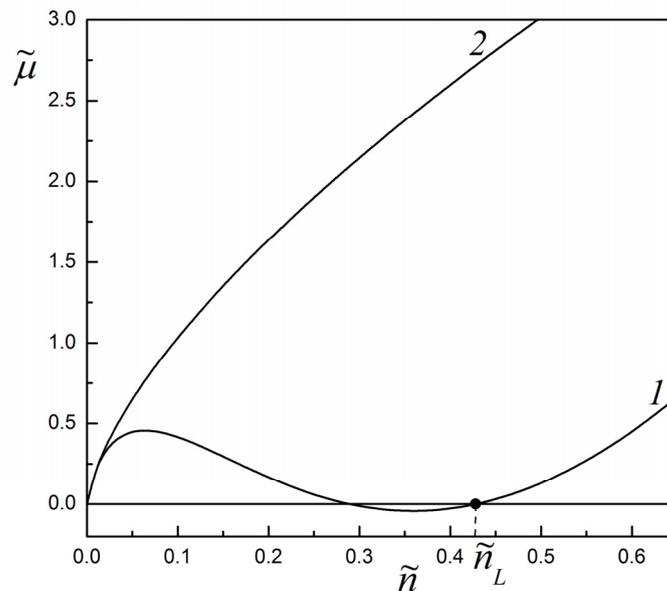


Рис. 3. Зависимости химического потенциала  $\tilde{\mu} = \mu / \varepsilon_0$  ( $\varepsilon_0 = \hbar^2 / mr_0^2$ ) от плотности  $\tilde{n} = n / n_0$ , где  $n_0 = r_0^{-3}$ . Кривая 1 отвечает ферми-жидкости с эффективным парным потенциалом Морзе ( $U_m = 46,55 \text{ K}$ ,  $\gamma = 4,16$ ), а кривая 2 – идеальному ферми-газу.

Характер зависимости полного давления от плотности зависит от выбора параметра  $\gamma$ . При достаточно большом значении этого параметра давление монотонно возрастает с увеличением плотности. С уменьшением указанного параметра зависимость  $p = p(n)$  становится немонотонной как показано на рис. 2. Термодинамически устойчивыми являются участки, на которых  $\partial p / \partial n > 0$ . Существует область давлений, которой отвечает два значения плотности, меньшая плотность отвечает пару, а большая – жидкости. Из эксперимента известно [17], что давление насыщенных паров  ${}^3\text{He}$  стремится к нулю со стремлением к нулю температуры. Поэтому одним из условий, которое должно удовлетворяться при выборе подгоночных параметров является требование, чтобы большая, отличная от нуля плотность, при нулевом давлении совпадала с наблюдаемой плотностью жидкого гелия.

Поскольку условием равновесия фаз является равенство их химических потенциалов, то второе условие, которое следует удовлетворить – это равенство нулю химического потенциала жидкости, равного химическому потенциалу пара при стремлении его плотности к нулю. Таким образом, два подгоночных параметра эффективного потенциала определяются из условий

$$\mu(n_L; \gamma, U_m) = 0, \quad p(n_L; \gamma, U_m) = 0. \quad (34)$$

С учетом того, что плотность жидкого  ${}^3\text{He}$  вблизи нулевой температуры  $n_L = 1,635 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ , находим  $\gamma = 4,16$ ,  $U_m = 46,55 \text{ K}$ . Зависимости эффективной массы, давления и химического потенциала от плотности на рис. 1–3 рассчитаны с такими значениями этих параметров. Следует отметить, что величина подгоночного параметра  $U_m$  существенно меньше значения потенциала Морзе (14) в нуле  $U_M(0) \approx 4 \cdot 10^4 \text{ K}$ .

Рассчитанная с указанными значениями параметров эффективная масса  $m_*/m \approx 0,74$  оказывается примерно в четыре раза меньше, чем эффективная масса квазичастицы в жидком  ${}^3\text{He}$  и, как показано на рис. 1, убывает с увеличением плотности. Это не соответствует наблюдаемой зависимости роста эффективной массы с давлением [17,18]. Отмеченное обстоятельство, по-видимому, не связано с выбором конкретного эффективного потенциала, поскольку качественно подобные зависимости получаются и при использовании эффективных потенциалов, отличных от использованного в данной работе потенциала Морзе. Можно предположить, что отмеченное несоответствие связано с вкладом трехчастичных сил, роль которых рассмотрим в следующем разделе.

### ВКЛАД ТРЕХЧАСТИЧНЫХ СИЛ

В качестве возможной причины объяснения возрастания эффективной массы с увеличением давления а, следовательно, и плотности, рассмотрим вклад трехчастичных взаимодействий [15]. Роль трехчастичных взаимодействий в ферми-системе теоретически рассматривалась в работе [9], где, в частности, было показано, что трехчастичные силы дают вклад в самосогласованный потенциал только при учете их нелокальности. Вклад трехчастичных сил в самосогласованный потенциал дается общими формулами (24–27). Так, для потенциала взаимодействия типа «полупрозрачной сферы» (21), имеем:

$$U_{3l}(r, r') = U_{3m} \theta(r_3 - r) \theta(r_3 - r') (2l+1) \left[ \theta(r_3 - r - r') \delta_{l0} + \theta(r + r' - r_3) \frac{1}{2} \int_{x_0}^1 P_l(x) dx \right], \quad (35)$$

где  $x_0 = (r^2 + r'^2 - r_3^2) / 2rr'$ . При нулевой температуре  $f_k = \theta(k_F - k)$  и

$$\rho(r) = \frac{k_F^2}{2\pi^2 r} j_1(k_F r), \quad \rho(0) = \frac{n}{2} = \frac{k_F^3}{6\pi^2}, \quad \rho_l(r, r') = \frac{2l+1}{2\pi^2} \cdot \int_0^{k_F} dk k^2 j_l(kr) j_l(kr'). \quad (36)$$

С учетом последних соотношений, находим

$$a_1(r) = U_{3m} \theta(r_3 - r) \frac{k_F^3}{2\pi^3} \cdot \frac{1}{k_F r} \left[ j_0^2(k_F r_3) - j_0(k_F r_3) j_0(k_F(r_3 - r)) + \int_{-k_F(r_3 - r)}^{k_F r_3} j_0(k_F r - y) j_1(y) dy \right],$$

$$a_2(r) = \frac{U_{3m}}{72\pi} (k_F r_3)^3 \theta(r_3 - r) \left[ \left( \frac{r}{r_3} \right)^3 - 12 \left( \frac{r}{r_3} \right) + 16 \right], \quad (37)$$

$$b_1 = \frac{5\pi^2}{6} \rho^2(0) U_{3m} r_3^6 = \frac{5}{216\pi^2} U_{3m} (k_F r_3)^6 = 0,0023 \cdot U_{3m} (k_F r_3)^6,$$

$$b_2 = \frac{U_{3m}}{12\pi^2} \left[ B_3(k_F r_3) - 12(k_F r_3)^2 B_1(k_F r_3) + 16(k_F r_3)^3 B_0(k_F r_3) \right],$$

где  $B_n(z) \equiv \int_0^z y^n j_1^2(y) dy$ . Рассчитанные по приведенным формулам зависимости эффективной массы от

плотности числа частиц с учетом трехчастичных сил показаны на рис. 1 (кривые 2, 3). Учет трехчастичных сил с отрицательной постоянной взаимодействия  $U_{3m} < 0$  приводит к возрастанию эффективной массы при увеличении плотности, что находится в качественном соответствии с экспериментально наблюдаемой зависимостью эффективной массы от давления в  $^3\text{He}$  [17,18]. Заметим, однако, что при этом уменьшается скорость роста давления с увеличением плотности. Хотя учет трехчастичных сил притяжения дает более близкую к эксперименту зависимость эффективной массы от плотности, тем не менее, задача объяснения наблюдаемой зависимости на микроскопическом уровне остается актуальной.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе на основе варианта теории самосогласованного поля для ферми-систем, сформулированного в [8,9], получены общие формулы для эффективной массы и уравнения состояния. Обсуждается вопрос об учете влияния сильного отталкивания частиц на малых расстояниях (жесткой сердцевины) при расчетах в модели самосогласованного поля. В силу того, что расчеты с волновыми функциями вида плоской волны не учитывают невозможность сближения частиц на расстояние меньше размера жесткой сердцевины, вклад отталкивания во все величины в таких расчетах оказывается существенно завышенным [4]. Чтобы обойти указанную трудность, в данной работе предлагается при расчетах использовать эффективные потенциалы, отличные от потенциалов взаимодействия свободных атомов, аналогично тому, как это делается при самосогласованных расчетах атомных ядер [6,7]. Дальнедействующая часть эффективного потенциала, описывающая притяжение, выбирается такой же, как и в обычных модельных потенциалах, а энергия отталкивания является подгоночным параметром, который находится из сравнения с экспериментальными величинами.

Численные расчеты эффективной массы квазичастицы, давления и химического потенциала при нулевой температуре выполнены для эффективного потенциала с дальнедействующей частью в виде потенциала Морзе. Показано, что силы отталкивания способствуют уменьшению эффективной массы, а силы притяжения – ее возрастанию. При определенном выборе параметров потенциала зависимость давления от плотности имеет немонотонный характер, что позволяет описать сосуществование жидкой и газовой фаз. Рассчитанная эффективная масса квазичастицы убывает с увеличением плотности, что не соответствует экспериментально наблюдаемой зависимости в жидком  $^3\text{He}$ . Высказано предположение, что причиной отмеченного расхождения могут являться эффекты, обусловленные действием трехчастичных сил. Рассмотрено влияние трехчастичных взаимодействий на уравнение состояния и эффективную массу и показано, что в случае притяжения трехчастичные силы приводят к росту эффективной массы.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Landau L.D. The theory of a Fermi liquid // Sov. Phys. JETP. – 1957. – Vol. – No. 6. – P. 920-925.
2. Pines D., Nozieres P. The theory of quantum liquids. Vol. I. – New York: Benjamin, 1966.
3. Lifshitz E.M., Pitaevskii L.P. Statistical physics. Vol. 9 (Part 2). – Oxford: Butterworth-Heinemann, 1980.
4. Jastrow R. Many-body problem with strong forces // Phys. Rev. – 1955. – Vol. 98. – No.5. – P. 1479-1484.
5. Thouless D.J. The quantum mechanics of many-body systems. – New York: Academic Press, 1972.

6. Skyrme T.H.R. The effective nuclear potential // Nucl. Phys. – 1959. – Vol. 9. – P. 615-634.
7. Barts B.I., Bolotin Yu.L., Inopin E.V., Gonchar V.Yu. Metod Hartri-Foka v teorii jadra (in Russian). – Kiev: Naukova Dumka, 1982.
8. Poluektov Yu.M. On the quantum-field description of many-particle Fermi systems with spontaneously broken symmetry // Ukr. J. Phys. – 2005. – Vol. 50. – No. 11. – P. 1303-1316; [arXiv:1303.4913](https://arxiv.org/abs/1303.4913) [cond-mat.stat-mech].
9. Poluektov Yu.M., Soroka A.A., Shulga S.N. The self-consistent field model for Fermi systems with account of three-body interactions // [arXiv:1503.02428](https://arxiv.org/abs/1503.02428) [cond-mat.stat-mech].
10. Bazarov I.P. Statisticheskaja teorija kristallicheskogo sostojanija (in Russian). – Moskva: Izd. Moskovskogo universiteta, 1972.
11. Aziz R.A., Slaman M.J. An examination of *ab initio* result for the helium potential energy curve // J. Chem. Phys. – 1991. – Vol. 94. – No.12. – P. 8047-8053.
12. Anderson J.B., Traynor C.A., Boghosian B.M. An exact quantum Monte Carlo calculation of the helium-helium intermolecular potential // J. Chem. Phys. – 1993. – Vol. 99. – No.1. – P. 345-351.
13. Brueckner K.A. Teorija jadernoi materii (in Russian). – Moskva: Mir, 1964.
14. Sarry A.M., Sarry M.F. On multiparticle interaction // Tech. Phys. – 2014. – Vol.9. – No. 4. – P. 474-481.
15. Hammer H-W., Nogga A., Schwenk A. Colloquium: Three-body forces: From cold atoms to nuclei // Rev. Mod. Phys. – 2013. – Vol. 85. – No.1. – P. 197-216.
16. Sarkar A.K., Sengupta S. Three body interaction in ionic crystals // Solid State Commun. – 1969. – Vol. 7. – P. 135-137.
17. Peshkov V.P. Properties of  $^3\text{He}$  and of its solutions in  $^4\text{He}$  // Sov. Phys. Usp. – 1968. – Vol.11. – P. 209-228.
18. Wheatley J.C. Experimental properties of the extraordinary phases of liquid  $^3\text{He}$  at millikelvin temperatures // Physica. – 1973. – Vol. 73. – P. 218-244; (see also «Sverhtekuchest geliya-3, Ed. by I.M. Khalatnikov. – Moskva: Mir, 1975).
19. Radzig A.A., Smirnov B.M. Spravochnik po atomnoi i molekularnoj fizike (in Russian). – Moskva: Atomizdat, 1980.

PACS: 13.25.-k, 13.85.-t, 07.05.Tp

## RECONSTRUCTING THE $K_s^0$ - MESON FROM THE FIRST DATA OF CMS EXPERIMENT

S.T. Lukyanenko

*National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"*

*1, Academicheskaya Str., 61108 Kharkov, Ukraine*

*E-mail: [lukyanenko@kipt.kharkov.ua](mailto:lukyanenko@kipt.kharkov.ua)*

Received September 10, 2015

The Large Hadron Collider startup took place on November 2009 in CERN, at center-of-mass energies of 900 GeV for the colliding protons. The results of processing the first data accumulated by CMS experiment are presented. For processing and analyzing the track collections as well as the collection of identified particles have been used. The distributions of charged pions over their transverse momentum and pseudorapidity are built.  $K_s^0$ -meson mass is reconstructed in channel of  $K_s^0$  decay to two charged pions. Comparison with results of computer simulation of proton-proton interactions in CMS detector is also done. It is shown that reconstruction of events is adequate.

**KEYWORDS:** Large Hadron Collider, track collection, collection of identified particles, distributions of charged pions,  $K_s^0$ -meson mass

### РЕКОНСТРУКЦИЯ $K_s^0$ -МЕЗОНА ИЗ ПЕРВЫХ ДАННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТА CMS

С.Т. Лукьяненко

*Национальный научный центр "Харьковский физико-технический институт"*

*61108, ул. Академическая, 1, Харьков, Украина*

В ноябре 2009 года в CERN состоялся запуск Большого адронного коллайдера при энергии в системе центра масс сталкивающихся протонов 900 ГэВ. Представлены результаты обработки первых данных, накопленных в эксперименте CMS. Для обработки и анализа использовались как трековая коллекция, так и коллекция уже идентифицированных частиц. Получены распределения заряженных пионов по их поперечному импульсу и псевдобыстроте, восстановлена масса  $K_s^0$ -мезона в канале его распада на два заряженных пиона. Также приведено сравнение с результатами компьютерного моделирования протон-протонных столкновений в детекторе CMS. Показано, что реконструкция событий является адекватной.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** Большой адронный коллайдер, трековая коллекция, коллекция идентифицированных частиц, распределения заряженных пионов, масса  $K_s^0$ -мезона

### РЕКОНСТРУКЦІЯ $K_s^0$ -МЕЗОНА З ПЕРШИХ ДАНИХ ЕКСПЕРИМЕНТУ CMS

С.Т. Лук'яненко

*Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут"*

*61108, вул. Академічна, 1, Харків, Україна*

У листопаді 2009 року в CERN відбувся запуск Великого адронного колайдера з енергією 900 Гев в системі центру мас протонів, які зіштовхуються. Представлені результати обробки перших даних, накопичених в експерименті CMS. Для обробки та аналізу використовувалися як трекова колекція, так і колекція вже ідентифікованих частинок. Отримано розподіли заряджених піонів по їх поперечному імпульсу та псевдобистроті, реконструйована маса  $K_s^0$ -мезона в каналі його розпаду на два заряджених піона. Також наведено порівняння з результатами комп'ютерного моделювання протон-протонних зіткнень в детекторі CMS. Показано, що реконструкція подій є адекватною.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** Великий адронний колайдер, трекова колекція, колекція ідентифікованих частинок, розподіли заряджених піонів, маса  $K_s^0$ -мезона

Первые данные о взаимодействии протонов при  $\sqrt{s}=900$  ГэВ были записаны детектором CMS [1] в конце ноября 2009 года. Накопленная интегральная светимость перед первой запланированной остановкой ЛHC и его энергия не давали возможность проводить обработку и анализ данных с целью поиска проявлений "новой физики". Поэтому в этот период нашей главной задачей была апробация программ обработки и анализа данных, а также освоение методов программного обеспечения эксперимента CMS (CMSSW) [2], необходимых для дальнейших исследований, напрямую связанных с возможностью обнаружения новых объектов: бозона Хиггса, SUSY-частиц, экзотических частиц и др.

Основой для обработки и анализа данных являются наборы (т. н. "коллекции") восстановленных физических объектов. Под восстановленными объектами подразумеваются идентифицированные заряженные и нейтральные частицы (с соответствующими кинематическими характеристиками), адронные струи и потерянный поперечный импульс в событии. Важной является коллекция Particle Flow (PF). Она включает в себя все восстановленные частицы, образующиеся в протон-протонных столкновениях и непосредственно регистрируемые детектором CMS, т.е. электроны, фотоны, мюоны и заряженные пионы. Её реализация возможна благодаря сильному магнитному полю детектора, высокому пространственному разрешению внутреннего трекового детектора и хорошей поперечной сегментации электромагнитного калориметра в детекторе CMS. Одной из базовых для получения упомянутых наборов является трековая коллекция. Она

содержит восстановленные треки всех заряженных частиц.

Чтобы апробация программ анализа и методов CMSSW не была самоцелью, было принято решение о выделении событий с рождением хорошо изученных  $K_s^0$ -мезонов, так как анализ распределения таких событий, в частности, по инвариантной массе продуктов распада  $K_s^0$ -мезона, даст возможность оценить качество работы детектора CMS и методов восстановления физических объектов. Более того, в CMSSW алгоритмы реконструкции объектов для коллекции PF стали применяться относительно недавно и к моменту запуска LHC были недостаточно сертифицированы. Поэтому имеет смысл сравнить результаты двух реконструкций  $K_s^0$ -мезонов, одна из которых реализована на основе объектов коллекции PF, а другая - на основе объектов трековой коллекции. При корректности методик, ответственных за реконструкцию, и чётком понимании работы детектора результаты должны совпадать. Учитывая, что  $\pi$ -мезоны являются элементами обеих коллекций, мы остановились на идентификации  $K_s^0$ -мезона по каналу его распада  $K_s^0 \rightarrow \pi^+ \pi^-$ . Следует отметить, что при работе с трековой коллекцией применялась процедура т. н. “трековой очистки”. В статье приводятся основные параметры такой очистки, и показывается её необходимость на примере восстановления массы  $K_s^0$ -мезона. Наконец, сравнение результатов обработки экспериментальных данных с компьютерным моделированием событий рождения  $K_s^0$ -мезонов в детекторе CMS позволит оценить точность описания геометрии детектора и процессов взаимодействия частиц с его веществом в соответствующих пакетах CMSSW.

Целью работы является реконструкция массы  $K_s^0$ -мезона из первых данных эксперимента CMS и оценка качества такой реконструкции, которая выполнена отдельно для двух разных коллекций физических объектов, а также сравнение результатов анализа реальных и псевдоэкспериментальных данных, полученных методом Монте-Карло.

Работа выполнена в CMS-группе Харьковского физико-технического института, которая является участником эксперимента CMS на LHC. Созданный ею вычислительный комплекс, интегрированный в GRID-инфраструктуру WLCG [3], уже несколько лет активно используется для хранения, обработки и анализа данных эксперимента CMS. Именно на нём с помощью CMSSW были проведены необходимые вычисления и получены результаты, представленные в статье. Разработанный на основе языков программирования C++ и Python, комплекс CMSSW даёт гибкие механизмы для имплементации в его структуру собственных целевых программных кодов. Несомненным его преимуществом является также возможность работы с известным пакетом обработки и хранения данных ROOT.

### ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ВЫБОРКИ

Все результаты, представленные в статье, получены на основе обработки набора данных эксперимента CMS /MinimumBias/BeamCommissioning09-BSCNOBEAMHALO-Dec19thSkim\_336p3\_v1/RAW-RECO. Он сформирован из первичного набора “сырых” данных путём отсечки событий, не связанных со столкновением протонов, и содержит т. н. “Minimum Bias” (MB) события. “Сырые” данные представляют собой массив записанных сигналов от различных подсистем детектора CMS. Анализ их амплитуд, длительностей и форм, а также разбросов во времени, позволяет восстановить физические объекты. Под MB понимаются события, из которых исключены лишь упругие взаимодействия протонов. При этом основной вклад дают дифракционные процессы и квантово-хромодинамические процессы с малым переданным импульсом. Их отбор обеспечивался триггером, основу которого составляют два сцинтилляционных детектора BSC (beam scintillator counter), работающие в режиме совпадения с детекторами времени пролёта банчей пучка BPTX (beam pick-up timing detector). Нами обрабатывались данные, аккумулированные в двух “золотых” сеансах №123596 и №124020, которые имели относительно небольшое количество “плохих” подсеансов (т.н. люмисекций) и достаточное для статистической обеспеченности результата число протон-протонных столкновений.

MB-события были также сгенерированы с помощью генератора протон-протонных столкновений PYTHIA 6.4 [4] при энергии в системе центра масс сталкивающихся протонов 900 ГэВ. Генератор PYTHIA представляет собой компьютерную реализацию таких столкновений в рамках кварк-партонной модели адронов с использованием модели струнной фрагментации и с учётом партонных ливней. Для обработки данных и моделирования отклика детектора CMS методом Монте-Карло применялся уже упомянутый программный комплекс CMSSW, обеспечивающий также реконструкцию событий. Важно отметить, что в моделировании использовались параметры детектора CMS, которые отвечали условиям его работы во время первых протонных столкновений на LHC.

### АНАЛИЗ ДАННЫХ НА ОСНОВЕ КОЛЛЕКЦИИ PF

Коллекцию PF можно использовать для реконструкции промежуточных объектов, например, относительно долгоживущих частиц. В качестве объекта реконструкции выберем  $K_s^0$ -мезон. Основным каналом его распада является канал  $K_s^0 \rightarrow \pi^+ \pi^-$  [5]. Так как основная доля пионов рождается непосредственно в точке столкновения протонов, а пробег  $K_s^0$ -мезона составляет, по меньшей мере, несколько сантиметров, то для подавления фона будем отбирать события, в которых расстояние от вершины пионных треков до номинальной линии протонных пучков (оси Oz) превышает 0,4 см. Для накопленных детектором данных и данных, полученных методом Монте-Карло, мы построили распределения по поперечному импульсу и псевдобыстроте заряженных пионов в

таких событиях (рис. 1,2). Распределения для событий, сгенерированных методом Монте-Карло, нормированы на количество заряженных пионов в зарегистрированных детектором CMS событиях. Результаты компьютерного моделирования удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными и с результатами, полученными коллаборацией CMS и опубликованными в работе [6].

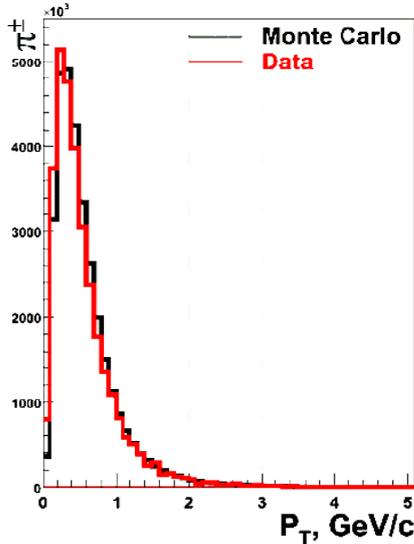


Рис. 1. Распределения по поперечному импульсу заряженных пионов из коллекции PF. Data – данные эксперимента CMS, Monte Carlo – данные компьютерного моделирования

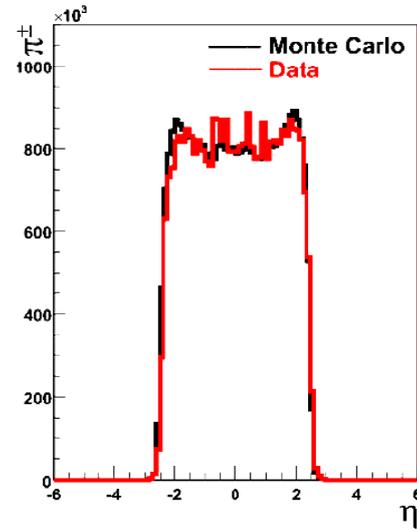


Рис. 2. Распределения по псевдобыстроте заряженных пионов из коллекции PF. Data – данные эксперимента CMS, Monte Carlo – данные компьютерного моделирования

Затем мы сформировали собственную коллекцию  $K_s^0$ -мезонных кандидатов из пар противоположно заряженных и находящихся в коллекции PF пионов, расстояние между вершинами треков которых не более 1 см. Рис. 3 показывает, что даже такие простые критерии отбора позволяют выделить в распределении инвариантной массы пионной пары пик при  $M(\pi^+\pi^-) \approx 500$  МэВ/c<sup>2</sup> и тем самым идентифицировать события с рождением  $K_s^0$ -мезонов.

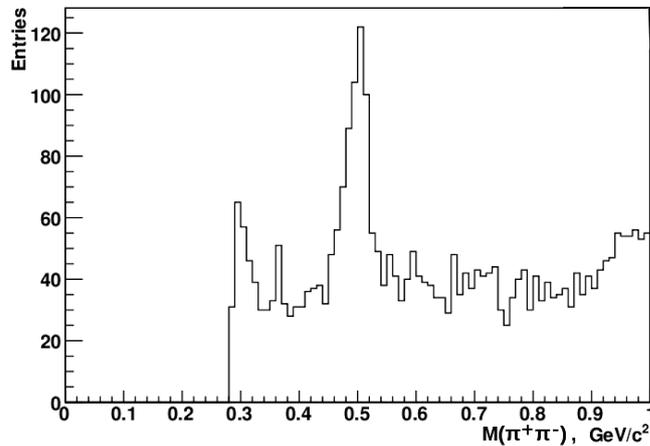


Рис. 3. Распределение по инвариантной массе пары противоположно заряженных пионов из коллекции PF. На этом и последующих рисунках Entries обозначает количество  $K_s^0$ -мезонных кандидатов в одном бине гистограммы.

Уменьшение расстояния между вершинами двух противоположно заряженных пионных треков вместо ожидаемого улучшения разрешения пика и дальнейшей дискриминации фона приводит к обратному результату. Такое поведение может быть обусловлено двумя причинами. Во-первых, восстановленные методами CMSSW вершины пионных треков в коллекции PF (как и других физических объектов) отвечают “перигейным” (ближайшим) к оси Oz точкам пионных треков. Во-вторых, очистка треков может оказаться неполной, либо вообще отсутствовать. Для качественной реконструкции  $K_s^0$ -мезона необходимо использовать непосредственно коллекцию восстановленных пионных треков (см. ниже).

### ОБРАБОТКА ДАННЫХ НА ОСНОВЕ ТРЕКОВОЙ КОЛЛЕКЦИИ И ТРЕКОВАЯ ОЧИСТКА

Коллекция треков содержит все треки, которые восстановлены с помощью метода комбинаторного поиска треков (CTF) из набора “попаданий” (“hits”) во внутреннем трековом детекторе [7]. Качество трека

характеризуется следующими основными величинами: количеством “попаданий”, достоверностью фитирования реконструированного трека  $\chi^2/ndf$ , поперечным и продольным прицельными параметрами и их значимостями (значимость определяется как отношение измеренной величины к ошибке её измерения). Если восстановленные треки удовлетворяют достаточно жёстким ограничениям на указанные величины, то они маркируются как треки “высокой чистоты” (“HighPurity” треки) [8]. Методику отбора треков “высокой чистоты” часто называют трековой очисткой, и в нашем случае она является необходимым условием корректного анализа (см. ниже). Именно такие треки формируются нами на первом этапе анализа, что позволяет исключить из рассмотрения ложные треки. Далее строим коллекцию пар противоположно заряженных треков (дитреков), удовлетворяющих ещё более жёстким критериям:  $\chi^2/ndf < 5$ , как минимум 6 “попаданий” в трековом детекторе, значимость поперечного прицельного параметра по отношению к действительной точке взаимодействия протонов не менее 2. Эти ограничения обеспечивают отбор треков с меньшей ошибкой вычисления величины импульса трека. Методы экстраполяции в CMSSW позволяют восстановить параметры трека по всей его длине и получить т. н. “транзитный” трек. Именно транзитные дитреки передаются на вход фильтра Кальмана [9]. Он обеспечивает реконструкцию вершины, общей для выбранной группы треков. При этом мы отбираем события, в которых достоверность фитирования реконструированной кальмановской вершины  $\chi^2/ndf < 7$ . Остаточный трековый фон подавляется условием: реконструированная вершина должна находиться не ближе  $15\sigma$  к реальной линии пучков ( $\sigma$  – неопределённость в вычислении расстояния), что соответствует приблизительно 0,35 см. Заметим, что реальная линия взаимодействия протонных пучков может не совпадать с номинальной. На первых этапах работы LHC соответствующее смещение было существенным и изменялось во времени, поэтому желательно определять расстояние между кальмановской вершиной и реальной линией пучков. Наконец, инвариантную массу отобранных дитреков вычисляем из предположения, что треки соответствуют заряженным пионам.

Распределение событий с рождением  $K_s^0$ -мезонов по инвариантной массе дитреков, отобранных с помощью вышеупомянутой процедуры, показано на рис. 4, где наблюдается удовлетворительное согласие с результатом компьютерного моделирования.

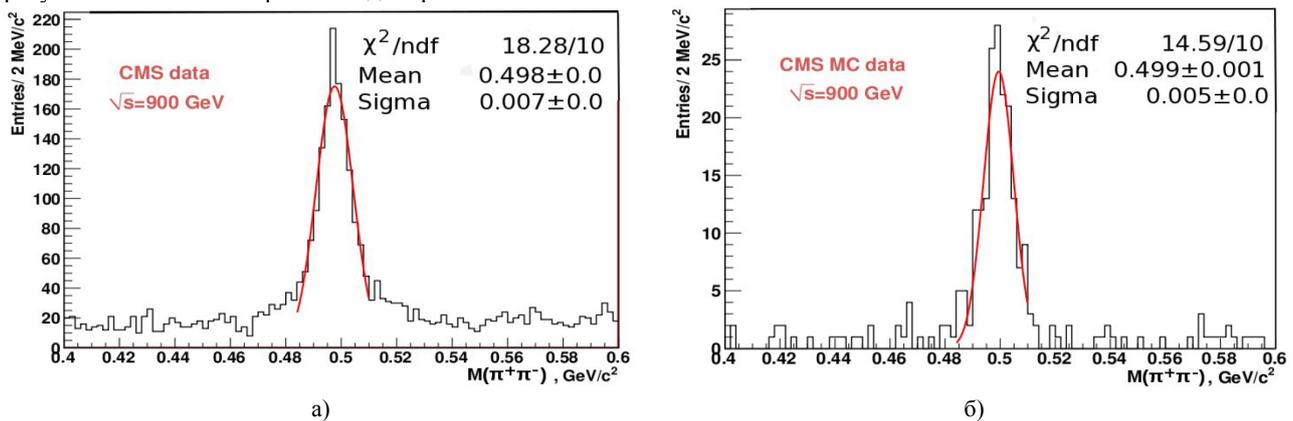


Рис. 4. Полученные с помощью трековой очистки распределения событий с рождением  $K_s^0$ -мезонных кандидатов по инвариантной массе противоположно заряженных пионов из трековой коллекции и их подгонка в пике гауссианом. а) - результат обработки данных эксперимента CMS, б) - результат компьютерного моделирования. Обозначения:  $\chi^2/ndf$  – достоверность фитирования, Mean – главное значение гауссиана, Sigma – его стандартное отклонение.

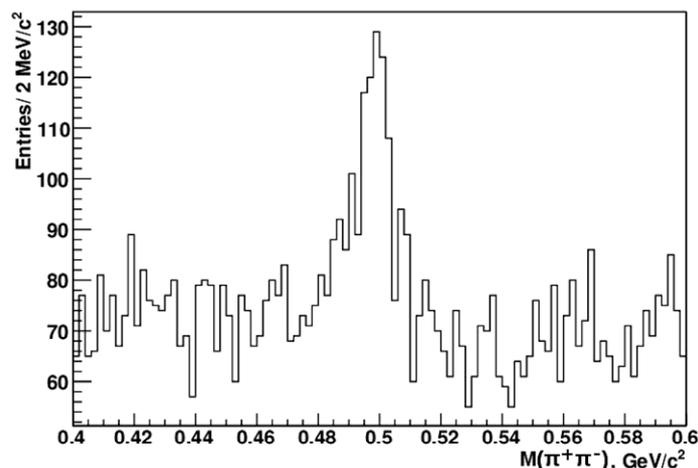


Рис. 5. То же, что и на рис. 4а, но с меньшей статистикой и без процедуры трековой очистки.

Подгонка распределения событий гауссианом даёт значение массы  $K_s^0$ -мезона, совпадающее в пределах ошибки с табличным значением (рис. 4). Ширина пика определяется прежде всего разрешением внутреннего трекового детектора. Отношение (сигнал+фон)/фон в пике увеличилось по сравнению с полученным при обработке коллекции PF: с 3 до 10. Однако оно оказалось приблизительно в 2 раза меньше значения, приведенного в работах [8,10], опубликованных коллаборацией CMS. Лучшее подавление фона могло быть достигнуто за счёт дополнительной трековой очистки [6].

В статье мы не обсуждаем степень влияния на качество восстановления массы  $K_s^0$ -мезона каждого этапа реконструкции. Сравнение рис. 4,5 демонстрирует необходимость трековой очистки, без которой последующие этапы восстановления, и не только в случае идентификации  $K_s^0$ -мезонов, могут оказаться не эффективными.

### ВЫВОДЫ

Апробирована методика реконструкции событий с рождением  $K_s^0$ -мезонов в первых данных эксперимента CMS (в первых протон-протонных столкновениях на LHC при  $\sqrt{s}=900$  ГэВ). На основе коллекции треков восстановлена масса  $K_s^0$ -мезона с удовлетворительной точностью. Ширина пика в распределении событий по инвариантной массе пионного дитрека определяется, прежде всего, разрешением внутреннего трекового детектора. Важным элементом методики является трековая очистка. Рассмотренную процедуру с некоторыми изменениями можно использовать для реконструкции других относительно долгоживущих частиц, например  $\Lambda^0$ ,  $\Sigma$ -гиперонов, а также для поиска гипотетических объектов "новой физики".

Результаты моделирования pp-столкновений в детекторе CMS, выполненного методом Монте-Карло, удовлетворительно согласуются с данными эксперимента. Это указывает на достаточную точность описания в соответствующих пакетах CMSSW как геометрии детектора, так и процессов взаимодействия частиц с его материалом, что приводит к адекватному восстановлению физических объектов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. CMS Collaboration. CMS Physics: Technical Design Report, Volume I: Detector Performance and Software. CERN, 2 February 2006.
2. <https://twiki.cern.ch/twiki/bin/view/CMSPublic/WorkBookCMSSWFramework>, <http://cms-sw.github.io/index.html>.
3. <http://wlcg.web.cern.ch>.
4. Sjöstrand T., Mrenna S., Skands P. PYTHIA 6.4 Physics and Manual // JHEP 05 (2006) 026.
5. Amsler C. et al. (Particle Data Group). Review of Particle Physics // Physics Letters B. – 2008. – Vol. 667. – P.725.
6. Tracking and b Tagging POGs. Tracking and Vertexing Results from First Collisions // CMS AN-2010/055 - 2010.
7. Adam W., Mangano B., Speer T., Todorov T. Track Reconstruction in the CMS tracker // CMS Note-2006/41 - 2006.
8. CMS Collaboration. Tracking and Vertexing Results from First Collisions // CMS PAS TRK-10-001 - 2010.
9. [http://www.cs.unc.edu/~tracker/media/pdf/SIGGRAPH2001\\_CoursePack\\_08.pdf](http://www.cs.unc.edu/~tracker/media/pdf/SIGGRAPH2001_CoursePack_08.pdf).
10. Mulders M. for the CMS Collaboration. The CMS experiment: status and first results // e-Print: arXiv:1006.4010 [hep-ex]

PACS: 05.40.-a, 05.60.-k, 02.60.Cb

## PARTICLE DIFFUSION ACCELERATION IN SPATIALLY PERIODIC STRUCTURES EXPOSED TO RECTANGULAR TIME-PERIODIC FIELDS

**I.G. Marchenko<sup>1,2</sup>, I.I. Marchenko<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*National Scientific Center “Kharkiv Institute of Physics and Technology”*

*1, Akademicheskaya St., Kharkov, 61108, Ukraine*

<sup>2</sup>*V.N. Karazin Kharkov National University*  
*4 Svobody Sq., Kharkov, 61077, Ukraine*

<sup>3</sup>*NTU „Kharkov Polytechnic Institute”*

*21 Frunze St., Kharkov, 61145, Ukraine*

*e-mail: [march@kipt.kharkov.ua](mailto:march@kipt.kharkov.ua)*

Received June 17, 2015

This scientific paper studies the abnormal diffusion of particles in spatially periodic structures exposed to the action of time –periodic rectangular fields. A choice of such a type of the field is related to the need of finding out physical reasons for an increase in the diffusion coefficient at different field amplitudes. As for the impact on the diffusion coefficient the entire eventual amplitude range was divided into three domains whose functional behavior of the diffusion coefficient differs with a change in temperature. It has been shown that the maximum increase in the diffusion can be reached only in the narrow amplitude range of the external periodic force defined by system dissipative properties. This range shows abnormal temperature relationship of the diffusion coefficient, in particular its exponential growth with a drop in temperature. A physical reason for such an abnormal increase in diffusion can be the availability of two populations of particles: “localized” and “running”. An optimal choice of the amplitude of the external field provides long jumps of running particles in comparison with localized ones. The amplification ratio of the diffusion can significantly be changed through the variation of the frequency and amplitude of the external field. This offers the challenge for new technological applications of studied effects.

**KEY WORDS:** diffusion, computer simulation, periodic structures, Langevin equation, time-periodic fields

## УСКОРЕНИЕ ДИФФУЗИИ ЧАСТИЦ В ПРОСТРАНСТВЕННО-ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ПРЯМОУГОЛЬНОГО ПЕРИОДИЧЕСКОГО ВО ВРЕМЕНИ ПОЛЯ

**И.Г. Марченко<sup>1,2</sup>, И.И. Марченко<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»*

*ул. Академическая 1, г. Харьков 61108, Украина*

<sup>2</sup>*Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина*

*пл. Свободы 4, г. Харьков, 61077, Украина*

<sup>3</sup>*НТУ «Харьковский политехнический институт»*

*ул. Фрунзе 21, г. Харьков 61145, Украина*

В работе исследована аномальная диффузия частиц в пространственно-периодических структурах под воздействием периодического во времени прямоугольного поля. Такой выбор поля связан с необходимостью выяснения физических причин усиления коэффициента диффузии при различных амплитудах поля. По воздействию на коэффициент диффузии весь возможный диапазон амплитуд разбивается на три области, различающиеся функциональным поведением коэффициента диффузии с температурой. Показано, что максимального усиления диффузии можно достичь лишь в узком диапазоне амплитуд внешней периодической силы, определяемом диссипативными свойствами системы. В этом диапазоне наблюдается аномальная температурная зависимость коэффициента диффузии: его экспоненциальный рост с понижением температуры. Физической причиной такого аномального роста диффузии является одновременное существование двух популяций частиц: “локализованных” и “бегущих”. При оптимальном выборе амплитуды внешнего поля осуществляются длинные прыжки бегущих частиц относительно локализованных. Степень усиления диффузии может быть существенным образом изменена вариацией амплитуды и частоты внешнего поля. Это открывает перспективы новых технологических применений исследованного явления.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** диффузия, компьютерное моделирование, периодические структуры, уравнения Ланжевена, периодические поля

## ПРИСКОРЕННЯ ДИФУЗІЇ ЧАСТОК У ПРОСТОРОВО-ПЕРІОДИЧНИХ СТРУКТУРАХ ПІД ДІЄЮ ПЕРІОДИЧНОГО У ЧАСІ ПРЯМОКУТНОГО ПОЛЯ

**І.Г. Марченко<sup>1,2</sup>, І.І. Марченко<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»*

*вул. Академічна 1, м. Харків 61108, Україна*

<sup>2</sup>*Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна*

*пл. Свободи 4, м. Харків, 61077, Україна*

<sup>3</sup>*НТУ «Харківський політехнічний інститут»*

*вул. Фрунзе 21, м. Харків 61145, Україна*

У роботі досліджена аномальна дифузія частинок у просторово-періодичних структурах під дією періодичного у часі прямокутного поля. Такий вибір поля пов'язаний з необхідністю вивчення фізичних причин посилення коефіцієнту дифузії при різних амплітудах поля. По дії на коефіцієнт дифузії весь діапазон амплітуд можна поділити на три області, які відрізняються функціональною поведінкою коефіцієнту дифузії із температурою. Показано, що максимальне посилення дифузії можна очікувати тільки у вузькому діапазоні зовнішніх періодичних сил, який визначається дисипативними властивостями системи. У цьому діапазоні спостерігається аномальна температурна залежність коефіцієнту дифузії: його експоненціальне зростання із падінням температури. Фізичною причиною такого аномального росту дифузії є одночасне існування двох популяцій частинок: "локалізованих" та "рухаючихся". При оптимальному виборі амплітуди зовнішнього поля "рухаючихся" частинки здійснюють довгі стрибки відносно "локалізованих". Ступень підсилення дифузії може бути істотно змінена за рахунок варіації амплітуди та частоти зовнішнього поля. Це відкриває перспективи нових технологічних застосувань цього явища.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** дифузія, комп'ютерне моделювання, періодичні структури, рівняння Ланжевена, періодичні поля

Диффузия и транспорт частиц в пространственно-периодических потенциалах интенсивно изучаются в последние десятилетия [1-4]. Интерес к этим процессам связан с широким кругом физических систем, которые могут быть описаны как движение частиц в наклонных периодических потенциалах (washboard potentials). К таким системам относятся контакты Джозефсона, суперионные проводники, волны зарядовой плотности, системы фазовой автоподстройки частоты и пр. [5]. Исследование особенностей транспорта атомов, точечных и линейных дефектов кристаллической решетки во внешних полях так же представляются чрезвычайно важными для развития новых технологий в физике твердого тела.

В работе [6] было показано, что воздействием внешнего периодического во времени поля можно значительно усилить диффузию частиц в пространственно-периодических структурах. Более того, в определенном интервале частот наблюдалась аномальная температурная зависимость диффузии – рост коэффициента диффузии с понижением температуры. Это исследование проводилось для одного фиксированного значения амплитуды внешнего поля. Вместе с тем в работе [7], исследуя диффузию в наклонных периодических потенциалах, было установлено, что в зависимости от величины внешнего поля существуют области как обычной, так и аномальной температурной зависимости коэффициента диффузии.

Целью данной работы являлось детальное исследование амплитудной и частотной зависимостей усиления диффузии в периодических полях, а так же установление физических причин, обуславливающих ее аномальную температурную зависимость.

#### МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Движение частицы на одномерной решетке под действием внешней силы  $F_t$  описывалось уравнением Ланжевена:

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial}{\partial x}U(x) - \gamma\dot{x} + F_t(t) + \xi(t), \quad (1)$$

где  $t$  - время,  $x$  – координата частицы в одномерной решетке,  $m$  - ее масса,  $\gamma$  - коэффициент трения. Точка сверху означает дифференцирование по времени. Член  $\xi(t)$  описывает термические флуктуации. Предполагается, что шум является гауссовым белым и соответственно для термических флуктуаций выполняется соотношение:

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\gamma kT \delta(t-t'), \quad (2)$$

где  $k$  - постоянная Больцмана,  $T$  - температура.

В простейшем случае потенциальная энергия частицы  $U$  в поле кристаллической решетки может быть записана следующим образом :

$$U(x) = -\frac{U_0}{2} \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right), \quad (3)$$

где  $a$  - постоянная решетки, а  $U_0$  - высота потенциального барьера.

На движущуюся частицу действует периодическая сила со стороны кристаллической решетки  $F_{lat}$  :

$$F^{Lat} = -\frac{\partial U}{\partial x} = F_{cr} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right). \quad (4)$$

Величина  $F_{cr} = \frac{\pi}{a}U_0$ , называемая критической силой [8] и соответствует минимальной действующей силе, необходимой для преодоления в вязкой среде энергетического барьера, разделяющего два соседних положения частицы на одномерной решетке. Параметры используемого пространственно-периодического потенциала были теми же, что и в работах [6,7].

В работе исследовалось внешнее периодическое поле следующего вида:

$$F_t(t) = F_0 \text{sign}\{\sin(\omega t)\}, \quad (5)$$

где  $\omega$  - угловая частота внешней силы, а  $F_0$  - ее амплитуда. Его вид изображен на рис. 1 сплошной линией.

Стохастические уравнения (1)-(2) для каждой частицы решались численно методом Эйлера [9] с шагом по времени составляющим менее 0,01 периода собственных малых колебаний. Статистическое усреднение проводилось по ансамблю с количеством частиц не менее  $N = 5 \cdot 10^4$ . Для проверки полученных результатов отдельные вычисления проводились с  $N = 5 \cdot 10^6$ . Начальные условия задавались следующим образом. Частица помещалась в начале координат и ей случайным образом сообщалась скорость, имеющая Максвелловское распределение по температуре. Затем проводилась термализация системы в течение  $10^4$  временных шагов. После чего частица с имеющейся скоростью перемещалась в первую элементарную ячейку.

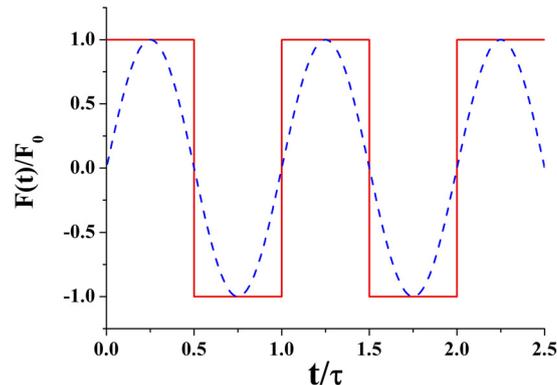


Рис. 1. Вид внешнего периодического во времени поля используемого в данном исследовании: сплошная линия – периодическая ступенчатая функция, штриховая – синусоидальная функция.

При анализе результатов моделирования удобно перейти к безразмерным величинам времени  $t'$  и расстояния  $x'$  [4,8]:

$$t' = t \frac{1}{a} \sqrt{\frac{U_0}{m}}; \quad x' = \frac{x}{a}; \quad (6)$$

Для сопоставления данных полученных в данной работе с данными других авторов использовались безразмерные величины температуры  $T'$  и трения  $\gamma'$  [4,10].

$$T' = \frac{Tk}{U_0}; \quad \gamma' = \frac{\gamma a}{(mU_0)^{1/2}}. \quad (7)$$

В работе изучалось недодемпфированное движение частиц. Значение коэффициента трения  $\gamma' = 0,14$  соответствовало использованному в ранее проведенных исследованиях [7].

Коэффициент диффузии вычислялся по дисперсии  $\sigma^2$  в распределении ансамбля движущихся частиц при стремлении времени к бесконечности:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} D_{ef}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}{2t} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sigma^2}{2t} \quad (8)$$

где скобки  $\langle \dots \rangle$  обозначают усреднение по ансамблю.

При каждом расчете коэффициента диффузии определялось время  $t_{lin}$  достижения линейной зависимости дисперсии от времени. Коэффициент диффузии определялся при времени  $t > 100t_{lin}$ .

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Ранее в работе [6] было показано, что при воздействии на частицы постоянной внешней силы, в зависимости от ее величины, могут реализовываться функционально различные температурные зависимости коэффициента диффузии. Результаты этих исследований приведены на рис. 2. Из рисунка видно, что существует три области (I- III) различающихся поведением коэффициента диффузии  $D$  с температурой. В первой области диффузия усиливается с ростом приложенной силы, а в области III – падает. Однако, в то время

как в областях I и III коэффициент диффузии возрастает с ростом температуры, в области II (на рисунке выделена штриховкой) он растет с понижением температуры. Причем этот аномальный рост коэффициента диффузии имеет экспоненциальную зависимость [6]. В то же время в работе [7], было установлено, что при воздействии на частицу периодической во времени силы так же наблюдается аномальная температурная зависимость. Однако такая зависимость наблюдалась только в определенном интервале частот. В работе [7] исследования проводились при амплитуде внешней силы  $F_0 = 0,15F_{cr}$ . То есть амплитуда  $F_0$  лежала в области III, в которой при воздействии постоянной силы аномальная температурная зависимость не наблюдалась.

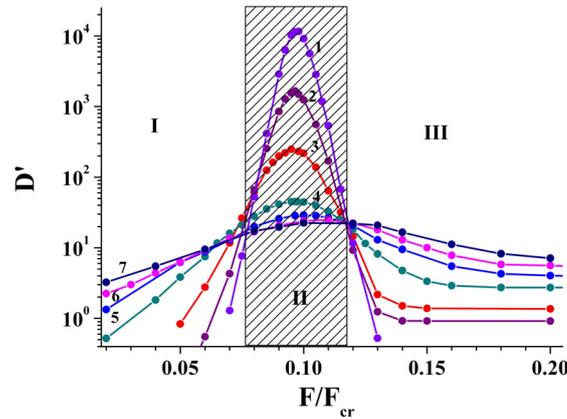


Рис. 2. Зависимость безразмерного коэффициента диффузии от величины действующей силы для различных температур. Область аномальной температурной зависимости (II) заштрихована. Коэффициент трения  $\gamma' = 0,141$ . 1 -  $T=90\text{K}$  ( $T' = 0,097$ ), 2 -  $T=120\text{K}$  ( $T' = 0,129$ ), 3 -  $T=180\text{K}$  ( $T' = 0,194$ ), 4 -  $T=360\text{K}$  ( $T' = 0,388$ ), 5 -  $T=540\text{K}$  ( $T' = 0,582$ ), 6 -  $T=720\text{K}$  ( $T' = 0,776$ ), 7 -  $T=900\text{K}$  ( $T' = 0,969$ ).

Для выяснения физических причин аномальной температурной зависимости диффузии в этих двух различных случаях рассмотрим движение частиц под воздействием внешнего периодического поля. При прямоугольной форме временной зависимости внешнего поля (рис.1), можно на интервале, соответствующем полупериоду колебаний, использовать полученные ранее данные по особенностям диффузии в постоянном силовом поле. Выберем амплитуды, относящиеся к различным областям диаграммы, приведенной на рис.2, и исследуем изменение диффузии с понижением частоты. Интуитивно понятно, что при  $\omega \rightarrow 0$  решение для периодического поля должно совпадать со случаем постоянного во времени поля.

На рис. 3 в двойном логарифмическом масштабе показано изменение дисперсии частиц во времени при воздействии внешнего поля с амплитудой, лежащей в области I диаграммы. Различным кривым соответствуют различные частоты. Кривая 4 на рисунке отвечает данным полученным при воздействии постоянной силой. Видно, что при частоте  $\omega = 10^{-3}$  кривая визуально сливается с графиком для случая постоянно действующей силы. В то же время, в области высоких частот, результаты различаются, и линейная зависимость дисперсии от времени наступает на значительно меньших временах, чем для случая воздействия постоянной силы.

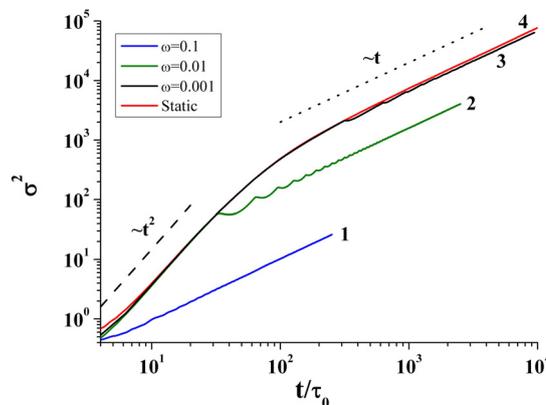


Рис. 3. Зависимость безразмерной дисперсии частиц от времени в области I для различных частот при внешнем воздействии периодической ступенчатой функции.

Амплитуда поля  $F_0 / F_{cr} = 0,06$ ,  $T=180$  ( $T' = 0,194$ )

1 -  $\omega = 10^{-1}$ , 2 -  $\omega = 10^{-2}$ , 3 -  $\omega = 10^{-3}$ , 4 -  $\omega = 0$  (постоянная сила).

Известно, что в системах, характеризующихся низким уровнем диссипации энергии, возможно возникновение особых режимов диффузии: так называемой субдиффузии, супердиффузии и гипердиффузии [11,12]. Обычная диффузия характеризуется линейной зависимостью среднеквадратичного отклонения координаты частиц  $x$  от времени  $t$ :

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \propto t. \quad (9)$$

В случае реализации особых режимов диффузии эта зависимость изменяется:

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \propto t^n. \quad (10)$$

При  $n < 1$  говорят о субдиффузии, при  $1 < n < 2$  - о супердиффузии, а при  $n > 2$  - о гипердиффузии [11]. Случай  $n = 2$  носит название баллистической диффузии.

Из рис. 3 видно, что под воздействием постоянной силы на начальном этапе (до  $t = 10^2$ ) дисперсия растет нелинейно как  $\sigma^2 \propto t^2$ . То есть в ограниченном интервале времени наблюдается режим баллистической диффузии. Как показали предыдущие исследования, по окончании фазы ускоренной диффузии устанавливается стационарное распределение частиц по скоростям, которое в дальнейшем не изменяется. Как хорошо видно из рисунка, по прошествии этого времени пространственная дисперсия в распределении частиц описывается стандартным выражением  $\sigma^2 \propto t$ .

Кривые 1-3 на рис. 3 соответствуют различным частотам воздействия внешнего поля. Кривая 1 соответствует самой высокой представленной на рисунке частоте. И как видно из рисунка, соответствующий коэффициент диффузии – самый низкий. Понижение частоты приводит к возрастанию коэффициента диффузии. Из рис. 3 видно, что чем больше период колебаний, тем большее время частица проводит в режиме супердиффузии. И соответственно тем выше коэффициент диффузии.

Как следует из рис. 3 линейная зависимость, характерная для обычной диффузии, устанавливается по прошествии времени соответствующего двум периодам колебаний внешнего поля. При этом кривые, соответствующие различным частотам, до этого момента времени совпадают с графиком при постоянно действующей силе. Однако, начиная с достигнутого на стадии ускоренной диффузии значения  $\sigma^2$ , устанавливается фаза обычной диффузии, характеризующееся зависимостью  $\sigma^2 \propto t$ . Когда период колебаний  $\tau$  сравнивается с длительностью фазы баллистической диффузии, дальнейшее увеличение  $\tau$  мало влияет на величину  $D$ . Таким образом, максимально достижимый коэффициент диффузии в области I соответствует значению  $D$  для постоянного поля. Этот вывод хорошо демонстрирует рис. 4.

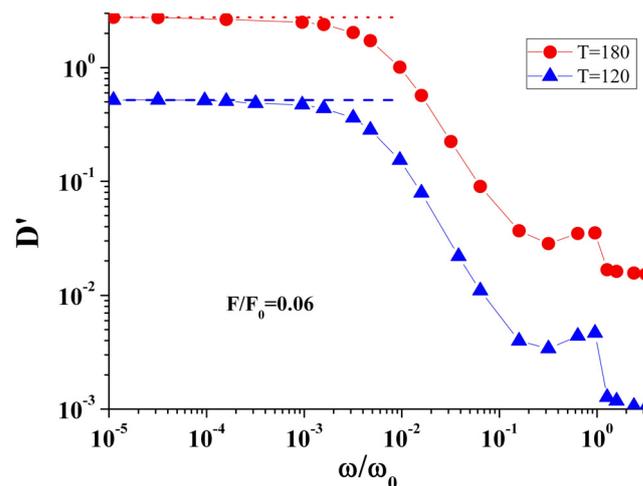


Рис. 4. Зависимость коэффициента диффузии  $D$  от частоты внешнего поля для различных температур при фиксированной амплитуде внешнего поля  $F_0 / F_{cr} = 0,06$  (область I). 1 –  $T=120\text{K}$  ( $T' = 0,13$ ), 2 –  $T=180\text{K}$  ( $T' = 0,194$ ). Штриховой и пунктирной линией отмечено значения коэффициента диффузии при постоянно действующей силе.

На рисунке приведены частотные зависимости коэффициента  $D(\omega)$  для двух температур. Штриховой и пунктирной линиями показаны значения коэффициента диффузии для случая постоянно действующей силы. Видно, что при низких частотах коэффициент диффузии выходит на плато, высота которого соответствует

значению при постоянно действующей силе. При высоких же частотах он степенным образом уменьшается с повышением частоты. В области частот, соответствующей собственной частоте колебаний, наблюдается небольшое резонансное повышение коэффициента диффузии. Из рис. 4 видно, что в области I диаграммы для переменного поля, так же как и для случая постоянного поля, во всем диапазоне частот более высокой температуре соответствует большее значение коэффициента диффузии. То есть наблюдается обычная температурная зависимость диффузии.

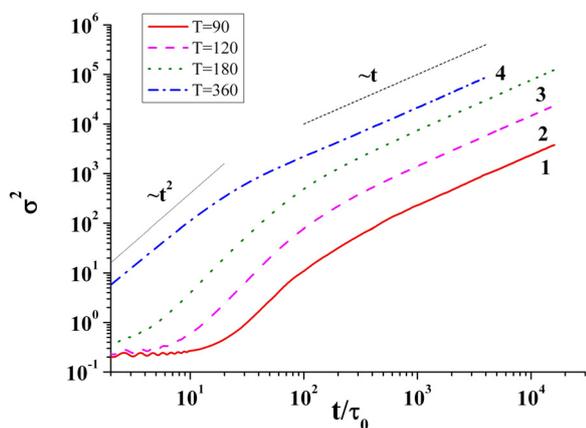


Рис. 5. Зависимость безразмерной дисперсии частиц от времени в постоянном поле ( $\omega = 0$ ) для различных температур. Амплитуда поля  $F_0 / F_{cr} = 0,06$  (область I).

1 –  $T=90$  ( $T' = 0,097$ ), 2 –  $T=120$  ( $T' = 0,129$ ), 3 –  $T=180$  ( $T' = 0,194$ ), 4 –  $T=360$  ( $T' = 0,388$ ).

На рис. 5 приведены зависимости  $\sigma^2(t)$  в области I для различных температур при  $\omega = 0$ . Как следует из рисунка, во всем рассмотренном температурном диапазоне, более высоким температурам соответствует большее значение коэффициента диффузии.

Однако в области II ситуация изменяется. Это хорошо видно из рис. 6. Здесь меньшим значениям температуры соответствует большее значение коэффициента диффузии. Из рисунка видно, что чем ниже температура, тем большее время требуется для выхода дисперсии на линейную зависимость. Воздействие внешним периодическим полем в области II диаграммы, так же как и для области I приводит к ограничению фазы гипердиффузии во времени, и, соответственно, к уменьшению коэффициента диффузии. Эта тенденция хорошо видна на рис. 7. Аналогично с поведением дисперсии в области I, уменьшение частоты в области II приводит к возрастанию коэффициента диффузии. Однако в отличие от случая малых амплитуд колебаний внешнего поля, в этой области наблюдается аномальная температурная зависимость.

Как следует из графиков, так же как и в области I, в области II коэффициент диффузии на больших временах стремится к коэффициенту диффузии для постоянной силы. При воздействии постоянного поля в этом интервале амплитуд реализуется аномальная температурная диффузия, связанная с экспоненциальным ростом времени корреляции с понижением температуры [6]. Поэтому при периоде колебаний превышающем время фазы гипердиффузии, коэффициент  $D(\omega)$  экспоненциально растет с понижением температуры. Физической причиной такого роста является то, что частицы совершают все более длинные скачки с понижением температуры. Для перехода “бегущих” частиц в локализованное состояние необходима флуктуация энергии достаточная для уменьшения скорости ниже критического значения. С падением температуры вероятность такого процесса падает и соответственно частица проходит все большее расстояние со скоростью стационарного движения в вязкой среде под действием постоянной силы.

На рис. 8 приведены графики зависимости коэффициента диффузии от частоты для двух различных температур – 120 и 180 К. Так же как и для случая, приведенного на рис. 4, коэффициент диффузии выходит на насыщение и соответствует значению D для постоянно действующей силы. Однако, в отличие от области I, в области II при частотах  $\omega < 10^{-3} \omega_0$  более низким температурам соответствует более высокий коэффициент диффузии. Таким образом, при низких частотах наблюдается аномальная температурная зависимость коэффициента диффузии.

В области же высоких частот по-прежнему более высокой температуре соответствует и больший коэффициент диффузии. При этом увеличение частоты приводит к ослаблению диффузии. При частотах выше собственной частоты колебаний коэффициент диффузии становится равным коэффициенту диффузии

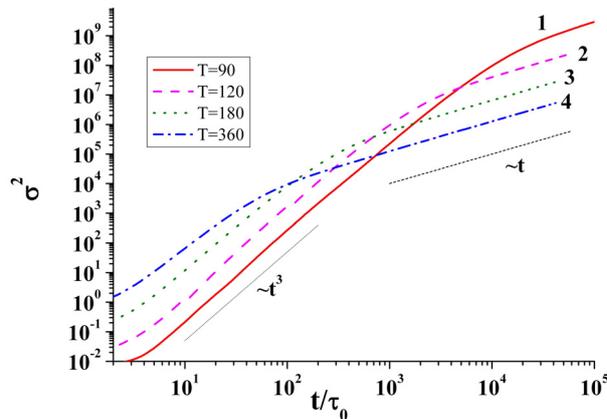


Рис. 6. Зависимость безразмерной дисперсии частиц от времени в постоянном поле для различных температур. Амплитуда поля  $F_0 / F_{cr} = 0,095$  (область II).

1 –  $T=90$  ( $T' = 0,097$ ), 2 –  $T=120$  ( $T' = 0,129$ ), 3 –  $T=180$  ( $T' = 0,194$ ), 4 –  $T=360$  ( $T' = 0,388$ ).

свободных частиц в периодическом потенциале.

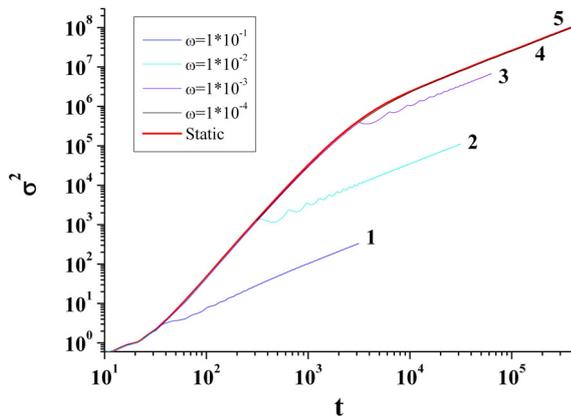


Рис. 7. Зависимость безразмерной дисперсии частиц от времени.

1 -  $\omega = 10^{-1}$ , 2 -  $\omega = 10^{-2}$ , 3 -  $\omega = 10^{-3}$ , 4 -  $\omega = 10^{-4}$ , 5 -  $\omega = 0$  (постоянная сила).

Амплитуда поля  $F_0 / F_{cr} = 0,095$  (область III).

$T = 180\text{K}$  ( $T' = 0,194$ ).

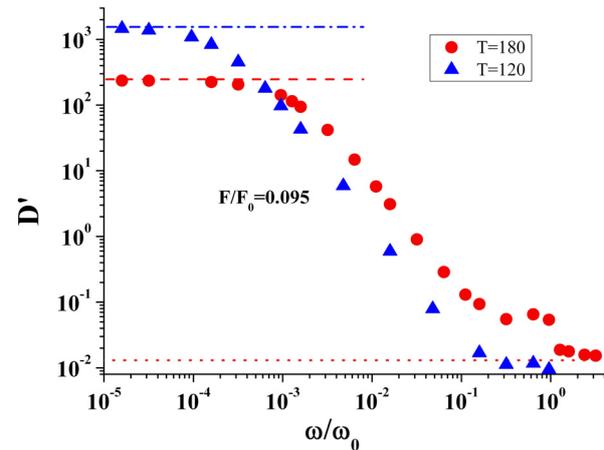


Рис. 8. Зависимость коэффициента диффузии от частоты внешнего поля для различных температур при фиксированной амплитуде внешнего поля  $F_0 / F_{cr} = 0,095$  (область II)

1 -  $T = 120\text{K}$  ( $T' = 0,129$ ), 2 -  $T = 180\text{K}$  ( $T' = 0,194$ ). Штриховой и штрих-пунктирной линией отмечено значения коэффициентов диффузии при постоянно действующей силе, а пунктирной – значение в отсутствие внешней силы.

Таким образом, аномальная температурная зависимость диффузии наблюдается только в области низких частот. При этом при фиксированной температуре с уменьшением частоты величина  $D$  стремится к своему максимальному значению. В то же время как было показано ранее в [7,13] для синусоидального внешнего воздействия в области III частотная зависимость имеет максимум. Такая же зависимость получена в данной работе и для ступенчатого периодического внешнего воздействия. На рис. 9 приведены частотные зависимости коэффициента диффузии для различных температур. Все кривые на рисунке имеют максимум. Причем с понижением температуры этот максимум смещается в область низких температур. Видно, что чем меньше температура, тем большее значение коэффициент диффузии имеет в максимуме. При этом существует частотный интервал аномальной температурной зависимости диффузии. Как следует из рис. 9 при частотах выше  $\omega \approx 2 \cdot 10^{-2} \omega_0$  наблюдается обычная температурная зависимость. В то же время при достаточно низких частотах коэффициент диффузии, так же как и в областях I и II, выходит на значение  $D$  для системы частиц подвергающейся воздействию постоянной силы. Это хорошо видно из графика для  $T = 480$ .

Для понимания физической причины возникновения максимума по частоте в области сути III обратимся к рис. 10. На рисунке (аналогично рис. 3,7) приведены зависимости дисперсии от времени для различных частот колебаний. Как следует из рисунка, линейная зависимость, характерная для обычной диффузии, устанавливается по прошествии времени соответствующего двум периодам колебаний поля. При этом кривые, соответствующие различным частотам, до этого момента времени совпадают с графиком при постоянно действующей силе. Однако, функциональная зависимость  $\sigma^2(t)$  в области III отличается от рассмотренных в областях I и II. Под воздействием постоянной силы дисперсия  $\sigma^2$  на начальном этапе растет как  $\sigma^2 \propto t^3$ . Фаза гипердиффузии продолжается до времени  $t \approx 2 \cdot 10^2 \tau_0$ . По его окончанию устанавливается стационарное распределение частиц по скоростям, которое в дальнейшем не изменяется. В то же время распределение частиц по координатам – сильно неравновесное. Оно имеет экспоненциальный вид [8].

Установление стационарного вида распределения частиц по координатам характеризуется почти неизменной во времени дисперсией. Это так называемая “dispersionless” фаза [8]. После ее завершения формируется стационарный вид функции распределения частиц по координатам, имеющий стандартный гауссов вид. В дальнейшем устанавливается зависимость  $\sigma^2 \propto t$  характерная для обычной диффузии.

При приложении внешнего периодического поля частотные кривые “следуют” графику при постоянной силе до времени одного периода колебания, а затем, начиная с достигнутого значения  $\sigma^2$ , устанавливается фаза обычной диффузии, характеризующаяся зависимостью  $\sigma^2 \propto t$ . Как следует из графиков, на больших временах коэффициент диффузии стремится к коэффициенту диффузии для постоянной силы.

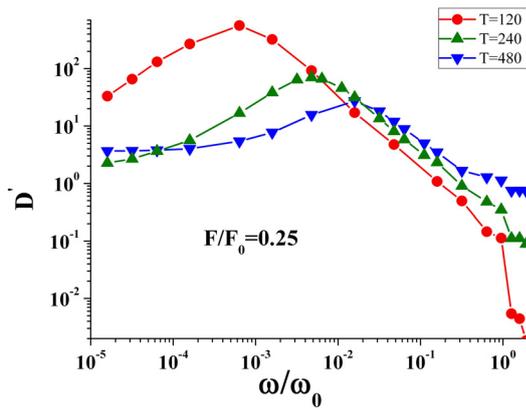


Рис. 9. Зависимость коэффициента диффузии от частоты внешнего поля для различных температур при фиксированной амплитуде внешнего поля

$$F_0 / F_{cr} = 0,25 \text{ (область III).}$$

1 – T=120K ( $T' = 0,129$ ), 2 - T=240K ( $T' = 0,258$ ), 3 - T=480K ( $T' = 0,516$ ).

Таким образом, рост коэффициента диффузии с увеличением периода внешних колебаний связан с эффективным использованием фазы гипердиффузии. Поэтому с уменьшением частоты коэффициент диффузии растет, так как частицы большее время находятся в режиме гипердиффузии. Максимум наблюдается, когда период колебаний близок к протяженности во времени режима гипердиффузии. Однако дальнейшее увеличение периода колебаний приводит к тому, что частицы большее время будут уже оказываться в режиме субдиффузии с практически неизменной во времени дисперсией. Соответственно с уменьшением частоты будет падать и коэффициент диффузии. И наконец, на больших временах колебаний устанавливается коэффициент диффузии характерный для постоянно действующего поля.

Как следует из приведенного выше рассмотрения, максимальный коэффициент диффузии будет наблюдаться при частоте, период колебания которой соответствует длительности фазы гипердиффузии. При  $\omega \rightarrow 0$  коэффициент диффузии стремится к его значению при постоянно действующей силе. При  $\omega > \omega_0$  устанавливается значение коэффициента диффузии частиц в отсутствие внешнего воздействия.

Подытоживая рассмотрение диффузии частиц в пространственно-периодических структурах при воздействии на них периодического во времени силового поля, можно сказать, что основным фактором усиления диффузии является амплитуда внешнего воздействия. Коэффициент диффузии может неограниченно возрастать с понижением температуры при приложении периодической силы, амплитуда которой лежит в достаточно узком интервале значений. Величина такой амплитуды и ширина интервала определяется безразмерной величиной, характеризующей степень диссипации энергии в системе. При низких частотах величина коэффициента диффузии для периодического поля совпадает с таковой для случая воздействия постоянной силы. При высоких частотах наблюдается степенное падение коэффициента диффузии с частотой. И при частотах превышающих частоту собственных колебаний коэффициент диффузии равен таковому в отсутствие внешнего воздействия.

Физической причиной усиления диффузии является существование двух популяций частиц: “локализованных” и “бегущих” [5,14]. При оптимальном выборе амплитуды осуществляются длинные прыжки бегущих частиц относительно локализованных. Уменьшение температуры приводит к удлинению таких прыжков. Соответственно возрастает и коэффициент диффузии.

Таким образом, максимальное увеличение  $D'$  происходит, когда период колебаний внешнего поля совпадает с длительностью фазой ускоренной диффузии (баллистической, супер- или гипердиффузии) При амплитудах поля лежащих в области III дальнейшее увеличение периода колебаний приводит к уменьшению коэффициента диффузии, а в областях I и II – к выходу на постоянное значение, не зависящее от частоты. Само разбиение действующей силы на области I- III зависит от коэффициента трения. Ранее в работе [14] было показано, что движение ансамбля частиц под действием постоянной силы может быть сведено к задаче движения частиц в эффективном потенциале скоростей  $W(V)$ . Вид потенциала зависит от коэффициента трения, массы частиц и действующей силы. Граница области I/II соответствует силе, при которой в пространстве скоростей вместо одноямыного потенциала с минимумом при  $V = 0$ , возникает двухъямный потенциал с дополнительным минимумом при  $V = F/\gamma$ . Граница области II/III возникает при значении силы,

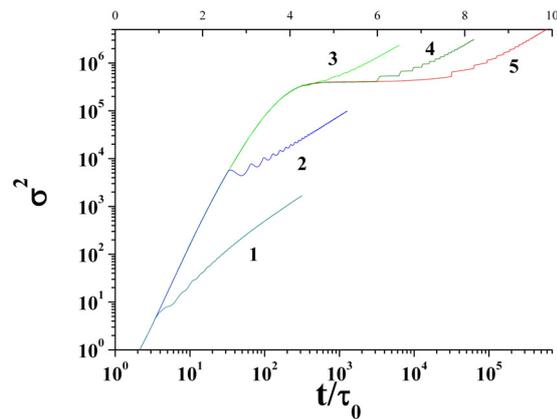


Рис. 10. Зависимость безразмерной дисперсии частиц от времени. Амплитуда поля  $F_0 / F_{cr} = 0,25$  (область III), T=180 ( $T' = 0,194$ ).

1 -  $\omega = 10^{-1}$ , 2 -  $\omega = 10^{-2}$ , 3 -  $\omega = 10^{-3}$ , 4 -  $\omega = 10^{-4}$ , 5 -  $\omega = 0$  (постоянная сила).

при которой двухъямный потенциал трансформируется в одноямный, за счет исчезновения ветви с минимумом при  $V = 0$ . Значения соответствующих критических сил, при которых происходит трансформация потенциала, могут быть рассчитаны по алгоритмам предложенным в работе [14].

Исследуемые эффекты допускают простую экспериментальную проверку. Самым прямым методом проверки является исследование диффузии по поверхности твердого тела. Такие системы характеризуются низким уровнем диссипации [15,16]. Исследуя диффузию магнитных частиц на немагнитной подложке под воздействием электромагнитных полей можно установить аномальный характер температурной зависимости диффузии. Прямым подтверждением аномальной диффузии стал бы усиленный рост островковых зародышей новой фазы с понижением температуры.

Будучи экспериментально установленным, эффект аномального усиления диффузии может быть использован в целом ряде технологий связанных с физикой твердого тела.

### ВЫВОДЫ

В работе исследована аномальная диффузия частиц в пространственно-периодических структурах под воздействием периодических во времени полей. Изучено влияние ступенчатого периодического поля. Показано, что при низких частотах экспоненциальное усиление диффузии с уменьшением температуры возможно только в узком интервале амплитуд приложенного поля. Конкретное значение амплитуды и ширина того интервала зависит от диссипативных свойств системы. Физической причиной усиления диффузии является существование двух популяций частиц: “локализованных” и “бегущих”. При оптимальном выборе амплитуды осуществляются длинные усеченные прыжки Леви бегущих частиц относительно локализованных. Уменьшение температуры приводит к удлинению таких прыжков. Соответственно возрастает коэффициент диффузии.

В низкочастотной области весь возможный диапазон амплитуд разбивается на три области, различающиеся функциональным поведением коэффициента диффузии с температурой. Показано что, коэффициент диффузии может возрастать на многие порядки при приложении внешнего поля. Степень усиления диффузии существенным образом зависит от температуры, амплитуды и частоты внешнего поля.

Исследований эффект может найти практическое применение в широком круге физических систем.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Costantini G., Marchesoni F. Threshold diffusion in a tilted washboard potential // *Europhys. Lett.* – 1999. – Vol.48. – P.491.
2. Hänggi P., Marchesoni F. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale // *Rev. Mod. Phys.* – 2009. – Vol. 81. – P. 337–442.
3. Sancho J.M., Lacasta A.M. The rich phenomenology of Brownian particles in nonlinear potential landscapes // *Eur. Phys. J. Special Topics.* – 2010.– Vol. 187.– P. 49–62.
4. Lacasta A.M., Sancho J.M., Romero A.H., Sokolov I.M., Lindenberg K. From subdiffusion to superdiffusion of particles on solid surfaces // *Phys. Rev.* – 2004. – Vol. E70. – P. 051104.
5. Risken H. *The Fokker-Planck Equation and Methods of Solution and Applications* (Springer) 1989.
6. Marchenko I.G., Marchenko I.I. Diffusion in the systems with low dissipation: Exponential growth with temperature drop // *Europhysics Letters.* – 2012. – Vol. 100. – P. 5005.
7. Marchenko I.G., Marchenko I.I. Anomalous temperature dependence of diffusion in crystals in time-periodic external fields // *JETP Letters.* – 2012. – Vol. 95, No. 3. – P. 137–142.
8. Lindenberg K., Sancho J.M., Lacasta A. M., Sokolov I.M. Dispersionless Transport in a Washboard Potential // *Phys. Rev. Let.* – 2007. – Vol. 98. – P. 020602. (4 pp.)
9. Кузнецов Д.Ф. Стохастические дифференциальные уравнения: теория и практика численного решения.– Санкт-Петербург: Из-во Политех. ун-та, 2007. – 800 с.
10. Sancho J.M., Lacasta A.M., Lindenberg K., Sokolov I.M., Romero A.H. Diffusion on a Solid Surface: Anomalous is Normal // *Phys. Rev. Let.* – 2004. – Vol. 92. – P. 250601. (4 pp.)
11. Siegle P., Goychuk I., Hanggi P. Origin of Hyperdiffusion in Generalized Brownian Motion // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. – Vol.105. – P.100602 (4 pp.)
12. Зеленый Л.М., Милованов А.В. Фрактальная топология и странная кинетика: от теории перколяции к проблемам космической электродинамики // *УФН.* – 2004. – Т. 174. – No.8. – С. 809–852.
13. Marchenko I.G., Marchenko I.I. Abnormal surface diffusion of particles under the action of an external time-periodic force// *Journal of Physics: Conf. Ser.*– 2014.– Vol. 514. – P. 012045 (1–5).
14. Marchenko I.G., Marchenko I.I. Particle transport in space-periodic potentials in under-damped systems// *European Physical Journal B.* – 2014.– Vol. 87.– P. 10 (7 pp.).
15. Bruch L.W., Diehl R.D., Venables J.A. Progress in the measurement and modeling of physisorbed layers // *Rev. Mod. Phys.*– 2007.– Vol. 79.– P. 1381– 1454.
16. Krim J. Friction and energy dissipation mechanisms in adsorbed molecules and molecularly thin films // *Advances in Physics.*– 2012.– Vol. 61. – No. 3.– P. 155–323.

PACS: 73.90.+f

## SPECTRA OF ZnO SUPERDISPERSED PARTICLES POLARIZED IN AN ELECTRIC FIELD

V.I. Tyutyunnikov

*Pryazovskyi State Technical University  
Mariupol, St. Universitetskaya, 7, 87500, Ukraine  
e-mail: [vladimir-tjutunnikov@rambler.ru](mailto:vladimir-tjutunnikov@rambler.ru)*

Received October 10, 2015

This paper discusses the spectra of photo - and ion-luminescence (PL and IL) of ultrafine crystals (UDC) ZnO deposited on the substrate in an electric field. UDC ZnO was obtained by separation in a water emulsion industrial phosphor (K-56). The fluorescence spectra for initial sample have a relatively intense broad band in the visible region, which during the deposition of the initial sample in electric field becomes less intense. PL spectra for ZnO UDC have weak intensity bands in the visible region. And UDC PL spectra for ZnO deposited in an electric field, and do not have this band. While this exciton band with  $\lambda_{\max}=401\text{nm}$  for all the samples remains almost unchanged. When exposed to samples of oxygen ions spectra were obtained ionoluminescence, which differ from the fluorescence spectra. The analysis of the spectral characteristics obtained under the influence of ions sour-kind of the ZnO crystals shows that the intensity of the broad band in the visible region responsible for the defects formed by oxygen ions.

**KEYWORDS:** spectrum, photoluminescence, ionoluminescence, electric field, and ultrafine crystals

### СПЕКТРЫ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ ZnO ПОЛЯРИЗОВАННЫХ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Тютюнный В.И.

*Приазовский государственный технический университет  
г. Мариуполь, ул. Университетская, 7, 87500, Украина*

В данной работе рассматриваются спектры фото- и ионо-люминесценции (ФЛ и ИЛ) ультрадисперсных кристаллов (УДК) ZnO, осажденных на подложку в электрическом поле. УДК ZnO получали путём разделения на фракции в водной эмульсии промышленного люминофора (К-56). Спектры ФЛ для исходного образца имеют довольно интенсивную широкую полосу в видимой области, которая при осаждении исходного образца в электрическом поле, становится менее интенсивной. Спектры ФЛ для УДК ZnO имеют слабую интенсивность полосы в видимой области. А спектры ФЛ для УДК ZnO, осажденных в электрическом поле, практически не имеют этой полосы. При этом экситонная полоса с  $\lambda_{\max}=401\text{nm}$  для всех образцов остаётся практически неизменной. При воздействии на образцы ионами кислорода были получены спектры ионолюминесценции, которые отличаются от спектров ФЛ. Анализ спектральных характеристик, полученных при воздействии ионами кислорода на кристаллы ZnO показывает, что за интенсивность широкой полосы в видимой области ответственны дефекты, образованные ионами кислорода.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** спектр, фотолуминесценция, ионолюминесценция, электрическое поле, ультрадисперсные кристаллы

### СПЕКТРИ УЛЬТРАДИСПЕРСНИХ ЧАСТИНОК ZnO ПОЛЯРИЗОВАНИХ В ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ

Тютюнный В.И.

*Приазовський державний технічний університет  
м. Маріуполь, вул. Університетська, 7, 87500, Україна*

В даній роботі розглядаються спектри фото - та іонолюмінесценції (ФЛ та ИЛ) ультрадисперсних кристалів (УДК) ZnO, осаджених на основу в електричному полі. УДК ZnO отримували шляхом поділу на фракції в водній емульсії промислового люмінофора (К-56). Спектри ФЛ для вихідного зразка мають досить таки інтенсивну широку смугу у видимій області, яка при осадженні вихідного зразка в електричному полі, стає менш інтенсивною. Спектри ФЛ для УДК ZnO мають слабку інтенсивність смуги у видимій області. А спектри ФЛ для УДК ZnO, осаджених в електричному полі, практично не мають цієї смуги. При цьому екситона смуга з  $\lambda_{\max}=401\text{nm}$  для всіх зразків залишається практично незмінною. При дії на зразки іонами кисню були отримані спектри іонолюмінесценції, які відрізняються від спектрів ФЛ. Аналіз спектральних характеристик, отриманих при впливі іонами кисню на кристали ZnO показує, що за інтенсивність широкої смуги у видимій області відповідальні дефекти, утворені іонами кисню.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** спектр, фотолумінесценція, іонолюмінесценція, електричне поле, ультрадисперсні кристали

На протяжении последних лет внимание различных исследовательских групп сосредоточено на исследовании ультрадисперсных структур на основе ZnO [1-4]. Оксид цинка является широкозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны 3,37 эВ. Из [5] следует, что ширина запрещенной зоны наночастиц ZnO зависит и от их величины. Энергия связи экситона в ZnO равна 63 мэВ, это значительно выше, чем у широко известного полупроводника GaN (26 мэВ). Рекомбинация экситонов в оксиде цинка при комнатной температуре обуславливает ультрафиолетовое излучение с длиной волны 380–390 нм. [6,7]. Таким образом, повышенный интерес к оксиду цинка связан с возможностью создания светоизлучающих устройств, работающих в ближнем ультрафиолетовом диапазоне [7-9].

В настоящее время разработано множество методов получения наночастиц, как в рамках традиционной для микроэлектроники технологий (электрохимическое травление, метод тонко регулируемой конденсации из газовой фазы), так и создание новых технологических приемов (детонационный синтез, золь-гель технология, механосинтез и другие) [10,11]. В этих работах подчёркивается, что метод получения ультрадисперсных систем (УДС) имеет значительно большее влияние на их свойства, чем в случае макроскопических материалов. В дополнение к физическим характеристикам макроскопического объекта УДС характеризуется дисперсией частиц по размерам и качеством поверхности, а эти параметры, в значительной мере определяющие физико-химические свойства такой системы, зависят в сильной степени от метода получения. Это приводит к большим вариациям экспериментальных данных, получаемых различными исследователями. Поэтому представляет интерес исследовать образцы, полученные определенным методом. Исследование свойств мелкодисперсных кристаллов ZnO, полученных с помощью различных методов, открывают новые перспективы применения этого вещества.

Помимо выше упомянутых свойств у ZnO есть такие преимущества перед прочими широко зонными материалами, как радиационная стойкость. Также, технология получения ZnO гораздо проще, что является залогом низкой стоимости устройств на его основе. Актуальной на сегодняшний день является одна из важнейших проблем кристаллизации это получение ориентированных мелкодисперсных систем на не ориентирующих подложках [12-14].

Цель данной работы заключается в исследовании оптических свойств мелкодисперсных систем осаждённых на не ориентированную подложку в электрическом поле.

### ЭКСПЕРИМЕНТ

Спектральные характеристики исследовались на установке, представленной на рис. 1. Экспериментальная установка позволяет изучать спектры ионнолюминесценции (ИЛ) и фотолюминесценции (ФЛ). Вакуумная часть установки состоит из рабочей камеры (1) и системы откачки. Предварительная откачка осуществлялась форвакуумным (6) и диффузионным (5) насосами. Вакуум контролировался термопарной и ионизационной лампами (11,12). Масляные ловушки (8,9) заливались жидким азотом, при этом пары из диффузионного и форвакуумного насосов конденсировались на стенках ловушек, что предотвращало попадание масла в рабочую камеру. При достижении вакуума в системе  $10^{-3}$  Па, форвакуумный и диффузионный насосы отсекались от рабочей камеры. Более глубокий безмасляный вакуум достигался окончательной откачкой блоком магниторазрядных насосов (НМДО-0.4 и НМДО-0.25) (7), общей производительностью 1050 л/с, что позволяло получить в рабочей камере вакуум не хуже  $10^{-5}$  Па. Давление в рабочей камере контролировалось при помощи вакуумметра ВМБ-14 с магнитоионизационным датчиком ПММ-32-1 (17), а масс-спектрометр МХ-7304 (16) позволяет контролировать состав газа в рабочей камере. Исследуемый образец (3) наносился на подложку (2). Нагревательный элемент (4) позволяет регулировать температуру образца от комнатной до 800 К, а медная шина, соединяющая подложку с криостатом, даёт возможность понижать температуру образца жидким азотом до 80 К. Спектры записывались с помощью монохроматора ЗМР-3 (обратная дисперсия в синей области спектра 0,5 нм/мм) (21). В качестве регистрирующего устройства использовали ФЭУ 84-3 (22). Сигнал с ФЭУ усиливался усилителем У-5-11 (25) и записывался на КСП-4 (26). Ионная пушка (18) обеспечивала плотность ионного тока до 3 мкА/см<sup>2</sup> и энергию ионов от 0,5 до 3,0 кэВ для возбуждения ИЛ. Диссоциация молекул газа в ионной пушке (18) происходила в поле высокочастотного разряда (40 МГц), создаваемого генератором УВЧ-66 (19). Для возбуждения ФЛ использовалась линия 365нм, которая выделялась светофильтром УФС-2 из светового потока лампы ДРШ-250 (23).

Микрофотографии образцов получали на электронном микроскопе- JSM-6390LV.

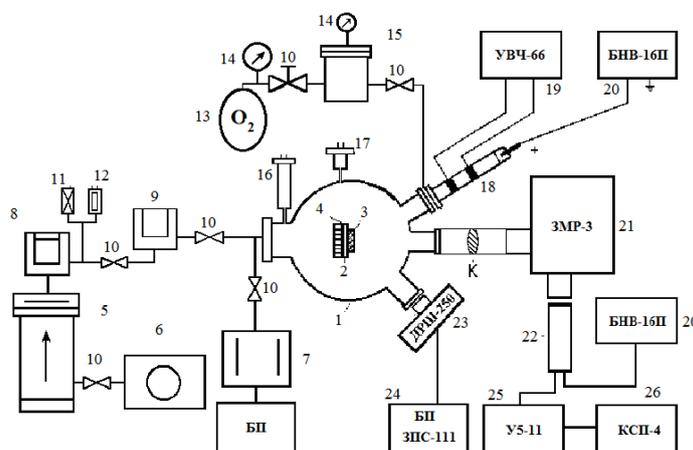


Рис.1. Основные узлы рабочей установки

Мелкодисперсные кристаллы ZnO-Zn получали путём разделения на фракции в коллоидном растворе промышленного люминофора К-56. Коллоидный раствор выдерживался в пробирке не менее одного месяца. После этого для исследований использовалась 1/3 раствора из верхней части пробирки. Анализ микрофотографии промышленного люминофора показывает, что размеры кристаллов находятся в пределах 500-10нм. Образцы для исследования наносились на подложку из нержавеющей стали в виде эмульсии ZnO водного раствора, затем вода удалялась путём выпаривания. Исследовались образцы ZnO, нанесенные на подложку, как обычным способом, так и в электрическом поле. Напряжённость электрического поля составляла  $10^5$  В/м. После чего образец помещался в рабочую камеру. Запись спектров производилась при комнатной температуре. Для сравнения записывались спектры ФЛ и спектры ионolumинесценции, полученных при воздействии ионами кислорода на образец, (ИЛ<sub>0</sub>) промышленного образца К-56.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Неразрушающие методы исследования (ФЛ и низкоэнергетическая ИЛ<sub>0</sub>) являются весьма информативными и широко используются для изучения ультрадисперсных систем. На рис.2 представлены спектры ФЛ образцов исходного люминофора К-56

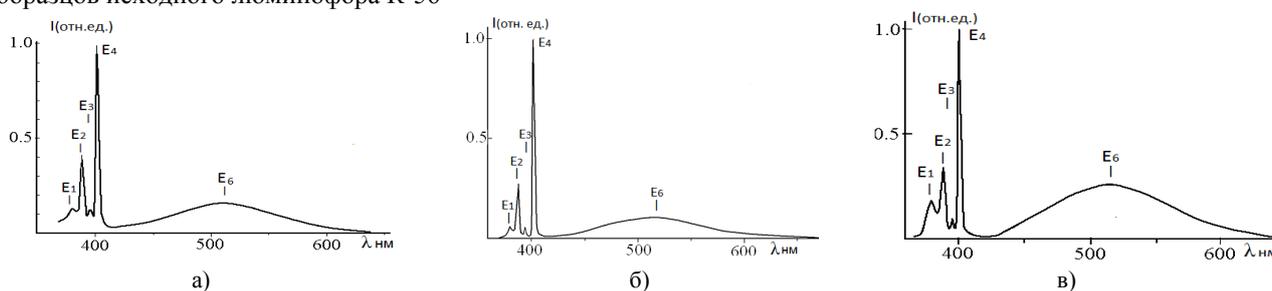


Рис.2. Спектры ФЛ промышленного люминофора К-56 (ZnO)

а) нанесение на подложку обычным способом, б) нанесение на подложку в электрическом поле напряжённостью  $10^5$  В/м  
в) нанесение на подложку в электрическом поле напряжённостью  $10^5$  В/м после воздействия ионами кислорода (энергией 3кэВ) в течение 20 минут.

При обработке люминофора К-56 ионами кислорода (энергия 3кэВ) были получены спектры, отличающиеся от спектров ФЛ рис. 3. Особенности этих спектров рассматриваются ниже.

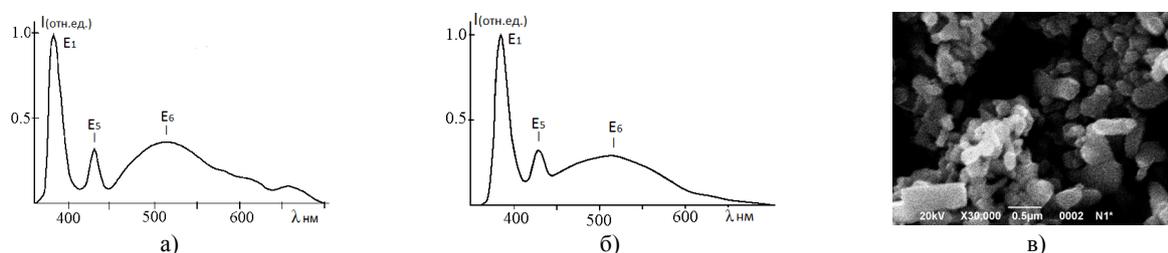


Рис.3. Спектры ИЛ<sub>0</sub> промышленного люминофора К-56 (ZnO)

а) нанесение на подложку обычным способом, б) нанесение на подложку в электрическом поле напряжённостью  $10^5$  В/м,  
в) микрофотография исходного образца ZnO.

Спектры ФЛ для ультрадисперсных частиц ZnO, нанесённых на подложку обычным способом и в электрическом поле напряжённостью  $10^5$  В/м, представлены на рис. 4.

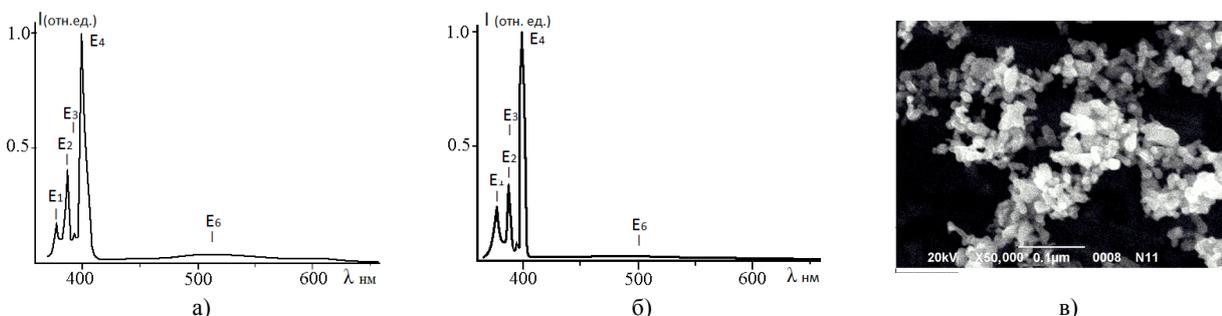
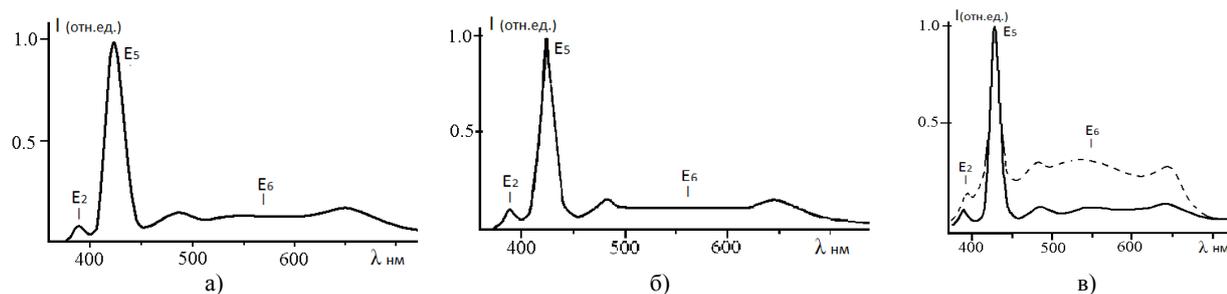


Рис. 4. Спектры ФЛ ультрадисперсных частиц ZnO

а) нанесение на подложку обычным способом, б) нанесение на подложку в электрическом поле напряжённостью  $10^5$  В/м,  
в) микрофотография мелкодисперсных кристаллов ZnO.

Спектры ИЛ<sub>0</sub> ультрадисперсных частиц ZnO, полученные для образцов, нанесённых на подложку обычным способом и в электрическом поле напряжённостью  $10^5$  В/м. также имели свои особенности рис. 5.

Рис.5. Спектры ИЛ<sub>0</sub> ультрадисперсных частиц ZnO

а) нанесение на подложку обычным способом, б) нанесение на подложку в электрическом поле напряжённостью  $10^5$  В/м, в) нанесение на подложку в электрическом поле напряжённостью  $10^5$  В/м: после воздействия ионами кислорода 30 мин – пунктирная линия и после прогрева до 700 К с последующим охлаждением до комнатной температуры – сплошная линия

Полученные в данной работе спектры промышленного люминофора ZnO (К-56) представлены рядом линий с длинами волн в максимуме:  $E_1(\lambda_{\max}=379,6\text{нм})$ ,  $E_2(\lambda_{\max}=388\text{нм})$ ,  $E_3(\lambda_{\max}=395,5\text{нм})$ ,  $E_4(\lambda_{\max}=401\text{нм})$ ,  $E_5(\lambda_{\max}=426,8\text{нм})$  и широкой полосой в видимой области  $E_6(\lambda_{\max}=510\text{-}540\text{нм})$  и охватывающей диапазон от 401 до 650 нм. Наблюдается различие между спектрами ФЛ для образцов нанесённых на подложку обычным способом (рис. 2а) и нанесённых в электростатическом поле (рис. 2б). Из анализа спектров видно, что линии спектра в фиолетовой области имеют близкие параметры (для самой интенсивной линии с  $\lambda_{\max}=401\text{нм}$  имеем полуширину  $\Delta\lambda\approx 3\text{нм}$ ). Интенсивность полосы  $E_6$  для образцов, осаждённых в электростатическом поле, меньше, чем для образцов, осаждённых обычным способом (рис. 2а,б). Не значительное изменение интенсивности полосы  $E_6$  (рис. 2б) видимо связано с частичной поляризацией частиц ZnO. На поляризацию наночастиц в электрическом поле указывается и в работах [13-16]. До настоящего времени остаётся открытым вопрос о природе центров, ответственных за полосу, охватывающей зелёную и красную область, в нашем случае полоса  $E_6$  (длина волны в максимуме  $\lambda_{\max}\approx 510\text{-}540\text{нм}$ ). Одни источники связывают эту полосу с однократно заряженными вакансиями кислорода [1,6], другие с неконтролируемой примесью меди [17]. В работе [17] проведено легирование медью монокристаллических плёнок ZnO высокого качества путём термической диффузии, и исследованы их люминесцентные свойства методом катодоллюминесценции. Отмечается, что легирование медью приводит к увеличению интенсивности зелёной полосы спектра катодоллюминесценции, положение максимума, ширина и форма которой при 78 и 300К остаются неизменными. В работах [1,6] говорится, что за люминесценцию в зелёной и красной области ответственны дефекты, образованные вакансиями кислорода. В данной работе образец исходного ZnO (промышленного люминофора К-56) обрабатывался ионами кислорода с энергией 3кВ, в течении двадцати минут, после чего интенсивность полосы ФЛ ( $E_6$ ) в видимой области значительно увеличилась (рис. 2в). После прогрева образца до 700К в вакууме (с последующим охлаждением до комнатной температуры) спектр ФЛ ZnO принимает первоначальный вид (рис. 2а), что говорит о том, что дефекты, ответственные за линию в видимой области спектра, создаются ионами кислорода.

Спектр ИЛ исходного образца, при воздействии ионами кислорода с энергией 3кэВ, имеет совершенно иной вид (рис. 3а,б). В фиолетовой области возникает интенсивная полоса  $E_1$  с  $\lambda_{\max}=382,5\text{нм}$  (1,0) и полушириной  $\Delta\lambda=16\text{нм}$ . В синей области полоса  $E_5$  с  $\lambda_{\max}=426,8\text{нм}$  (0,32) и полушириной  $\Delta\lambda=16\text{нм}$  по своей интенсивности имеет близкие параметры к интенсивности полосы в видимой области  $E_6$  с  $\lambda_{\max}=512\text{нм}$  и  $\Delta\lambda\sim 130\text{нм}$ . Эти данные показывают, что воздействие ионов кислорода на кристаллы ZnO, влияют на вид спектров. Это видимо связано с избытком кислорода от стехиометрического состава материала. Нельзя также исключать и влияние адсорбированного кислорода на поверхности кристаллов. Не менее интересные результаты были получены при исследовании УДС ZnO. Как видно из спектров ФЛ, полученные УДС обладают высокой интенсивностью линии  $E_4$  в ультрафиолетовой области спектра с длиной волны  $\lambda_{\max}=401\text{нм}$ , и низкой интенсивностью в видимой области (рис. 4а). При этом, для образцов полученных осаждением в электрическом поле, интенсивность полосы в видимой области спектра незначительна (рис. 4б). Такие спектры соответствуют высокому структурному и оптическому качеству кристаллов [6-8]. Этому, видимо, способствует направленная ориентация кристаллов в электрическом поле. Уровень поляризации кристаллов в данном случае выше, так как согласно микрофотографии размеры кристаллов находятся в пределах 10-40нм (рис. 4а). При воздействии ионами кислорода на УДК ZnO, полученный спектр в фиолетовом диапазоне имеет спектральную линию  $E_2$  слабой интенсивности (0,1) с  $\lambda_{\max}=389\text{нм}$  и полушириной  $\Delta\lambda=14,0\text{нм}$ . В синей области имеем интенсивную линию  $E_5$  с  $\lambda_{\max}=423,5\text{нм}$  и полушириной  $\Delta\lambda=16,0\text{нм}$ . (рис. 5а,б). Интенсивность полосы в видимой области слабая ( $\sim 0,1$ ). На рис. 5в представлены спектры ИЛ<sub>0</sub> образца, нанесённого на подложку в электрическом поле после воздействия ионами кислорода 30 мин – пунктирная линия и после прогрева до 700К, с последующим охлаждением – сплошная линия. Положение линий  $E_2$  ( $\lambda_{\max}=389\text{нм}$ ) и  $E_5$  ( $\lambda_{\max}=423,5\text{нм}$ ) осталось неизменным, а изменение интенсивности полосы  $E_6$  показало, что на интенсивность этой полосы

вливают дефекты, образованные ионами кислорода. В таблице представлены все основные спектральные параметры, полученные для исследуемых образцов.

Таблица

Параметры спектров, полученные при исследовании люминофора ZnO

	E <sub>1</sub> (нм)	E <sub>2</sub> (нм)	E <sub>3</sub> (нм)	E <sub>4</sub> (нм)	E <sub>5</sub> (нм)	E <sub>6</sub> (нм)
ФЛ <sub>ИСХ</sub>	379,6 (0,13)	388 (0,41)	395,5 (0,12)	401 (1,00)	—	510 (0,14)
ФЛ <sub>ИСХ</sub> (КОНД)	379,6 (0,06)	388 (0,28) Δλ=2,8	395,5 (0,06)	401 (1,00) Δλ=4,0	—	514 (0,10)
ФЛ <sub>ИСХ</sub> (КОНД) после ИЛ	379,6 (0,18)	388 (0,33) Δλ=2,7	395,5 (0,10)	401 (1,00) Δλ=3,1	—	514 (0,25)
ИЛ <sub>ИСХ</sub>	382,5 (1,0) Δλ=16,0	—	—	—	426,8 (0,32) Δλ=16,0	512 (0,36)
ИЛ <sub>ИСХ</sub> (КОНД)	385,5 (1,0) Δλ=17,0	—	—	—	426,8 (0,37) Δλ=17,0	512 (0,34)
ФЛ <sub>УДК</sub>	379, (0,20) Δλ=6,0	388 (0,44) Δλ=3,0	395,5 (0,15)	401 (1,00) Δλ=3,5	—	—
ФЛ <sub>УДК</sub> (КОНД)	378 (0,23) Δλ=5,0	387,7 (0,33) Δλ=2,5	395,5 (0,07)	400,5 (1,00) Δλ=3,0	—	—
ИЛ <sub>УДК</sub>	—	389 (0,09) Δλ=14,0	—	—	423,5 (1,00) Δλ=16,0	547 (0,13)
ИЛ <sub>УДК</sub> (КОНД)	—	389 (0,1) Δλ=13,5	—	—	423,5 (1,00) Δλ=15,0	550 (0,1)

В скобках ( ) указана относительная интенсивность полос,

ФЛ<sub>ИСХ</sub> (конд) после ИЛ<sub>О</sub> – фотолюминесценция промышленного образца К-56, осаждённого на подложку в электрическом поле напряжённостью 10<sup>5</sup> В/м, после воздействия ионами кислорода на образец

ИЛ<sub>ИСХ</sub>(конд) – ионOLUMИНЕСЦЕНЦИЯ промышленного образца К-56, осаждённого на подложку в электрическом поле напряжённостью 10<sup>5</sup> В/м,.

ФЛ<sub>УДК</sub> (конд) – фотолюминесценция ультрадисперсных кристаллов, осаждённых на подложку в электрическом поле напряжённостью 10<sup>5</sup> В/м.

ИЛ<sub>О</sub> удк (конд) – ионOLUMИНЕСЦЕНЦИЯ ультрадисперсных кристаллов, осаждённых на подложку в электрическом поле напряжённостью 10<sup>5</sup> В/м.

В данной работе было установлено, что осаждённые в электрическом поле кристаллы ZnO ультрадисперсных размеров значительно улучшают свои спектральные свойства. Эти спектры аналогичны спектрам, которые получают при использовании сверхчистых кристаллов с идеальной кристаллической решёткой [1,8,10,18,19]. В работе [18] отмечается, что ультрафиолетовое (UV) излучение проявляется в достаточно совершенных структурах с минимальным количеством дефектов, которые могут создавать конкурирующие каналы излучательной или безизлучательной рекомбинации. Поэтому соотношение интенсивностей UV и видимого излучения PL может служить мерой качества кристаллов ZnO. Причём в настоящей работе для этого использовалась не специально подготовленная подложка. Анализ спектров ионOLUMИНЕСЦЕНЦИИ и фотолюминесценции показал, что за спектр в видимой области спектра ответственны также дефекты, образованные ионами кислорода. В работе [19] также подчёркивается, что видимую люминесценцию ZnO (пик 550 нм) связывают с наличием глубоких дефектов, обычно кислородных вакансий и междоузельных атомов цинка. Результаты работы показывают, что на неориентированной подложке тоже можно получать образцы со спектральными параметрами близкими к параметрам для кристаллов высокой чистоты и идеальной кристаллической решёткой.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получены спектры ФЛ и ИЛ<sub>О</sub> для ультрадисперсных систем ZnO (К-56), которые указывают на то, что при уменьшении размерности кристаллов до нано-размерных величин их структурные и оптические свойства улучшаются. Осаждение ультрадисперсных кристаллов на подложку в электрическом поле также ведёт к значительному улучшению оптических параметров. Это, видимо, связано с определённой ориентацией оптической оси мелкодисперсных кристаллов ZnO при осаждении их в электрическом поле. Изменение вида спектров при воздействии ионами кислорода на кристаллы ZnO показало, что за интенсивность широкой полосы в видимой области ответственны дефекты, образованные ионами кислорода. Показано, что при осаждении ультрадисперсных кристаллов в электрическом поле можно получить УДС с оптическими параметрами не хуже, чем для сверхчистых кристаллов с идеальной кристаллической решёткой.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРЫ

1. Burakov V.S., Tarasenko N.V., Nevar E.A., Nedelko M.I. Morphology and optical properties of zinc oxide nanostructures synthesized by thermal and electric-spraying // *Technical Physics*. -2011.- Vol.81. - Vyp.2. -P.89-97.
2. Chaliapina A.Y., Khokhlov E.M., Polyakova L.A. AY Solovyova A.Yu. Synthesis and study of the properties of nanoparticles of zinc oxide// *Vestnik MITHT*.-2011.-Vol.6. - No.6.-P.102-104 (in Russian).
3. Ostafiychuk B.K., Zhirovetsky V.M., Kotlyarchuk B.K., Moisa M.I., Popovych D.I., Serednitsky A.S. The study of processes the formation of nano ZnO and on its properties // *Physics and Chemistry of Solid State*.- 2008.-Vol.9. - No.4.-P.728-731(in Russian).
4. Michael Sushchikh, Vladislav Styrov, Vladimir Tyutyunnikov, Nick Cordella. Surface Luminescence of Polycrystalline Zinc oxide Excited by Hydrogen Atoms // *Mater. Res. Symp. Proc.* - 2007. - Vol.957. - P.0957-K07-02 .
5. Vakalov D.S., Krandievsky S.O., Mihneev L.V. The study of recombination centers of ZnO nanoparticles in the methods of optical, photoelectric and luminescent spectroscopy // *Vestnik NCSTU*.-2011. - No.4(29).-P.6-11(in Russian).
6. Kuzmina I.P., Nikitenko V.A. Zinc oxide. Preparation and Optical Properties. - M.: Nauka, 1984.-166p (in Russian).
7. Nikitenko V.A. Optics and Spectroscopy of Point Defects in ZnO // *Proceeding of interational NATO Workshop "Zinc oxide as a material for micro-and optoelectronic application."*-Shringer, 2005.-P.69-81.
8. Kaidashev V.E., Kaidashev E.M., Perez M., Monteiro T., Correia M.R., Sobolev N.A. Optical and structural properties of the nanorods ZnO, obtained by pulsed laser deposition without catalyst // *Technical Physics*.-2009.- Vol.79. - Vyp.11.- P.45-49.
9. Li L.E., Demianets L.N. Room-temperature excitonic lasing in ZnO tetrapod-like crystallites // *Opt.materials*. - 2008. - Vol.30. No.7.-P.1074-1078.
10. Lyanguzov N.V., Kaidashev V.E., etc. The use of different catalysts for micro-laser deposition and ZnO nanorods // *Technical Physics*. - 2012. - Vol.82. -Vyp.4. - P.108-116.
11. Gusev A.I. Nanomaterials, nanostructures, nanotechnology.- M.: Fizmatlit, 2005. - 416 s. (in Russian).
12. Andrievsky R.A., Raguli A.V. Nanostructured materials.- M.: Izd.tsentr "Academy", 2005.-192p. (in Russian).
13. Malyshev K.V. The polarization of the nanoparticles in the tunneling microscope // *Science and education*. - 2011.- No.10. - P.1-13(in Russian). <http://technomag.edu.ru/pdf/out/228079.pdf>
14. Shirokov V.P., Biryukov S.V., Mukhortov V.M., Yuzyuk Y.I. The polarization of thin films of barium strontium titanate under the influence of an external electric field // *Technical Physics*.- 2011.-Vol.81. - Vyp.8.-P.115-121.
15. Zonghai Hu, Michael D. Fischbein, Claudia Querner, and Marija Drndic. Electric-Field-Driven Accumulation and Alignment of CdSe and CdTe Nanorods in Nanoscale Devices // *Nano letters*. - 2006. - Vol.6. - No.11. - P.2585-2591.
16. Kevin M. Ryan, Alex Mastroianni, Kmani A. Stancil, Haitao Liu, A.P. Alivisatos. Electric-Field-Assisted Assembly of Perpendicular oriented Nanorod Superlattices // *Nano letters*. - 2006. - Vol.6. - No.7. - P.1479-1482.
17. Alimov YA.I, Chukichev M.V., Nikitenko V.A. The green luminescence band film of zinc oxide doped with copper in the process of thermal diffusion // *Semiconductors*. - 2004. - Vol.38. - Vyp.1. - P.34-38.
18. Troshin A.V., Kovalenko A.A., Dorofeev S.G., Baranov A.N. Sensitization ZnO nanorods CdSe quantum dots // *Inorganic materials*. - 2012. - Vol.48. - No.7. - P.1-8. (in Russian).
19. Khomchenko V.S., Roshchina N.N., Zavyalov L.V., Strelchuk V.V., Svechnikov G.S., Tatyanyenko N.P., Gromashevskiy V.L., Lytvyn O.S., Avramenko E.A., Snopok B.A. Investigation of the structure, and the emission properties of piezoelectric films ZnS, ZnS-ZnO and ZnO, obtained by chemical method // *Technical Physics*. - 2014. - Vol.84. - Vyp.1. - P.94-103.

PACS: 61.80.Ba

## THE FORMATION OF ONE DIMENSIONAL STRUCTURE IN MONOATOMIC LAYER ON GRAPHITE SURFACE

**V.G. Kirichenko, A.A. Yampolskiy**

*V.N. Karazin Kharkiv National University*

*4 Svobody Sq., Kharkiv, 61022, Ukraine*

*E-mail: [yal\\_kir48@mail.ru](mailto:yal_kir48@mail.ru)*

*Received September 5, 2015*

On the basis of experimental data on the assumption that the collective nature of the formation of atomically smooth surface of graphite simulated linear dimensional chains in the surface monolayer of graphite. In the transition from linear chains of short to longer transition from the formation of double bonds between the carbon atoms to alternating single and triple bonds. The simulation results of single and triple bonds are confirmed by experimental data for the long chains resulting carbyne, which also is an alternation of single and triple carbon-carbon bonds. There is formation of groups or clusters of carbon atoms along the chain axis of asymmetry due to single and triple bonds between carbon atoms in long chains.

**KEY WORDS:** graphite, surface, carbyne, structure

### ФОРМУВАННЯ ОДНОМІРНИХ СТРУКТУР У МОНОАТОМНОМУ ШАРІ НА ПОВЕРХНІ ГРАФІТУ

**В.Г. Кіріченко, О.О. Ямпольський**

*Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна*

*61022, Харків, м. Свободи, 4*

На основі експериментальних даних в припущенні про колективну природу формування атомарно гладкої поверхні графіту проведено моделювання лінійних одновимірних ланцюжків в поверхневому монослої графіту. При переході від коротких лінійних ланцюжків до більш довгих відбувається перехід від формування подвійних зв'язків між атомами вуглецю до одинарних і потрійних зв'язків. Результати моделювання одинарних і потрійних зв'язків підтверджується експериментальними даними для довгих ланцюжків отриманого карбіна, в яких також відбувається чергування потрійних і одинарних зв'язків вуглець-вуглець. Спостерігається формування груп або кластерів атомів вуглецю уздовж осі ланцюжків за рахунок асиметрії одинарних і потрійних зв'язків між атомами вуглецю в довгих ланцюгах.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** графіт, поверхня, карбін, структура

### ФОРМИРОВАНИЕ ОДНОМЕРНЫХ СТРУКТУР В МОНОАТОМНОМ СЛОЕ НА ПОВЕРХНОСТИ ГРАФИТА

**В.Г. Кириченко, А.А. Ямпольский**

*Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина*

*61022, г. Харьков, пл. Свободы, 4*

На основе экспериментальных данных в предположении о коллективной природе формирования атомарно гладкой поверхности графита проведено моделирование линейных одномерных цепочек в поверхностном монослое графита. При переходе от коротких линейных цепочек к более длинным происходит переход от формирования двойных связей между атомами углерода к чередующимся одинарным и тройным связям. Результаты моделирования одинарных и тройных связей подтверждается экспериментальными данными для длинных цепочек полученного карбина, в которых также происходит чередование тройных и одинарных связей углерод-углерод. Наблюдается формирование групп или кластеров атомов углерода вдоль оси цепочек за счет асимметрии одинарных и тройных связей между атомами углерода в длинных цепях.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** графит, поверхность, карбин, структура

До 60-х годов 20-ого века считалось, что существуют только две кристаллические формы углерода, а именно трех- и двумерные структуры – алмаз и графит, соответственно. Одномерный углерод был открыт в 1960 г А.М. Сладковым с сотрудниками – карбин – на основе структуры линейного углерода [1]. В 1985г. было открыто семейство сферообразных углеродных молекул – фуллеренов [2]. Это дало новый сильный толчок исследованиям в области углерода и его аллотропных форм. Графен – недавно открытая форма углерода, состоящая из одного графитового монослоя, которая обладает рядом необычных свойств, – хорошей электропроводностью, прозрачностью, высокими механическими свойствами, высокой подвижностью носителей заряда при комнатной температуре, возможностью квантовой проводимости и эпитаксиального наслаивания [3]. Углеродные нанотрубки часто приводят как пример одномерного материала. Но это не совсем корректно, так как они имеют внутреннюю и внешнюю поверхность. Тем не менее, углерод действительно может существовать в одномерном виде. Это, как указано выше – карбин, состоящий из цепочек атомов, связанных двойными или чередующимися одинарными и тройными атомными связями. Одномерный углерод находили в сжатом графите, в межзвездной пыли, и, в небольших количествах, его синтезировали экспериментаторы.

Карбин обладает уникальными свойствами. Согласно данным численного моделирования, карбин обладает наивысшим пределом прочности среди всех известных материалов, вдвое превосходя по этому параметру графен и углеродные нанотрубки, и втрое – алмаз. Этот набор свойств для цепочки атомов углерода делает карбин полезным для наномеханических систем, спинтронных устройств, сенсоров.

Целью настоящей работы является анализ экспериментальных данных о реальной атомной поверхности высоко ориентированного графита, полученных с применением сканирующей туннельной микроскопии и компьютерное моделирование образования одномерных структур типа карбина на поверхности графита.

### МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

В качестве объекта исследования использовался высоко ориентированный кристалл графита. Очистку поверхности графита и одновременно образование реальной атомной поверхности кристалла слоистого типа производили скалыванием верхнего слоя кристалла непосредственно перед измерением. Исследование поверхности графита методом сканирующей туннельной микроскопии проводили при нормальных условиях на сканирующем туннельном микроскопе СТМ – 1. Разрешение в горизонтальной плоскости  $xу$  меньше  $1,4 \text{ \AA}$ , а по вертикали –  $0,7 \text{ \AA}$  [5]. Полученные экспериментальные данные были использованы при построении трехмерных диаграмм моноатомного слоя графита с помощью программы Harvard Chart XL 2,0, отражающих строение первого поверхностного слоя графита и связь его со вторым поверхностным слоем.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис.1 представлено распределение электронной плотности на поверхности графита: по ребру элементарной ячейки  $a$  на основе топографического изображения участка высоко ориентированного графит при максимальном увеличении, полученное сканированием в режиме стабилизации туннельного тока. Наблюдаются упорядоченные ряды гексагональной структуры графита: элементарная ячейка в виде шестиугольника состоит из атомов с разным уровнем локальной электронной плотности состояний. Отметим, что параметры элементарной ячейки согласуются с данными [6]. Наблюдаются упорядоченные ряды гексагональной структуры графита: элементарная ячейка в виде шестиугольника состоит из атомов с разным уровнем локальной электронной плотности состояний. Параметры элементарной ячейки согласуются с данными, представленными в работах других авторов. Секционирование экспериментальных данных (рис. 2) проводилось во всех возможных направлениях  $a$ :  $a_1=1,4 \text{ \AA}$ . Важным в полученных экспериментальных данных по электронной плотности на поверхности графита (рис. 3) является факт наличия модуляции вертикальной составляющей, по ребрам ( $a$ ) примитивной ячейки и ребрам ( $b$ ) элементарной ячейки структуры, что отображает модуляцию электронной плотности атомов на поверхности графита. Отмечаются значительные периодические отклонения в высоте изображения двух соседних атомов (точнее – положений локальных максимумов электронной плотности). СТМ позволяет наблюдать распределение в пространстве вокруг атомов электронной плотности, выраженной в значениях координаты  $z$ .

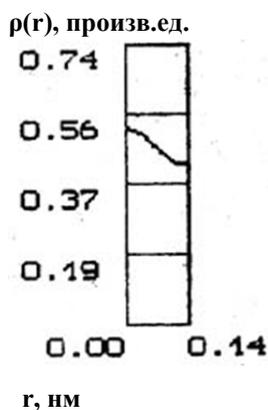


Рис. 1. Распределение электронной плотности на поверхности графита по ребру элементарной ячейки  $a$

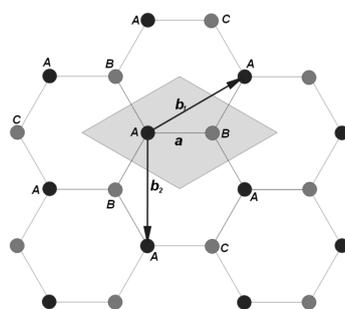


Рис. 2. Ближайшие атомы в окружении узла (A) гексагональной решетки. Первые ближайшие соседи атомы B, вторые соседи обозначены как (A), третьи как и C

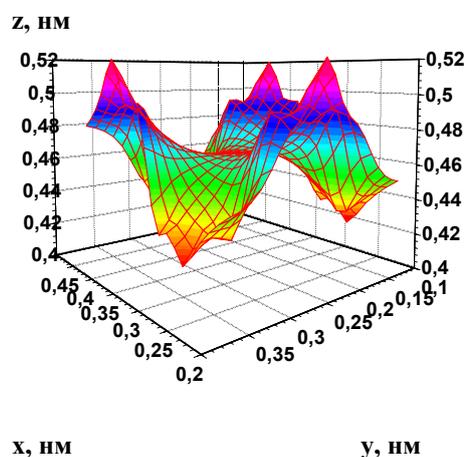


Рис 3. Электронная плотность в элементарной ячейке

С помощью программы Harvard Chart XL 2,0 выделяли верхний моно атомный слой поверхности графита. Для представления экспериментальных данных использовалась гексагональная плоская сетка (рис.2). Выбирались данные по радиальной электронной плотности (рис. 1) в направлении ребра  $a$  гексагональной плоской ячейки. В реальном моно атомном слое кристалла графита наблюдаются отклонения атомов от равновесной электронной плотности, представленной относительно некоторой средневзвешенной плоскости, причём три ближайших соседа центрального атомов углерода отклоняются в противоположную сторону. На рис. 3 представлено распределение электронной плотности в элементарной ячейке.

На основе этих данных проводили моделирование линейных одномерных цепочек. Приведем результаты компьютерного моделирования распределения электронной плотности в линейных одномерных цепочках на основе моноатомного слоя графита, состоящих из различного числа атомов углерода. На рис. 4,5 приведены диаграммы распределения электронной плотности в линейной одномерной цепочке из 3-х атомов углерода. Для

трехатомной линейной цепочки характерны пики электронной плотности одинаковой высоты равноудаленные друг от друга. Расстояния между соседними атомами (1,4 Å) согласуются с данными рис. 3. Возможно, эти характеристики распределения связаны с формированием двойных связей между атомами углерода в цепочке.

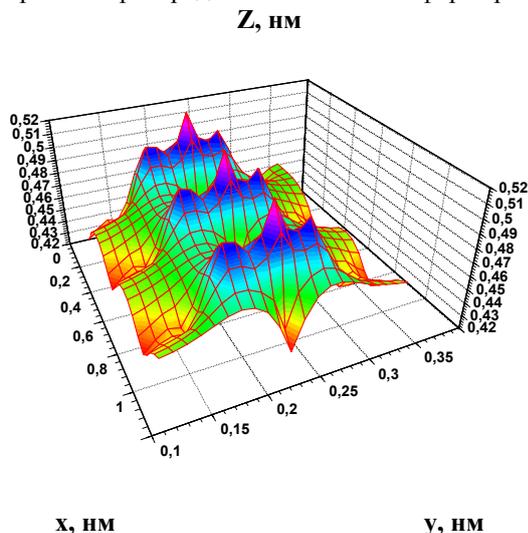


Рис. 4. Электронная плотность в линейной цепочке из 3 атомов

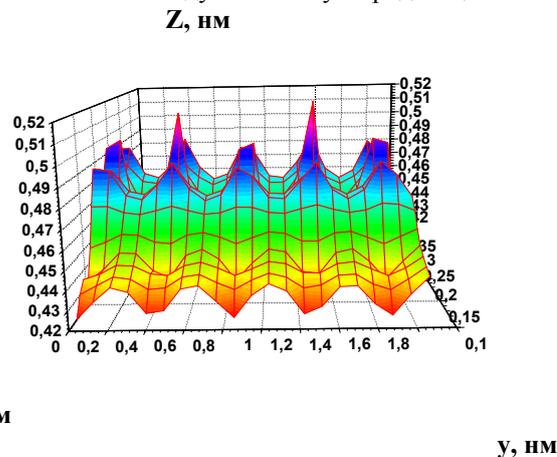


Рис.5. Электронная плотность в линейной цепочке из 5 атомов с боковыми связями

В [6] показано, что возможна структурная неустойчивость одномерной системы, выражающаяся в неустойчивости относительно перестройки решетки с изменением периода. Это предположение подтверждается результатами моделирования одномерных цепочек с 5 и более атомами углерода.

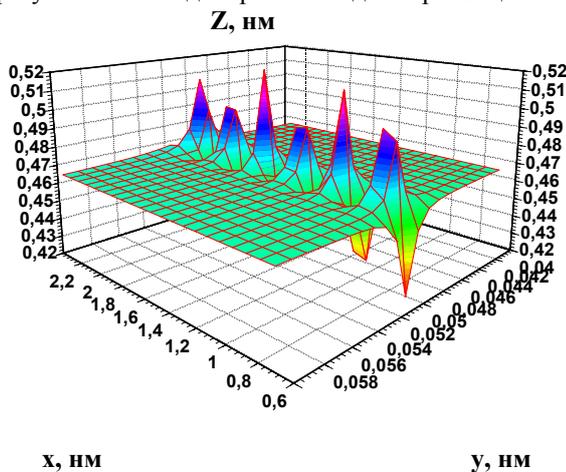


Рис. 6. Электронная плотность в линейной цепочке из 12 атомов

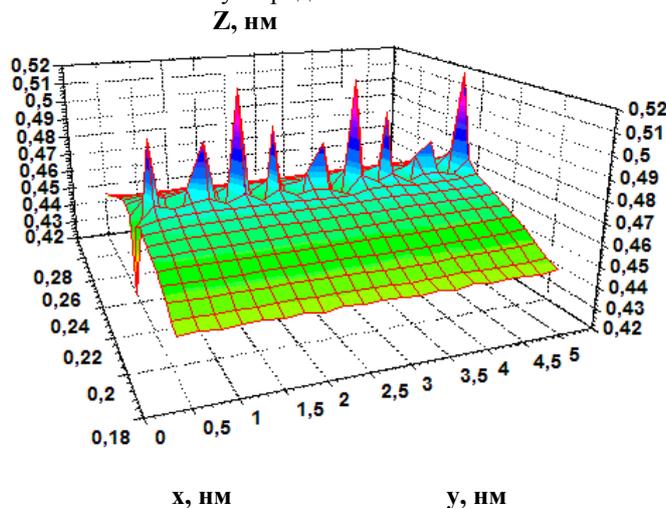


Рис. 7. Электронная плотность в линейной цепочке из 24 атомов

На рис. 6 приведено распределение электронной плотности в линейной цепочке из 12 атомов. Для 12-атомной линейной цепочки характерны пики электронной плотности различной высоты равноудаленные друг от друга. Пик с более низкой электронной плотностью показывает, что вместо двойной связи формируется тройная связь между атомами углерода. Это значит, что происходит чередование тройных и одинарных связей углерод-углерод. На рис. 7 приведено распределение электронной плотности в линейной цепочке из 24 атомов. В этом случае, кроме обнаруженного для пятиатомной цепочки чередования одинарных и тройных связей начинается проявляться объединение атомов углерода в группы, или кластеры.

На рис. 8 приведено распределение электронной плотности в линейной цепочке из 44 атомов. Наблюдается шесть групп или кластеров атомов углерода, что возможно связано с предложенной ранее [1] зигзагообразной моделью карбина. В [8] описано получение карбиновой цепочки, содержащей 44 атома углерода (предыдущий рекорд составлял 28 атомов углерода). В полученном карбине происходит чередование тройных и одинарных связей углерод-углерод. Ранее предполагали, что в полиинах происходит чередование связей, однако экспериментально это было подтверждено лишь в [8], что предоставляет новые возможности по экспериментальному исследованию влияния сопряжения на распределение энергетически уровней в длинных углеродных цепях.

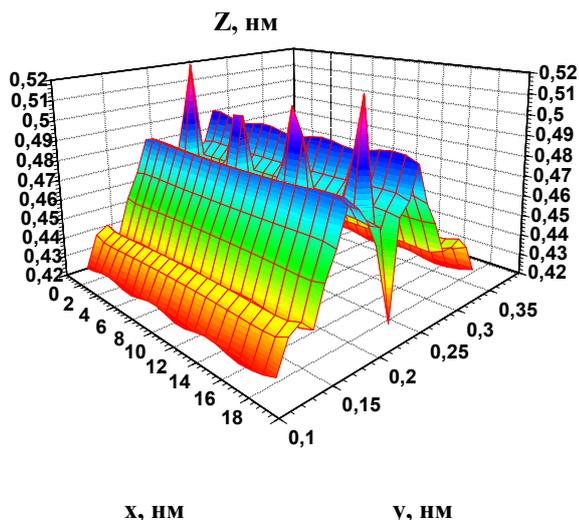


Рис. 8. Электронная плотность в линейной цепочке из 44 атомов

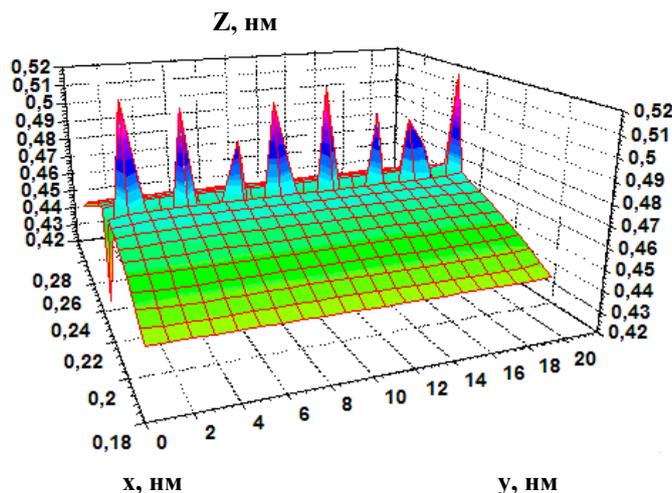


Рис. 9. Электронная плотность в линейной цепочке из 96 атомов

В цепочке из 44 атомов также наблюдается кластеризация атомов углерода вдоль оси цепочки (рис. 8). В более длинной цепочке из 96 атомов (рис. 9) кластеризация продолжается, с формированием кластеров из 12 атомов. Число атомов в кластерах приведено в таблице.

Таблица.

Число атомов в кластере зависимости от длины цепочки

Длина цепочки (атомы)	3	5	6	12	44	96
Число атомов в кластере	1	1	1,5	2	11	12

Полученные результаты моделирования – чередование одинарных и тройных связей, кластеризация - удовлетворительно согласуются с моделями, приведенными в [9]. По этим моделям структурной неустойчивости одномерных систем при смещении атомов образуются атомные кластеры или молекулы. Структурной особенностью молекулярных одномерных систем является компланарность молекулярных групп. Выход из плоскости системы может происходить за счет поворота вокруг одинарной связи и уменьшением обменного интеграла. Для углеродных молекул энергия сохранения компланарности не более 10 ккал/моль, энергия одиночной связи 63 ккал/моль, двойной связи – около 101 ккал/моль. Кроме того, при формировании длинных цепочек в микрокристаллах карбина падает эмиссия электронов с поверхности [10].

## ВЫВОДЫ

На основе экспериментальных данных, полученных с помощью сканирующей туннельной микроскопии атомарно гладкой поверхности графита, промоделированы одномерные цепочки в поверхностном слое графита. В случае коротких линейных цепочек формируются двойные связи между атомами углерода. При увеличении длины цепочек происходит переход к чередующимся одинарным и тройным связям. Эти результаты подтверждаются экспериментальными данными [8] для длинных цепочек карбина. Наряду с чередованием тройных и одинарных связей углерод - углерод образуются кластеры атомов углерода за счет асимметрии связей между атомами в длинных цепях.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Sladkov A.M., Kudryavtcev Yu.P. Diamond, graphite, carbin - allotropic forms of carbon // Priroda. – 1969. – No.5. – P.37-44.
- Fullerenes. Chemistry, Physics, and Technology / Ed. K.M. Kadish, R.S. Ruoff. – N.Y., 2000. – P.225-281.
- Novoselov K. S. et al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. – Science. – 2004. – Vol. 306. – P. 666. DOI: 10.1126 / science. 1102896.
- Harris P.J.F. Carbon Nanotubes and Related Structures: New Materials for the 21st Century. N.Y., 1999.
- Kirichenko V.G., Melnikova E.S. The features of structure of nanometric surface layers of graphite // The Journal of Kharkiv National University, physical series: "Nuclei, Particles, Fields". – 2009. – No.880. – Iss.4(44). - S.103-108.
- Peierls R.E. Quantum theory of solids. – Oxford: Clarendon Press, 1955. - 360p.
- Shioyama H. Cleavage of graphite to graphene // J. Mat. Sci. Lett. – 2001. – P.499—500.
- ssu-filippov Nature Chemistry, 2010, DOI: 10.1038/nchem.828). 2010 - 01:22
- Kruger Yu.G; Structure instability of one dimensional systems as base of physical principle of operate correctly of molecular electronic devices // The Journal of Structure Chemistry. – 1999. – Vol.40. – No.4. – P. 734-765.
- Hvostov V.V., Guseva V.B., Aleksandrov A.F. Structure and emission properties of linear chain carbon // Short communications on physics PHIAN. – 2012. – No.2 – P.40-49.

PACS: 74.72.Gh; 72.20.My; 75.50.Ee; 75.50.Pp

## ABOUT MECHANISM OF NEGATIVE MAGNETORESISTANCE FOR $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ SINGLE CRYSTAL IN THE REGIME OF MOTT INSULATOR

**N.V. Dalakova**

*B.I. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering, NAS of Ukraine*

*47 Lenin Ave., 61103, Kharkov, Ukraine*

*e-mail: [dalakova@ilt.kharkov.ua](mailto:dalakova@ilt.kharkov.ua)*

Received September 2, 2015

We measured resistive and magnetoresistive properties of antiferromagnetic cuprate  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  with the Neel temperature  $T_N = 265.5$  K, synthesized by the method of solid phase reaction. It is shown that for this compound in the temperature range  $T = 20 \div 250$  K the Mott law of variable range hopping conductivity is fulfilled. The localization length for the charge carriers is  $L_c = 0.4$  nm. In the temperature range  $T = 17.95 \div 99.93$  K in magnetic fields up to 1.75 T a quadratic with field negative magnetoresistance was discovered. We suggest that the known interference model of negative magnetoresistance in which the magnetic field influences the localized electron spins can be used to explain the found magnetoresistive effects.

**KEY WORDS:** high-temperature superconductors, antiferromagnetic insulator, hopping conductivity, negative magnetoresistance, phase separation

## О МЕХАНИЗМЕ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛА $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ В РЕЖИМЕ МОТТОВСКОГО ИЗОЛЯТОРА

**Н.В. Далакова**

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

*пр. Ленина 47, Харьков, 61103, Украина*

Измерены резистивные и магниторезистивные свойства полученного методом твердофазного синтеза антиферромагнитного купрата  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  с температурой Нееля  $T_N = 265,5$  К. Показано, что для данного купрата в интервале температур  $20 \div 250$  К выполняется закон Мотта прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка. Длина локализации носителей тока  $L_c$  составляла 0,4 нм. В интервале температур  $T = 17,95 \div 99,93$  К в полях до 1,75 Тл было обнаружено квадратичное по полю отрицательное магнитосопротивление. Высказано предположение о влиянии магнитного поля на спины локализованных электронов и о возможности применения известной интерференционной модели отрицательного магнитосопротивления для объяснения обнаруженных магниторезистивных эффектов.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** высокотемпературные сверхпроводники, антиферромагнитный диэлектрик, прыжковая проводимость, отрицательное магнитосопротивление, фазовое разделение

## ПРО МЕХАНІЗМ НЕГАТИВНОГО МАГНІТООПОРУ МОНОКРИСТАЛА $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ В РЕЖИМІ МОТТІВСЬКОГО ІЗОЛЯТОРА

**Н.В. Далакова**

*Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАН України*

*пр. Леніна 47, 61103, м. Харків, Україна*

Виміряні резистивні і магниторезистивні властивості отриманого методом твердофазного синтезу антиферромагнітного купрата  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  з температурою Нееля  $T_N = 265,5$  К. Показано, що для даного купрата в інтервалі температур  $20 \div 250$  К виконується закон Мотта стрибкової провідності з змінною довжиною стрибка. Довжина локалізації носіїв струму  $L_c$  становила 0,4 нм. В інтервалі температур  $T = 17,95 \div 99,93$  К і в полях до 1,75 Тл був виявлений квадратичний по полю від'ємний магнітоопір. Висловлено припущення про вплив магнітного поля на спини локалізованих електронів та про можливості застосування відомої інтерференційної моделі від'ємного магнітоопору для пояснення виявлених магниторезистивних ефектів.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** високотемпературні надпровідники, антиферромагнітний діелектрик, стрибова провідність, негативний магнітоопір, фазове розділення

За последние 30 лет был достигнут значительный прогресс в понимании свойств высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП). Однако все еще недостаточно исследованным остается механизм перехода этих соединений из диэлектрического в проводящее и в сверхпроводящее состояния. В то же время установленным фактом считается связь проводящих свойств ВТСП с магнитным состоянием этих систем. В частности, с момента открытия ВТСП во многих работах отмечается корреляция транспортных и магнитных свойств купратов лантана, родительским соединением которых является купрат стехиометрического состава  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  ( $\delta = 0$ ) [1,2]. В значительной степени связь проводящих свойств и магнитного состояния системы обусловлена уникальными особенностями кристаллической и магнитной структуры данного соединения. Стехиометрический окисел  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  является антиферромагнитным (АФ) изолятором с температурой Нееля  $T_N \approx 320$  К. АФ состояние непосредственно связано с особенностями перовскитоподобной решетки этого соединения, образованной чере-

дованием слоев  $\text{CuO}_2$  и  $\text{La}_2\text{O}_2$  [1]. Ниже 530 К решетка является орторомбической. В пространственной группе симметрии  $Bmab$  слои  $\text{CuO}_2$  ориентированы перпендикулярно оси  $\vec{c}$  параллельно базисной плоскости  $(ab)$  [1]. Магнитное состояние определяется спинами ионов меди  $d^9\text{Cu}^{2+}$  ( $S=0,5$ ). Магнитная структура в плоскостях  $\text{CuO}_2$  характеризуется простым двумерным АФ порядком с противоположным направлением магнитных моментов на соседних узлах [3]. Из-за наклона октаэдров  $\text{CuO}_6$  спины имеют небольшой скос ( $\approx 0,17^\circ$ ) относительно оси  $\vec{b}$  [3,4] в плоскости  $(bc)$ . Это создает в каждом слое слабый ферромагнитный (ФМ) момент, перпендикулярный плоскости  $\text{CuO}_2$ . Однако в целом система имеет 3D АФ упорядочение [4]. Достаточно сильное магнитное поле  $\vec{H} \parallel \vec{c}$  приводит к переходу в слабоферромагнитное (СФ) состояние, в котором все магнитные моменты направлены по полю [4].

Насыщение диэлектрического  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  избыточным кислородом ( $\delta > 0$ ) приводит к возникновению носителей заряда (кислородных дырок) и подавлению АФ порядка (понижению  $T_N$ ). В купратах меди АФ порядок и носители заряда (дырки) антагонистичны друг другу. С одной стороны, при  $T < T_N$  дырки любого рода, помимо решеточных искажений и связанных с этим поляронных эффектов, вносят значительное искажение АФ порядка [5]. Дырка может обладать спином и движение ее еще более усугубляет нарушения АФ порядка (frustration effect) [5]. С другой стороны, АФ порядок затрудняет движение дырок. Выше  $T_N$  происходит разрушение дальнего АФ порядка, хотя 2D АФ корреляции в плоскостях  $\text{CuO}_2$  могут продолжать существовать даже при температурах, довольно сильно превышающих  $T_N$  [1,3]. Таким образом, ясно, что проводимость  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  очень чувствительна к магнитному упорядочению спинов меди ( $d^9\text{Cu}^{2+}$ ). В связи с этим, в изучении проблемы высокотемпературной сверхпроводимости важная роль отводится изучению поведения магниторезистивных свойств этого купрата, в частности, в области прыжковой проводимости. Такие исследования с одной стороны обнаруживают непосредственное влияние магнитного поля на волновые функции и транспорт носителей заряда, а с другой стороны они могут дать информацию о взаимодействии носителей заряда с магнитной подсистемой.

Для большинства исследованных нами ранее монокристаллов [6-8], находящихся в АФ состоянии с температурой Нееля  $180 \div 290$  К, в интервале температур  $20 \div 200$  К с достаточно хорошей точностью выполнялся закон Мотта:

$$R(T) \propto \exp\left[(T_0/T)^{1/4}\right], \quad (1)$$

где  $T_0$  – характеристическая температура Мотта. Она представляет собой выраженную в единицах температуры суммарную энергию всех возможных состояний электрона в области его локализации. Зависимость (1) соответствует прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка (ПППДП), а значение показателя экспоненты  $1/4$  в (1) отвечает поведению 3D системы.

Влияние спинового упорядочения на проводимость  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  отчетливо проявляется в сравнительно сильных магнитных полях  $H$ . Например, при ориентации магнитного поля перпендикулярно слоям  $\text{CuO}_2$  в некотором критическом поле  $H_c \geq 5$  Тл происходит одновременно скачок проводимости и намагниченности. В результате при  $H > H_c$  имеет место отрицательное магнитосопротивление (МС), обусловленное переходом из антиферромагнитного (АФ) в слабоферромагнитное (СФ) состояние [4,9]. При ориентации поля в плоскости  $\text{CuO}_2$  вдоль орторомбической оси  $\vec{b}$  в достаточно сильных полях  $H > 10$  Тл на кривых магнитополевой зависимости отрицательного МС наблюдаются только изломы [10].

Спиновый механизм магнитосопротивления не исчерпывает возможное влияние магнитного поля на транспорт носителей заряда в  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ . Действительно, согласно [11] при ориентации поля перпендикулярно слоям  $\text{CuO}_2$  ( $\vec{H} \parallel \vec{c}$ ) в полях  $H < H_c$  сопротивление не должно зависеть от поля, то есть МС должно отсутствовать. В идеальном случае АФ–СФ перехода в точке  $H = H_c$  сопротивление испытывает скачок в сторону уменьшения и при  $H > H_c$  снова не зависит от поля. При ориентации поля  $\vec{H} \parallel \vec{a}$  сопротивление также не должно зависеть от поля, поскольку АФ моменты меди в  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  ориентированы в плоскости  $(bc)$ . В то же время, в экспериментальных исследованиях АФ–СФ перехода в образцах с  $T_N \cong 188$  К при  $\vec{H} \parallel \vec{c}$  в области малых полей ниже критического поля перехода  $H_c$  мы наблюдали заметное отрицательное МС [12]. Этот вклад в МС не имел гистерезиса, характерного для магнитного фазового перехода. Такого типа вклад в МС увеличивался с понижением температуры и проявлялся при всех температурах в интервале  $5 \div 100$  К. В полях  $\vec{H} \parallel \vec{a}$  для образцов с  $T_N \cong 232$  К также наблюдалось отрицательное МС в области температур  $T < 40$  К [6]. Для этих образцов отрицательное МС было обнаружено в области отклонения от закона Мотта (1) при температурах  $T \leq 20$  К. Оно не было связано с фазовыми магнитными переходами, поскольку проявлялось в полях, меньших

критического поля перехода АФ–СФ ( $H < H_c$ ). Это МС было объяснено известными эффектами конкуренции локализации и сверхпроводимости, характерными для неоднородных систем с фазовым разделением [6]. Механизм подобного рода МС подробно обсуждался в работах [6,7]. Однако необходимо отметить, что в исследованных ранее образцах отрицательное МС наблюдалось не только при низких температурах  $T \leq 20$  К, но и в области выполнения закона Мотта (в режиме ПППДП). Механизм этого вклада в отрицательное МС ранее не обсуждался.

Цель этой работы – рассмотреть поведение МС купрата лантана  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  при  $T > 20$  К в режиме ПППДП.

### ОБРАЗЦЫ

Проводимость  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  в магнитном поле в режиме ПППДП вообще изучена недостаточно и требует дальнейшего рассмотрения. Чтобы исключить возможное влияние сверхпроводящих включений на транспорт заряда, были исследованы образцы с более низкой концентрацией носителей, чем в наших предыдущих работах [6-8]. Кроме того, измерения МС мы проводили в более широкой области температур, чем обычно ( $\sim (20 \div 430)$  К).

В настоящей работе представлены результаты исследования влияния магнитного поля на магниторезистивные свойства АФ монокристалла  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  с температурой Нееля  $T_N = 265,5$  К. Образец был приготовлен в институте Физики твердого тела и полупроводников НАН Беларуси. Температура АФ перехода измеренного образца была определена по положению пика на кривой температурной зависимости магнитной восприимчивости  $\chi(T)$  при ориентации магнитного поля вдоль оси  $\vec{c}$  (рис.1). Для этого направления поля точность определения температуры Нееля выше, чем при  $\vec{H} \parallel (ab)$ . В случае  $\vec{H} \parallel \vec{c}$  магнитное поле направлено перпендикулярно оси антиферромагнетизма  $\vec{b}$ , и отклик системы на воздействие внешнего магнитного поля максимален. Соответственно, мы наблюдаем более острый пик на кривой зависимости  $\chi(T)$ . В случае  $\vec{H} \parallel (ab)$  в силу особенностей доменной структуры в плоскости  $\text{CuO}_2$  поле всегда направлено под некоторым углом к оси  $\vec{b}$ , поэтому сигнал существенно слабее.

К сожалению, точную величину параметра  $\delta$  оценить трудно, однако известно, что значению  $T_N = 230$  К соответствует  $\delta \approx 0,005$  [6]. Отсюда следует, что для нашего образца содержание избыточного кислорода должно быть существенно меньше 0,005.

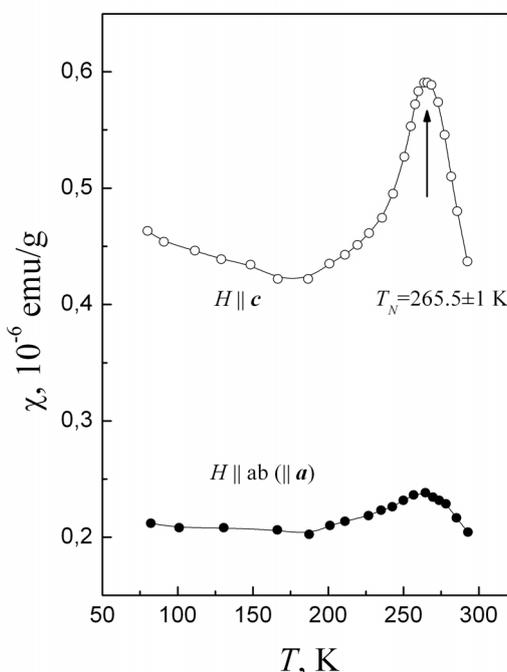


Рис.1. Температурная зависимость магнитной восприимчивости измеренного образца при двух направлениях магнитного поля.

Измерения МС были выполнены в полях  $H < 1,75$  Тл с использованием вращающегося магнита Капицы. Сравнительно низкие поля исключают возможное влияние магнитных фазовых переходов. Чтобы выбрать необходимый режим измерений, сначала были исследованы вольтамперные характеристики в широкой области

температур  $\sim (4 \div 430)$  К. В дальнейшем измерительный ток контролировался таким образом, чтобы во всей области температур при измерениях температурных зависимостей сопротивления и магнитосопротивления отклонения от закона Ома были минимальны. Таким образом, мы полагаем, что мы исключили из рассмотрения эффекты неомичности и перегрева.

Кристаллографическая ориентация образца определялась методом рентгеновской дифракции. На дифракционной картине было обнаружено наличие двойников, которые неизбежно появляются при охлаждении кристалла ниже точки структурного фазового перехода ( $T \approx 530$  К) из тетрагональной фазы в орторомбическую [1]. В результате образуется своеобразная доменная структура. Ориентация оси  $\bar{c}$  неизменна в каждом домене, но ориентации осей  $\bar{a}$  и  $\bar{b}$  при пересечении двойниковых границ «переключаются» между двумя возможными положениями. Поэтому далее мы будем говорить о направлении тока в плоскости  $(ab)$ . Значение сопротивления в плоскости  $\text{CuO}_2$  следует рассматривать как некое усредненное между значениями  $\rho_a$  и  $\rho_b$ . Размеры образца составляли примерно  $4 \times 4 \times 3,3$  мм<sup>3</sup>. Для изготовления токовых и потенциальных контактов на контактные площадки осаждали серебро, после чего с помощью серебряной пасты к ним приклеивали тонкие золотые проволочки. Измерения зависимостей  $R(T)$  в нулевом магнитном поле ( $H = 0$ ) проводились посредством четырехзондового метода в режиме постоянного напряжения  $U = 2$  В.

### РЕЗУЛЬТАТЫ

Температурная зависимость сопротивления, при ориентации тока вдоль проводящих плоскостей  $\text{CuO}_2$ , представлена на рис. 2. Видно, что в широком интервале температур  $20 \div 250$  К с достаточно хорошей точностью выполняется закон Мотта (1). Наблюдаемое на рис. 2 отклонение зависимости  $\rho(T)$  от закона Мотта в сторону уменьшения сопротивления при  $T < 20$  К является типичным для купрата  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  в АФ состоянии с низким уровнем допирования. Такое поведение отражает нелинейные эффекты проводимости и сопровождается отклонением от закона Ома, а также – нелинейными эффектам ВАХ и переходом к режиму отрицательного дифференциального сопротивления при понижении температуры и (или) достаточном увеличении тока. Одной из вероятных причин нелинейного поведения может быть электронный перегрев при достаточно сильном токе при фиксированной температуре. Температура носителей заряда становится выше температуры фононов, если носители не успевают достаточно быстро отдать решетке приобретаемую от поля энергию. В этом случае разогрев носителей приводит к изменению подвижности, что и обуславливает нарушение закона Ома (понижение сопротивления). Чтобы избежать влияния подобных эффектов на поведение магнитосопротивления, мы в своих исследованиях проводили измерения МС в области выполнения закона Мотта при  $T \geq 20$  К.

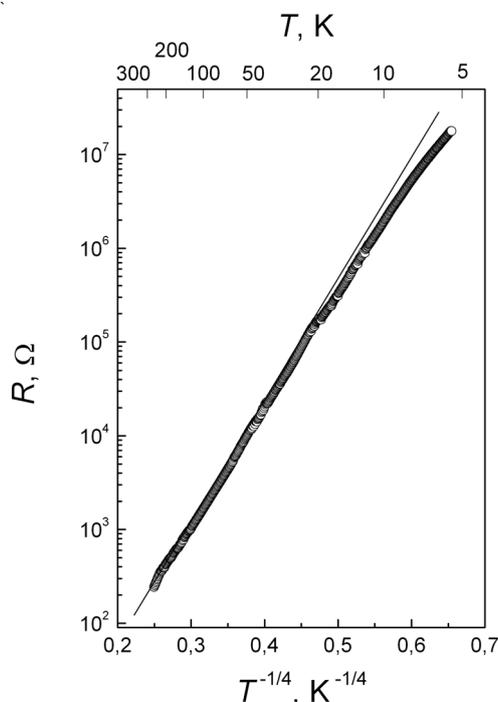


Рис.2. Температурная зависимость сопротивления монокристалла  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  с температурой Нееля  $T_N = 265,5$  К при ориентации тока в плоскости  $ab$  ( $J \parallel ab$ ).

Характерная температура  $T_0$  в области выполнения закона Мотта (1) составляет  $7,48 \times 10^5$  К. Из выраже-

ния:  $kT_0 \approx 16 / [N(E_F)L_c^3]$  [13,14], где  $N(E_F)$  – плотность состояний носителей заряда на уровне Ферми, можно оценить длину локализации  $L_c$ . Используя значение  $N(E_F) = 2,8 \cdot 10^{46}$  Дж<sup>-1</sup>·м<sup>-3</sup> [15], мы получили  $L_c \approx 0,4$  нм ( $\vec{J} \parallel \text{CuO}_2$ ). Эта величина несколько больше межатомного расстояния в плоскости  $\text{CuO}_2$ , но меньше параметров орторомбической решетки,  $a \approx b \approx 0,54$  нм. Значение  $L_c \approx 0,4$  нм свидетельствует о том, что дырки локализованы в некотором объеме со средним диаметром 0,4 нм вблизи примеси или узла решетки. Ранее мы исследовали образцы с длиной локализации  $L_c \approx 1$  нм ( $T_N \approx 232$  К) [6] и  $L_c \approx 2$  нм ( $T_N \approx 180$  К) [8]. Таким образом, можно полагать, что исследуемый в данной работе образец является гораздо более резистивным, чем в предыдущих работах. В данном случае вероятность проявления эффектов конкуренции локализации и сверхпроводимости очень мала. Это дает нам возможность рассмотреть влияние магнитного поля на проводимость непосредственно в режиме ПППДП.

При измерении МС магнитное поле было ориентировано как параллельно транспортному току ( $\vec{H} \parallel \text{CuO}_2$ ), так и перпендикулярно транспортному току ( $\vec{H} \parallel \vec{c}$ ). Величина тока при измерении МС составляла около 100 мкА. Измерения МС проводились в интервале температур  $\sim (20 \div 430)$  К. Однако при  $T > 100$  К в полях до 1,75 Тл МС оказалось очень малым ( $\Delta R(H)/R_0 < 10^{-3}$ ). Это не позволило определить характер влияния магнитного поля на проводимость в интересующей нас области температур выше 100 К. Примеры измерения МС для случая  $\vec{H} \parallel (ab)$  ( $\vec{H} \parallel \vec{J}$ ) представлены на рис. 3а. Для случая поперечного поля  $\vec{H} \parallel \vec{c}$  ( $\vec{H} \perp \vec{J}$ ) – на рис. 3б. На рис. 4 показана температурная зависимость относительного МС для двух ориентаций магнитного поля:  $\vec{H} \parallel (ab)$  и  $\vec{H} \parallel \vec{c}$ . Из представленных данных видно следующее. В интервале температур  $\sim (18 \div 100)$  К, то есть в области выполнения закона Мотта, имеет место отрицательное МС, в первом приближении квадратичное по полю. Величина отрицательного МС растет с понижением температуры, а температурная зависимость МС имеет нелинейный характер. Из рис. 4 видно, что относительное МС существенно больше в случае, когда поле направлено вдоль слоев  $\text{CuO}_2$  параллельно току. Обращает на себя внимание также более резкое изменение МС с температурой при  $T < 25$  К.

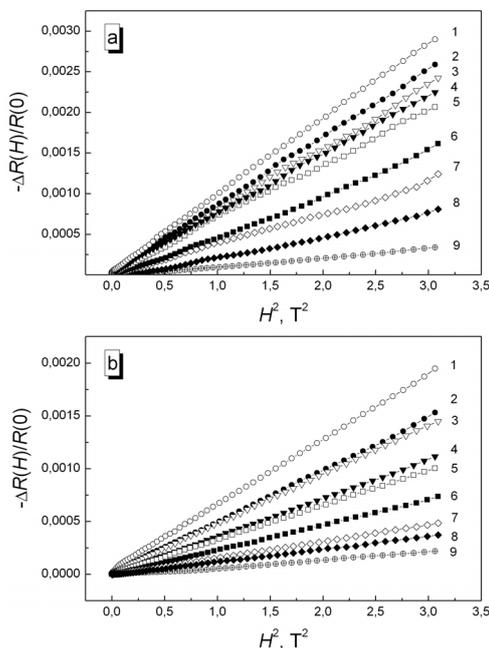


Рис. 3. Магнитополевые зависимости МС при разных температурах  $T$ : 17,95 К (1), 22,32 К (2), 24,20 К (3), 36,23 К (4), 41,19 К (5), 51,23 К (6), 62 К (7), 70,17 К (8), 99,93 К (9). Измерительный ток  $J$  направлен параллельно слоям  $\text{CuO}_2$ : а – поле  $\vec{H} \parallel \vec{J}$ , б –  $\vec{H} \perp \vec{J}$ .

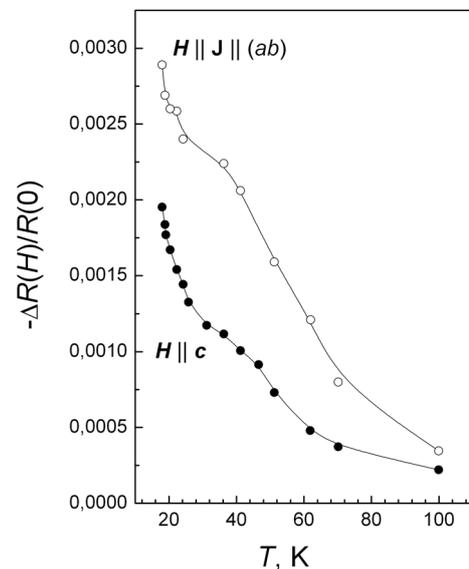


Рис.4. Температурная зависимость относительного МС в поле  $H = 1,75$  Тл для двух направлений магнитного поля

### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Механизм влияния магнитного поля на ПППДП примесных полупроводников, к которым относится и  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ , изучен недостаточно. Для ПППДП следует ожидать положительного МС [14]. Однако в отдельных работах, указывается на наличие отрицательного МС в режиме прыжковой проводимости. Например, в работе [16], где рассматривается сопротивление в магнитном поле магнитного полупроводника  $\text{Eu}_{0,95}\text{La}_{0,05}$ . Один из возможных механизмов МС в режиме ПППДП был рассмотрен также в [17]. В этой работе отрицательное МС

связывается с влиянием магнитного поля на спины локализованных электронов. Как показано в [17], магнитное поле меняет вероятность различных спиновых конфигураций и, таким образом, влияет на вероятность прыжков. Учет спиновых интерференционных эффектов приводит к зависимости радиуса электронной локализации от магнитного поля. Если радиус локализации  $L_c$  растет с увеличением магнитного поля, это приводит к отрицательному МС. Различные интерференционные модели [18-20] широко используются для объяснения отрицательного МС в режиме ПППДП. Можно полагать, что спиновая интерференционная модель МС — один из вероятных сценариев появления отрицательного МС в режиме ПППДП для  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ .

Следует отметить, однако, что полученных в настоящей работе данных недостаточно для того, чтобы однозначно судить о применимости спинового механизма отрицательного МС к  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ . Например, полученные данные не позволяют точно определить характер температурной зависимости МС. Представляет интерес также выяснить влияние тока на МС в области ПППДП, поскольку электронный разогрев может влиять на спиновое упорядочение и тем самым — на вероятности прыжков носителей. Получение новых данных, подтверждающих спиновую природу отрицательного МС в  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  безусловно, представляет интерес с точки зрения возможного влияния спиновой подсистемы на транспорт носителей заряда в оксидах меди.

Таким образом, полученные в данной работе результаты, показывают, что продолжение исследований проводимости ВТСП в магнитном поле в режиме ПППДП является целесообразным. В дальнейшем мы планируем исследовать поведение МС АФМ купрата  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  в области выполнения закона Мотта при разных значениях тока, а также исследовать поведение МС родственной системы  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CO}_4$  с разным уровнем допирования стронцием.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kastner M.A., Birgeneau R. J., Shirane G., Endoh Y. Magnetic, transport, and optical properties of monolayer copper oxides // *Rev. Mod. Phys.* – 1998. – Vol. 70. – P.897-928.
2. Wang C.C., Zhu J. Magnetic transitions in lightly doped  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  // *Supercond. Sci. Technol.* – 2003. – Vol. 16. – P.518-520.
3. Vaknin D., Sinha S. K., Moncton D.T., Johnston D.C., Newsam J.M., Safinya C.R., King Ir. H.E. Antiferromagnetism in  $\text{La}_2\text{CuO}_{4-y}$  // *Phys. Rev. Lett.* – 1987. – Vol. 58. – P.2802-2805.
4. Thio T., Thurston T.R., Preyer N.W., Picone P.J., Kastner M.A., Gabbe D.K., Chen C.Y., Birgeneau R.Y., Aharony A. Antisymmetric exchange and its influence on the magnetic structure and conductivity of  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  // *Phys. Rev. B.* – 1988. – Vol. 38. – P.905-908.
5. Carlson E. W., Emery V. J., Kivelson S. A., Orgad D. Concepts in High Temperature Superconductivity // Preprint cond-mat/0206217.
6. Belevtsev B.I., Dalakova N.V., Panfilov A.S. Superconductivity effects in hopping conductivity in single-crystal  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  c with excess oxygen // *Low Temp. Physics.* – 1997. – Vol. 23. – P. 274-282.
7. Belevtsev B.I., Dalakova N.V., Panfilov A.S. Non-linear effects in hopping conduction of single-crystal  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  // *Low Temp. Physics.* – 1998. – Vol. 24. – P.815-823.
8. Belevtsev B.I., Dalakova N.V., Panfilov A.S., Bondarenko A.V., Braude I.S. Anisotropy of the hopping magnetoresistance of antiferromagnetic  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  // *Low Temp. Physics.* – 2003. – Vol. 29. – P.300-304.
9. Chaillout C., Chenavas J., Cheong S-W., Chaillout C., Chenavas J., Cheong S.W., Fisk Z., Marezio M., Morosin B., Schirber J.E. Two – phase structural refinement of  $\text{La}_2\text{CuO}_{4.032}$  at 15K // *Physica C.* – 1990. – Vol. 170. – P.87-94.
10. Thio T., Chen C.Y., Freer B.S., Gabbe D.R., Jenssen H.P., Kastner M.A., Picone P.J., Preyer N.W., Birgeneau R.J. Magnetoresistance and spin-flop transition in single-crystal  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$  // *Phys.Rev. B.* – 1990. – Vol. 41. – P.231-239.
11. Gogolin A.O., Ioselevich A.S. A mechanism for hopping magnetoresistance in antiferromagnetic insulators with application to  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  // *Sov. Phys. JETP.* – 1990. – Vol. 71(2). – P.380-392.
12. Belevtsev B.I., Dalakova N.V., Savitsky V.N., Bondarenko A.V., Panfilov A.S., Braude I.S. Magnetoresistive study of the antiferromagnetic–weak ferromagnetic transition in single-crystal  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  // *Low Temp. Physics.* – 2004. – Vol. 30. – P.411-416.
13. Mott, N. F. and Davis, E. A. *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials.* – Clarendon Press. Oxford, 1979. – 368 p.
14. Shklovskii B.I. and Efros A.L. *Elektronnyye svoystva legirovannykh poluprovodnikov.* – M: Nauka, 1979. – 416 p. (in Russian).
15. Jarlborg T. Band structure and electron-phonon coupling in the  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  superconductors // *Helv. Phys. Acta.* – 1988. – Vol. 61. – P.421-425.
16. Methfessel S., Mattis D. *Magnetic Semiconductors* // *Handbook of Phys.* / S. Flugge and H. P. J. Wijn – Berlin: Springer-Verlag, 1968. – Vol. 18/1. – P.389–562.
17. Spivak B.Z. Anomalnoe spinovoe magnitosoprotivlenie v oblasti pryzhkovoi provodimosti s peremennoi dlinoi pryzhka // *ZETF.* – 1984. – Vol. 87. – P.1371-1380. (in Russian)
18. Nguyen V.L., Spivak B.Z. and Shklovskii B.I. Aaronov-Bohm oscillations with normal and superconducting flux quanta in hopping conductivity // *JETP Letters.* – 1985. – T. 41. – C.42-45.
19. Pollak M., Shklovskii B.I. (Eds.) *Hopping Transport in Solids.* – Elsevier Science Publishers B.V. – New York, 1991.
20. Sivan U., Entin-Wohlman O., Imry Y. Orbital Magnetoconductance in the Variable-Range–Hopping Regime // *Phys. Rev. Lett.* – 1988. – Vol. 60. – P.1566-1569.

(blank line)

(blank line)

**PACS:** Here you must specify PACS codes

(blank line)

## INSTRUCTIONS FOR PREPARING MANUSCRIPT (TITLE)

(blank line)

**N.N. Author<sup>1</sup>, N.N. Co-author(s)<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Affiliation*

<sup>2</sup>*Affiliation (if different from Authors affiliation)*

*e-mail: [corresponding\\_authors@mail.com](mailto:corresponding_authors@mail.com)*

Received January 14, 2014

(blank line)

Each paper must begin with an abstract. The abstract should be typed in the same manner as the body text (see below). Please note that these Instructions are typed just like the manuscripts should be. The abstract must have at least 500 phonetic symbols, supplying general information about the achievements, and objectives of the paper, experimental technique, methods applied, significant results and conclusions. Page layout: the text should be printed on the paper A4 format, at least 3 pages, with margins of: Top - 3, Bottom, Left and Right - 2 cm. The abstract should be presented in English (only for foreign authors), Ukraine and Russian.

**KEYWORDS:** there, must, be, at least, 5 keywords

(blank line)

This is introduction section. This paper contains instructions for preparing the manuscripts. The text should be prepared in .doc format (using MS Word).

(blank line)

### INSTRUCTIONS

The text should be typed as follows:

- title: Times New Roman, 12 pt, ALL CAPS, bold, 1 spacing, centered;
- authors: name, initials and family names; Times New Roman, 12 pt, bold, 1 spacing, centered;
- affiliation(s): Times New Roman, 9 pt, italic, 1 spacing, centered;
- abstract: Times New Roman, 9 pt, 1 spacing, justified;
- body text: Times New Roman, 10 pt, 1 spacing, justified; paragraphs in sections should be indented right (tabulated) for 0.75 cm;
- section titles: Times New Roman, 10 pt, bold, 1 spacing, centered, without numbering, one line should be left, blank above section title;
- subsection titles: Times New Roman, 10 pt, bold, 1 spacing, centered, without numbering in accordance to the section (see below), one line should be left blank above subsection title;
- figure captions: width of the figure should be 85 or 170 mm, figures should be numbered (Fig. 1) and titled below figures using sentence format, Times New Roman, 9 pt, 1 spacing, centered (if one line) or justified (if more than one line); one line should be left blank below figure captions;
- table captions: width of the table should be 85 or 170 mm, tables should be numbered (Table 1.) and titled above tables using sentence format, Times New Roman, 10 pt, 1 spacing, centered (if one line) or justified (if more than one line), tables should be formatted with a single-line box around the outside border and single ruling lines between rows and columns; one line should be left blank below tables;
- equations: place equations centered, numbered in Arabic (1), flush right, equations should be specially prepared in MathType; one line should be left blank below and above equation.

(blank line)

### Additional instructions

Numerated figures and tables should be embedded in your text and placed after they are cited. Only black and white drawings and sharp photographs are acceptable. Letters in the figures should be 3 mm high. The figures should be presented in one of the following graphic formats: jpg, gif, pcx, bmp, tif.

(blank line)

### REFERENCES

**Titles of journals, articles and author names in references should be given in Roman script.** References should be numbered in the order of referring in the text, e.g. [1], [2-5], etc. Do not superscript your reference numbers. Cite references as in journal format. The full references should be listed in numerical order of citation in the text at the end of the paper (justified), Times New Roman, 9 pt, 1 spacing. References should be given in the following form:

#### *Journals*

1. Holzwarth G., Eckart G. Fluid-dynamical approximation for finite Fermi systems // Nucl. Phys. - 1979. - Vol. A325. - P.1-30.

#### *Books*

2. Bertsch G.F., Broglia R.A. Oscillations in finite quantum systems. Ch. 6. - Cambridge: Cambridge University, 1994. - 150 p.

#### *Chapters*

3. Van der Woude A. The electric giant resonances // Electric and magnetic giant resonances in nuclei / Ed. by J. Speth. - Singapore: World Scientific P.C., 1991. - P. 99-232.

#### *Conference or symposium proceedings*

4. Smolanzuk R., Skalski J., Sobiczewski A. Masses and half-life of superheavy elements // Proc. of the International Workshop 24 on Gross Properties of Nuclei and Nuclear Excitations / Ed. by H. Feldmeier et al. - GSI, Darmstadt, 1996. - P.35-42.

### Special Notes

1. Use International System of Units (SI system). 2. It is undesirable to use acronyms in the titles. Please define the acronym on its first use in the paper. 3. Refer to isotopes as <sup>14</sup>C, <sup>3</sup>H, <sup>60</sup>Co, etc.

Наукове видання

**СХІДНО-ЄВРОПЕЙСЬКИЙ ФІЗИЧНИЙ ЖУРНАЛ**

**Том 2 Номер 3**

**EAST EUROPEAN JOURNAL OF PHYSICS**

**Volume 2 Number 3**

Збірник наукових праць  
англійською, українською, російською мовами

Коректор - Коваленко Т.О.  
Технічний редактор - Гірник С.А.  
Комп'ютерне верстання - Гірник С.А.

Підписано до друку 4.10.2015. Формат 60x84 /8. Папір офсетний. Друк  
ризографічний.

Ум. друк. арк. 12,3. Обл.-вид. арк. 9,8.  
Тираж 300 пр. Зам. № Ціна договірна

61022, Харків, майдан Свободи, 4  
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
Видавництво

Надруковано: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
61022, Харків, майдан Свободи 4, тел. +380-057-705-24-32  
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3367 від 13.01.09