ISSN 2224-8412



16(1) 🔷 2017

математическая физика и моделирование



Nanostructures. Mathematical physics & modelling

# НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование

Nanostructures. Mathematical Physics & Modelling

2017, volume 16(1)

# Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Редколлегия:

В.А. Аветисов, И.В. Волович, В.В. Гусаров, П.Н. Дьячков, Р.Г. Ефремов, М.В. Карасев (зам. главного редактора), Ю.Е. Лозовик, М.А. Мазо, В.П. Маслов (главный редактор), А.В. Махиборода (ответственный секретарь), А.Ю. Морозов, С.А. Никитов, Г.Э. Норман, Р.А. Сурис, В.А. Тулин, В.Е. Фортов, А.С. Холево, А.Р. Хохлов, А.В. Чаплик, Л.А. Чернозатонский, К.В. Шайтан

Электронная версия журнала размещается на сайте http://nano-journal.ru

Адрес редакции: 123458, Москва, ул. Таллинская, д. 34, каб. 429 +7 (495) 916-88-76 nanostructures@hse.ru

Москва

© 2017, Европейский центр по качеству

## Содержание

Ю.М. Брук, А.Л. Стасенко
Метод размерностей и качественные оценки физических величин
Н.А. Дюжев, Е.Э. Гусев, П.Ю. Глаголев
Численное моделирование термического напряжения при формировании
мембранных микро-электромеханических структур на базе пакетов
программ TCAD и COMSOL Multiphysics
В.И. Кретов
Вычисление напряженности электрического поля в кремниевом
автоэмиссионном нанокатоде
С.А. Позднеев
Расчеты резонансов в атомной, молекулярной и ядерной
физики на основе квантовой теории рассеяния
Информация и правила для авторов

## Contents

Ju.M. Bruk, A.L. Stasenko
Dimensions method and entities assessments for physics quantytys
N.A. Djuzhev, E.E. Gusev, P.U. Glagolev
Numerical simulation of thermal stress in microelectromechanical structures
with software package TCAD and COMSOL Multiphysics
V.I. Kretov
Calculation of electric field strength in field-emission silicon nanocathode
S.A. Pozdneev
Calculations of resonances in nuclear, atomic and molecular
physics on the basis of the quantum theory of scattering
The information and rules for authors

### МЕТОД РАЗМЕРНОСТЕЙ И КАЧЕСТВЕННЫЕ ОЦЕНКИ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

Ю.М. Брук<sup>1</sup>, А.Л. Стасенко<sup>2,3</sup> \*

<sup>1</sup>Физический институт им.П.Н.Лебедева Российской академии наук (ФИАН) <sup>2</sup>Центральный аэрогидродинамический институт им. проф. Н.Е.Жуковского (ЦАГИ) <sup>3</sup>Московский физико-технический институт (Государственный университет, МФТИ)

yubruk@gmail.com, stasenko@serpantin.ru

Поступила 12.04.2016

В предлагаемом обзоре излагается методика построения математических формул в разных разделах физики, основанная на соображениях размерностей и оценках порядков величин. Приведен большой набор конкретных задач, иллюстрирующих один из самых результативных методов качественного анализа физических процессов и явлений. Основные идеи метода важны для качественного моделирования и, часто, - для количественных оценок, предшествующих точным решениям. Метод размерностей тесно связан с подобием в физике и математике, активно обсуждаемым в современной синергетике.

УДК 530.1, 531.22

#### 1. Не начинай вычислений, пока не знаешь ответа

Едва ли не каждое выступление на научных семинарах или конференциях, где обсуждаются новые теоретические или экспериментальные работы, начинается с качественного описания и оценки того эффекта, о котором хочет рассказать выступающий.

<sup>\*</sup> Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, грант 16-19-10472.

Даже в очень подробном докладе или лекции нет возможности рассказать о всех экспериментальных деталях или всех теоретических хитростях, которые были существенны для выполнения самой работы, для решения той или иной задачи. Но есть вопросы, о которых докладчик должен сказать, не дожидаясь пока их зададут слушатели. К таким вопросам всегда и прежде всего относится оценка порядка величины ожидаемого эффекта, оценка, без которой вообще не начинают решать сколько-нибудь сложные физические задачи – будь то постановка нового эксперимента или построение новой теоретической модели. Трудность самой постановки новых задач часто связана именно с возможностью оценки ожидаемых результатов. Вот что пишет в книге "Великие эксперименты в физике" [1] английский физик-экспериментатор Г.Липсон:

"Находятся люди, которые считают, что у ученого не должно быть никакой предвзятой идеи относительно исхода его эксперимента; ученый, – говорят они, – должен быть совершенно объективным. Это вздор. Настоящий ученый почти всегда ставит эксперименты с целью проверить ожидаемые результаты. Он испытывает удовольствие, обнаружив то, что ожидал, и разочарование когда результаты эксперимента не совпадают с ожидаемыми. Если же ученый ничего не ожидает получить, то он не может быть вполне уверен в значимости своих результатов".

Приступая к измерениям или расчетам, мы хотим отдавать себе отчет в том, что и как можно измерять или вычислять. Для этого нужно научиться строить простые схемы явлений. В немалой степени этому помогает использование аналогий между физическими процессами, иногда и довольно далекими друг от друга.

Построение физических моделей и использование аналогий тесно связаны с умением производить оценки. Часто оценки и аналогии подсказывают и путь более точного решения задачи. А иногда (и не так уж редко!) точный расчет или измерение какой-то величины сделать трудно или даже невозможно. В таких случаях роль оценок и моделей становится определяющей.

В этой статье на многих примерах мы будем обсуждать как физики делают оценки при решении разных физических задач, как строятся простые модели явлений и как помогают этому физические аналогии. Всему этому лучше всего учиться именно на конкретных примерах. Набравшись опыта, читатель сможет потом решить самостоятельно большое число других задач.

Делать оценки очень помогает метод размерностей. Этому методу и его применениям мы уделяем в статье большое внимание. Не будет преувеличением сказать, что метод размерностей обладает "максимальным кпд", экономя горы бумаги теоретикам, деньги и время экспериментаторам. Быстрая оценка масштабов исследуемых явлений, построение принципиальной схемы эксперимента, получение качественных и функциональных зависимостей, восстановление забытых формул на экзаменах – таковы достоинства и приложения метода размерностей.

Само собой разумеется, что оценки, построение моделей и использование аналогий – это только первый этап исследования физических процессов. За этим этапом должно следовать более аккуратное и, по возможности, более точное изучение обсуждаемых явлений.

Но "очень часто упрощенная модель проливает больше света на то, как в действительности устроена природа явления, чем любое число вычислений ab initio (из начальных принципов, лат.) для различных конкретных случаев, которые, даже если они правильны, часто содержат так много деталей, что скорее скрывают, чем проясняют истину". Эти слова принадлежат известному физику-теоретику, лауреату Нобелевской премии Ф.Андерсону [2]. Самого его никак нельзя упрекнуть в пренебрежении точными расчетами или неуважении к экспериментальным исследованиям. Любопытно, однако, привести здесь же и продолжение его высказывания:

"Возможность рассчитать или измерить что-либо слишком точно может быть скорее помехой, а не преимуществом, так как часто то, что измеряется или рассчитывается, с точки зрения выяснения механизма явления оказывается несущественным. В конце концов идеальный расчет просто копирует Природу, а не объясняет ее".

Перед исследователями могут ставиться разные задачи. Пожалуй, наиболее интересной является задача объяснения того или иного явления. Другой задачей, которую никак нельзя считать менее важной или менее трудной, является задача точного измерения или вычисления каких-то величин. Бывает и так, что принципиальная сторона дела ясна, а проблема заключается в повышении точности эксперимента или расчета. С другой стороны, очень часто задачи нельзя так разделять – физическое явление получает свое полное и окончательное объяснение только после точного расчета или измерения. Тем не менее, во всех случаях полезно руководствоваться правилом, сформулированным крупным специалистом по теории атомного ядра и теории гравитации, выдаюцимся педагогом Дж.Уилером:

"Никогда не начинай вычислений, пока не знаешь ответа. Каждому вычислению предпосылай оценочный расчет: привлеки простые физические соображения (симметрия!, инвариантность!, сохранение!) до того, как начинать подробный вывод; продумай возможные ответы на каждую загадку. Будь смелее: ведь никому нет дела до того, что

именно ты предположил. Поэтому делай предположения быстро, интуитивно. Удачные предположения укрепляют эту интуицию. Ошибочные предположения дают полезную встряску" (Правило Уилера приведено в книге: Э. Тейлор, Дж. Уиллер "Физика пространства-времени" [3]) Давайте постараемся и мы следовать этому разумному и полезному совету.

#### 2. Первое знакомство с методом размерностей

Начиная знакомиться с методом размерностей, рассмотрим простую задачу (задача Релея см. [4]). Пусть между точками A и B натянута струна, на середине струны находится тяжелый шарик. Масса шарика M намного больше массы самой струны. Струну оттягивают и отпускают. Пусть максимальное расстояние  $x_0$  от шарика до прямой AB мало по сравнению с длиной отрезка AB, середину этого отрезка обозначим буквой C. Примем еще, что длина AC = CB = a. Довольно ясно, что шарик будет совершать колебания. Если амплитуда колебаний  $a_0 \ll a$ , процесс будет гармоническим. Нас интересует вопрос о том, как будет зависеть частота этих колебаний  $\omega$  от натяжения струны T, массы шарика M и размера a. Предположим, что величины  $\omega$ , T, M и a связаны степенной зависимостью

 $\omega \sim T^{x}M^{y}a^{z}.$ 

Здесь *x*, *y* и *z* – некоторые числа, которые нам предстоит сейчас определить. Поступим для этого следующим образом. Выпишем размерности – наименования единиц, в которых измеряются интересующие нас величины, в какой-либо системе единиц, например, в системе СИ:

 $[\omega] = c^{-1}, [T] = H = \kappa \Gamma \cdot M \cdot c^{-2}, [M] = \kappa \Gamma, [a] = M$ 

(квадратные скобки как раз и обозначают размерность стоящей в них величины).

Если написанная выше формула выражает реальную физическую закономерность, то размерности правой и левой частей этой формулы должны совпадать. Поэтому можно записать равенство:

$$\mathbf{c}^{-1} = \mathbf{H}^{x} \mathbf{\kappa} \mathbf{\Gamma}^{y} \mathbf{M}^{z} = \mathbf{\kappa} \mathbf{\Gamma}^{x} \mathbf{M}^{x} \mathbf{c}^{-2x} \mathbf{\kappa} \mathbf{\Gamma}^{y} \mathbf{M}^{z}$$

Очевидно, что должны удовлетворяться следующие уравнения для x, y и z:

$$(x+y) = 0, (x+z) = 0, -2x = -1.$$

Следовательно, x = 1/2; y = -1/2; z = -1/2, а значит  $\omega \sim T^{1/2}M^{-1/2}a^{-1/2}$ .

Мы не пишем в формулах, полученных таким методом, знак равенства, заменяя его волнистой чертой. Следует иметь ввиду, что метод размерностей не может помочь в вычислении численных коэффициентов в формулах.

Интересно отметить, что точная формула для частоты отличается от найденной нами всего в  $\sqrt{2}$  раз ( $\omega^2 = 2T/Ma$ ). Другими словами, мы можем в данном случае считать, что оценку для  $\omega$  мы получили не только качественную (в смысле зависимости от параметров *T*, *M* и *a*), но и количественную. По порядку величины найденная степенная комбинация *T*, *M* и *a* дает правильное значение частоты.

Нас и в дальнейшем часто будет интересовать оценка по порядку величины. В простых задачах довольно часто можно считать неопределяемые методом размерностей коэффициенты числами порядка единицы. Это, однако, - не строгое правило. Окончательный вывод о величине численного коэффициента можно сделать, конечно, после сравнения с точной формулой, либо из каких-то дополнительных соображений. Мы будем обсуждать подобные вопросы позже.

А сейчас стоит вернуться к рассмотренной задаче и почетче сформулировать предположения, которые мы сделали. Во-первых, мы считали, что натяжение струны Tприблизительно одинаково, когда струна вытянута вдоль линии AB, и когда она оттянута. Это предположение основано на том, что струна оттянута несильно, то есть  $x_0 \ll a$ . Во-вторых, мы предположили, что действительно существует связь между параметрами  $\omega$ , T, M и a. В-третьих, мы считали, что формула, выражающая эту связь, имеет степенной вид:  $\omega \sim T^x M^y a^z$ .

Метод размерностей помогает находить функциональные зависимости между разными параметрами задачи, но только для тех ситуаций, когда эти зависимости степенные. К счастью, таких зависимостей в природе довольно много, и метод размерностей становится хорошим помощником.

#### **3.** Правило *N* – *K* = 1

Понятие размерности физической величины вводится тогда, когда уже выбраны некоторые основные физические величины и установлены единицы для их измерения.

В механике традиционными основными величинами мы считаем массу, длину и время. В системе СИ эти величины измеряются соответственно в килограммах, метрах и секундах, в системе СГС в граммах, сантиметрах и секундах.

Выражение единиц измерения **произвольной** физической величины через единицы измерения основных величин и называется размерностью. Величины, не включенные в число основных, называются производными. Таковыми являются, например, Ньютон, дина, Джоуль, эрг и т.д.

Если мы рассматриваем задачи, в которых фигурируют немеханические величины (например, электрический заряд, ток, потенциал), – можно увеличить число основных величин. В системе СИ в число основных величин включают силу тока, измеряют ее в Амперах. Точно также в термодинамике в число основных величин можно включить температуру, единица измерения ее – Кельвин.

В общем случае выбор основных величин и единиц для их измерения может производиться разными способами. Здесь, конечно, многое зависит от удобства, традиций и существующих стандартов и соглашений.

В механике с одинаковым успехом можно пользоваться и системой СИ, и системой СГС. Общее у этих систем то, что основными величинами являются масса, длина и время. Иногда говорят, что эти системы принадлежат к классу *MLT*. Размерностью силы в этом классе можно считать выражение  $MLT^{-2}$ , размерностью энергии  $ML^2T^{-2}$  и т.д. Заменяя в этих выражениях M на кг или г, L на м или см, T на с, мы получим размерности силы и энергии в системах СИ или СГС соответственно.

Для нас очень важно отметить, что пользоваться методом размерностей можно в любой системе единиц. Каждый раз, конечно, выражения для размерностей различных величин нужно писать в одной, заранее выбранной системе.

Предположим, что в какой-то задаче мы отыскиваем функциональную связь между N величинами. Предполагая степенную зависимость одной из величин от других и выписывая размерности этих величин, мы можем пытаться построить интересующую нас формулу. Если все размерности выражаются через размерности K основных величин, и если при этом N - K = 1, мы можем утверждать, что искомая формула единственно возможная. Это правило можно проиллюстрировать уже рассмотренным выше примером с колебаниями шарика на струне. Для этого случая у нас было четыре параметра:

 $\omega$ , *T*, *M* и *a*; размерности всех этих величин выражались через размерности трех основных величин – кг, м, с. Другими словами: *N* = 4, *K* = 3 и *N* – *K* = 1. То, что формула  $\omega \sim T^{1/2}M^{-1/2}a^{-1/2}$  единственно возможная, следует из того, что система уравнений для определения показателей степеней *x*, *y* и *z* имела единственное решение.

Рассмотрим теперь еще одну очень поучительную задачу о колебаниях сферической капли. Простое решение этой задачи с помощью соображений размерности обсуждалось лордом Релеем еще в 1915 году. К этой задаче сводится, по существу, и вопрос о колебаниях атомных ядер, которые можно считать каплями ядерного вещества. Здесь же мы обсудим сначала простейшую ситуацию.

Пусть из круглого отверстия вытекает сферическая капля. Довольно естественно считать, что в равновесии капля должна иметь сферическую форму. Поверхностная энергия имеет при этом минимум, а всякая система стремится попасть в состояние с минимальной энергией. Даже очень малые деформации капли приведут к тому, что силы поверхностного натяжения "заставят" ее пульсировать с некоторой частотой. Под пульсациями мы должны понимать сейчас периодические изменения формы капли. Мы отвлекаемся сейчас от вопроса о том, сколь быстро затухают подобные колебания. Нас интересует вопрос о частоте (или периоде) процесса. Эта частота может зависеть, очевидно, от величины поверхностного натяжения  $\sigma$ , плотности жидкости  $\rho$  и радиуса капли *а*. Запишем формулу:

$$\omega \sim \sigma^x \rho^y a^z$$

и попробуем найти числа x, y, z. Заметьте, кстати, что под  $\sigma$  можно понимать и плотность поверхностной энергии с размерностью (Дж/м<sup>2</sup>), и силу, отнесенную к единице длины (Н/м).Выпишем размерности всех параметров в системе СИ:

$$[\omega] = c^{-1}, \ [\sigma] = \kappa \Gamma \cdot c^{-2}, \ [\rho] = \kappa \Gamma \cdot M^{-3}, \ [a] = M.$$

Уравнения для определения x, y, z получатся из соотношения

$$c^{-1} = \kappa \Gamma^{x} c^{-2x} \kappa \Gamma^{y} M^{-3y} M^{z}$$
.

Для трех неизвестных чисел есть три уравнения:

-1 = 2x; (x + y) = 0; -3y + z = 0.

Эта система уравнений имеет единственное решение:

 $x = 1/2; \quad y = -1/2; \quad z = -3/2,$ 

что опять находится в полном соответствии с правилом N - K = 1. Окончательно, интересующая нас формула для частоты колебаний запишется так:

$$\omega \sim \left(\frac{\sigma}{\rho a^3}\right)^{1/2}.$$

Эта формула подсказывает нам сразу же и принципиально возможный способ экспериментального определения величины  $\sigma$ . Для этого нужно знать плотность жидкости  $\rho$ , радиус капли *a* и определить на опыте частоту  $\omega$ . То, что мы не знаем численного коэффициента в этой формуле, не должно быть серьезным препятствием. Мы можем, например, проделать опыт еще раз с жидкостью, для которой величина поверхностного натяжения известна. Из такого дополнительного опыта определится уже и численный коэффициент. После этого можно вычислять численные значения  $\sigma$  для интересующей нас жидкости.

По существу мы сталкиваемся сейчас с простым случаем моделирования – колебания капли исследуемой жидкости можно промоделировать колебаниями капли жидкости с известными  $\sigma$  и  $\rho$ . В таких случаях говорят еще и о подобии физических явлений (в данном случае – колебаний формы капель) в двух разных жидкостях.

И еще одно любопытное замечание. Перепишем формулу для частоты колебаний так:  $(\sigma/\rho) \sim a^3 \omega^2$ . Учтем теперь, что частота обратно пропорциональна периоду колебаний. Параметры  $\sigma$  и  $\rho$  характеризуют жидкость и потому одинаковы для любых капель этой жидкости. Пусть T – период колебаний капельки, тогда  $T^2 = \text{const} \cdot a^3$ .Это важное утверждение. Если взять две капельки из одной жидкости, но разных радиусов, отношение квадратов периодов их колебаний будет равно отношению кубов их размеров! Как тут не вспомнить закон Кеплера для движения планет вокруг Солнца! Там,

правда, нужно говорить не о радиусах шаров-планет, а о радиусах их орбит. Подумайте сами – нельзя ли извлечь что-нибудь полезное из этой аналогии?

#### 4. А если N-K > 1 ?

Уже при выписывании системы параметров, связь между которыми мы хотим отыскать, нужно отдавать себе отчет в том, что существенно и что несущественно для конкретного физического явления. Если речь идет о динамике (например, колебаниях), то в числе параметров должны быть силовая и массовая характеристики. Роль первой из них в предыдущем примере играла величина  $\sigma$ , роль второй – плотность жидкости  $\rho$ .

По существу мы считали выше, что колебания капли определяются поверхностным натяжением. Полученное нами решение безусловно годится, если капля колеблется в кабине космического корабля. А годится ли оно вблизи поверхности Земли? Не должны ли мы учесть еще и земное тяготение, другими словами – вес капли?

Предположим, что мы захотели это сделать. Поступим сначала формально и запишем:

 $\omega \sim \sigma^x \rho^y a^z g^t$ ,

*g* – здесь ускорение свободного падения, *x*, *y*, *z* и *t* – снова неизвестные числа. Выписывая размерности всех величин, приходим к соотношению:

 $c^{-1} = \kappa \Gamma^{x} c^{-2x} \kappa \Gamma^{y} M^{-3y} M^{z} M^{t} c^{-2t}$ .

Однако теперь уже число параметров N = 5, а число основных величин, через размерности которых выражаются размерности всех параметров, K = 3 и N - K = 2! Система же уравнений для определения x, y, z и t – неопределенная:

$$-1 = -2x - 2t; \quad x + y = 0; \ -3y + z + t = 0$$

(всего три уравнения, а неизвестных – четыре). Решение такой системы уже не единственное, и возникает вопрос – как же нам теперь поступить? Было бы досадно, если бы мы не смогли выпутаться из этого затруднения. Попробуем рассуждать так. Зафиксируем пока число *x*, то есть оставим его неопределенным (безразмерным!) параметром. Остальные неизвестные выразим через него:

$$y = -x; \ z = -2x - 1/2; \ t = \frac{1}{2} - x.$$

Тогда

$$\omega \sim \left(\frac{g}{a}\right)^{1/2} \left(\frac{\sigma}{\rho a^2 g}\right)^x.$$

Метод размерностей нам больше ничего сейчас не даст, и нужно привлечь дополнительные соображения. Ограничимся случаем малых капель. Вес капли ~  $\rho a^3 g$ , а силы поверхностного натяжения ~  $\sigma a$ . Ясно, что для достаточно малых *a* силы поверхностного натяжения больше веса. Опуская численные множители, напишем неравенство:  $\sigma a \gg \rho a^3 g$  для малых *a*. Это неравенство эквивалентно такому:

$$a \ll \left(\frac{\sigma}{\rho g}\right)^{1/2}.$$

Именно для таких капель вес не должен быть определяющим колебания параметром. Но тогда и ускорение g не должно входить в формулу для  $\omega$ . Поэтому  $x = 1/2^{-1}$ .

Мы вернулись, таким образом, к формуле, полученной раньше. Остается, возможно, все же некоторая неудовлетворенность тем, что нам пришлось прибегнуть к дополнительным аргументам и ограничиться частным случаем достаточно малых капелек. Про колебания капель (или больших шаров), когда нужно учитывать гравитацию, речь еще пойдет в дальнейшем. Пока же стоит подчеркнуть, что метод размерностей вовсе не есть универсальный инструмент для получения формул в физике. Он "многое мо-

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Написанные неравенства верны, разумеется, с точностью "по порядку величины". Неучтенные численные коэффициенты в этой задаче также порядка единицы.

жет" и сам по себе, но не так уж редки и такие задачи, когда его разумно комбинировать тем или иным способом с другими идеями и методами.

#### 5. Метры вдоль и поперек

В некоторых случаях удобно различать продольные и поперечные размеры тел и вводить различные единицы для измерения длин в разных направлениях. Этот прием позволяет увеличить число основных величин и часто оказывается полезным. Попробуем, например, оценить с помощью метода размерностей длину свободного пробега молекул в газе. Молекулы имеют конечные размеры и могут сталкиваться друг с другом даже в достаточно разреженных газах. Среднее расстояние, пробегаемое молекулами между двумя последовательными соударениями, мы и называем длиной свободного пробега. Обозначим ее буквой l, размер (радиус или диаметр) молекулы буквой a, а плотность молекул в газе буквой n. Мы условно считаем молекулы шариками, а под плотностью здесь понимаем число частиц в единичном объеме.

Размерность *n* есть, очевидно,  $M^{-3}$ , размерности *l* и a - M. Основная величина в данном случае одна – длина, параметров, связь между которыми мы хотим найти, три: *l*, *a* и *n*. Разность N - K = 2. С точки зрения размерностей нас устраивают в качестве "допустимых" любые комбинации вида:

$$l \sim a; \ l \sim n^{-1/3}; \ l \sim \left(na^2\right)^{-1}; \ l \sim a^3 n^{2/3}, \ \dots$$

Какую же из них выбрать? Неужели метод размерностей не поможет нам найти правильную формулу? Это было бы тем более обидным, что задача – то ведь совсем простая, а метод размерностей "работает", как мы знаем, и в более сложных случаях. Вот здесь-то и помогает упомянутый в начале этого раздела прием.

Условимся следить за какой-нибудь одной молекулой. "Привяжем" к ней систему прямоугольных координат, причем одну из осей направим вдоль траектории. Здесь мы должны иметь ввиду, что в первом приближении между двумя последовательными столкновениями молекула летит по прямой линии. Длину пробега естественно измерять в "продольных" метрах – м<sub>||</sub>. Поперечные размеры молекул, "мешающих" движению нашей "избранницы", будем измерять соответственно в "поперечных" метрах – м<sub>⊥</sub>. А как быть с плотностью? Какие метры выбрать здесь? Считая, что поперечные по отношению к траектории молекулы направления эквивалентны, мы легко сообразим,

что объем произвольного в том числе и единичного, кубика, построенного на наших координатных осях, естественно измерять в  $M_{\parallel}M_{\perp}^2$ . Но тогда размерностью числа частиц в единичном объеме (*n*) будет  $M_{\parallel}^{-1}M_{\perp}^{-2}$ , а размерностью поперечных сечений молекул, "мешающих" интересующему нас движению  $[a_{\perp}^2] = M_{\perp}^2$ .

После всех этих ухищрений мы из множества выписанных выше "возможных" зависимостей l от n и a совершенно однозначно выбираем единственную формулу:  $l \sim n^{-1}a^{-2}$ . "Расслоив" метры на "параллельные" и "перпендикулярные", мы увеличили тем самым число основных величин, их стало две, и теперь разность (N - K) снова равна единице.

Введенные нами единицы носят название направленных, или векторных, единиц длины. Чтобы получше освоиться с ними, вернемся к уже обсуждавшейся выше задаче о колебаниях капельки. Предположим снова, что частота колебаний может быть связана с величиной поверхностного натяжения  $\sigma$ , плотностью  $\rho$ , размером капли *a* и ускорением свободного падения *g*. Выпишем размерности основных величин: кг, с,  $M_{\parallel}$ ,  $M_{\perp}$ . В задаче есть выделенное направление, оно задается вектором  $\vec{g}$ , мы вольны назвать его "продольным", тогда  $[g] = M_{\parallel}c^{-2}$ . Объем капли будет измеряться в единицах  $M_{\parallel}^{1/3} M_{\perp}^{2/3}$ , размерность радиуса капли *a* при этом  $M_{\parallel}^{1/3} M_{\perp}^{2/3}$ . Размерность же плотности cти  $\rho$  равна кг  $M_{\parallel}^{-1} M_{\perp}^{-2}$ . Нетрудно понять, что размерность  $\sigma$  есть  $\frac{\text{Kr} \cdot M_{\parallel}}{c^2 M_{\parallel}} = \frac{\text{Kr}}{c^2}$ . То, что вычисляя размерность  $\sigma$  мы используем именно "продольные" метры  $M_{\parallel}$ , становится понятным, если вспомнить как определяется поверхностное натяжение. Проще всего, видимо, рассмотреть мыльную пленку, натянутую на проволочную рамку. Пленка сопротивляется растяжению в том направлении, в котором ее тянут. Ускорения мы уже договорились измерять в  $M_{\parallel}c^{-2}$ ,значит размерность силы кг  $M_{\parallel}c^{-2}$ . Формула  $\omega \sim \sigma^{x} \rho^{y} a^{z} g'$  приводит теперь к равенству:

 $\mathbf{c}^{-1} = \kappa \Gamma^{x} \mathbf{c}^{-2x} \kappa \Gamma^{y} \mathbf{M}_{\parallel}^{-y} \mathbf{M}_{\perp}^{-2y} \mathbf{M}_{\parallel}^{z/3} \mathbf{M}_{\perp}^{2z/3} \mathbf{M}_{\parallel}^{t} \mathbf{c}^{-2t} \,.$ 

Правило N - K = 1 выполняется: N = 5; k = 4. Система линейных уравнений для определения x, y, z и t такова:

$$-1 = -2x - 2t; \ 0 = x + y; \ 0 = -y + \frac{z}{3} + t; \ 0 = -2y + \frac{2z}{3}.$$

Единственное решение этой системы:

$$x = 1/2; y = -1/2; z = -3/2; t = 0.$$

Формула для частоты колебаний капли, конечно, прежняя:

$$\omega \sim (\sigma/\rho a^3)^{1/2}$$

То, что из формулы "выпало" ускорение g, означает, что наше первоначальное предположение о возможности зависимости  $\omega$  от g оказалось несправедливым. Метод размерностей позволяет, таким образом, исключать лишние параметры. Но мы как будто бы не использовали сейчас предположение о малости капель? А раньше мы говорил о том, что полученная формула для  $\omega$  годится только для достаточно малых капелек. И критерием малости было неравенство  $\sigma a \gg \rho a^3 g$ . Перепишем его в виде

$$\left(\frac{a}{g}\right)^{1/2} > \left(\frac{\rho a^3}{\sigma}\right)^{1/2}$$
 и заметим, что слева стоит время падения капли на расстояние поряд-

ка ее размеров, а справа – период колебаний (~  $\omega^{-1}$ ). Это последнее неравенство означает, что колебания, обусловленные силами поверхностного натяжения, можно рассматривать на фоне относительно медленного падения капли. Разница характерного времени падения (на расстояние ~ *a*) и периода колебаний позволяет разделить эти два процесса и рассматривать их независимо. Поэтому для нашего примера период колебаний и на самом деле не зависит от *g*.

Сделаем еще несколько замечаний о векторных единицах длины. Во-первых, существуют задачи, в которых целесообразно вводить не только "продольные" и "поперечные" размеры, но и, скажем, скорости или ускорения с разными размерностями. Могут встречаться, конечно, и разные силы (одни измеряемые в кг·м<sub>||</sub>c<sup>-2</sup>, другие в кг·м<sub>⊥</sub>c<sup>-2</sup>). Во-вторых, возможно естественное обобщение обсуждавшейся нами идеи о введении "своих единиц" для измерения продольных и поперечных размеров. В случае необходимости в какой-то конкретной задаче мы могли бы ввести и "свои метры" для каждого из трех взаимно-перпендикулярных направлений в пространстве. Число основных единиц можно таким образом увеличить сразу на две. Третье замечание такое. Бывает так, что две существенно различные физические величины имеют в какой-то системе единиц одинаковые размерности. В системе СИ, например, такими величинами являются момент силы L и работа A. Обе величины имеют размерности кг·м<sup>2</sup>c<sup>-2</sup>. "Обычный" метод размерностей не может эти величины различить. Но если мы снова применим нашу "маленькую хитрость", введя единицы длины вдоль траектории движения и перпендикулярно к ней, L и A сразу станут различаться. Для вычисления работы мы всегда проектируем силу на направление движения. В определении момента силы существенны "перпендикулярные" единицы длины. Другими словами, момент есть векторное, а работа скалярное произведение:  $\vec{L} = \vec{F} \times \vec{r}$ ,  $A = \vec{F} \vec{r}$ ,  $\vec{F} -$ сила,  $\vec{r} -$  радиус-вектор. Ясно еще, что размерность самой силы  $\vec{F}$  содержит "продольные" метры. Итак, L имеет размерность кг·м<sub>щ</sub>·с<sup>-2</sup>, а A - размерность кг·м<sup>2</sup>с<sup>-2</sup>.

#### 6. Явления переноса

Вводя "продольные" и "поперечные" единицы длины, мы значительно расширяем класс задач, которые можно рассматривать с помощью метода размерностей. Сплошь и рядом в нашем неравновесном (а потому и таком живом) мире наблюдается стремление к локальному равновесию: тепло "течет" от горячего тела к холодному; капелька чернил попавшая в банку воды, стремится равномерно распределиться по объему банки; в результате движения электрических зарядов выравниваются потенциалы и т.д. Во всех таких случаях мы имеем дело с явлениями переноса – в единицу времени (с) через единицу площади ( $M^2$ ) переносится определенное количество некоторой физической величины: тепловой энергии (Дж), массы (кг), электрического заряда (Кл), импульса (кг·м·c<sup>-1</sup>), ... Это количество называется потоком соответствующей величины – энергии, массы, заряда, импульса, ....

Мы будем обозначать поток какой-либо величины буквой q, снабжая ее индексом, показывающим какая именно величина переносится. Обсудим вопрос о размерностях потоков в системе СИ. Начнем с потока массы  $q_m$ . Размерность этой величины очевидна кг·м<sup>2</sup><sub>⊥</sub>c<sup>-1</sup>. Аналогично для потока заряда  $q_e$  можно записать размерность

 $K_{\rm N} \cdot M_{\perp}^{-2} c^{-1}$ . В обоих случаях мы употребляем "перпендикулярные" метры, подчеркивая тем самым, что перенос происходит через площадку, перпендикулярную направлению переноса. Размерность потока заряда можно записать учитывая, что 1  $K_{\rm N} = 1 \, {\rm A} \cdot 1 \, {\rm c}$ . Понятно теперь, что  $q_e$  имеет смысл плотности тока. Эта же самая величина может быть определена как произведение суммарного электрического заряда в единице объема на скорость приобретаемую заряженными частицами под действием электрического поля.

Размерность импульса есть, очевидно, кг · м<sub>||</sub>  $c^{-1}$ , а размерность энергии кг · м<sub>||</sub>  $c^{-2}$ . Соответствующие потоки имеют поэтому размерности:

$$q_{p} = \kappa \Gamma \cdot \mathbf{M}_{\parallel} \mathbf{c}^{-1} \mathbf{M}_{\perp}^{-2} \mathbf{c}^{-1} = \kappa \Gamma \cdot \mathbf{M}_{\parallel} \mathbf{M}_{\perp}^{-2} \mathbf{c}^{-2},$$
$$[q_{T}] = \frac{\mathcal{A} \kappa}{\mathbf{M}_{\perp}^{2} \mathbf{c}} = \kappa \Gamma \cdot \mathbf{M}_{\parallel}^{2} \mathbf{c}^{-2} \mathbf{M}_{\perp}^{-2} \mathbf{c}^{-1} = \kappa \Gamma \cdot \mathbf{M}_{\parallel}^{2} \mathbf{M}_{\perp}^{-2} \mathbf{c}^{-3},$$

индекс "т" обозначает здесь энергию (тепло).

Потоки являются всегда следствием какой-то неравновесности в системе. Пусть, например, между точками 1 и 2 в проводящей среде возникла разность потенциалов  $\varphi_2 - \varphi_1$ . Если расстояние между точками равно  $l_{\parallel}$  (измеряем его в м<sub>||</sub>), то поток заряда  $q_e$  пропорционален  $(\varphi_2 - \varphi_1)/l_{\parallel}$ . Обозначим коэффициент пропорциональности буквой  $\sigma$  и запишем равенство

$$q_e = \sigma \frac{\varphi_2 - \varphi_1}{l_{\parallel}}.$$

Легко видеть, что это есть просто закон Ома – слева стоит плотность тока, а справа произведение  $\sigma$  на напряженность электрического поля. Параметр  $\sigma$  называется коэффициентом электропроводности. Нетрудно выписать и его размерность, если учесть, что размерность электрического потенциала (или разности потенциалов) есть

Вольт = 
$$\frac{\text{Ватт}}{\text{Ампер}} = \frac{\mbox{$\square$} \mathbf{x}}{\mathbf{c} \mathbf{A}} = \frac{\mbox{$\kappa$} \mathbf{\Gamma} \cdot \mbox{$\mathbf{M}$}_{\parallel}^2 \mbox{$\mathbf{c}$}^{-2}}{\mbox{$\mathbf{c}$} \cdot \mbox{$\mathbf{A}$}} = \mbox{$\kappa$} \mathbf{\Gamma} \cdot \mbox{$\mathbf{M}$}_{\parallel}^2 \mbox{$\mathbf{c}$}^{-3} \mbox{$\mathbf{A}$}^{-1} \ .$$

Коэффициент  $\sigma$  будет измеряться в таких единицах:

$$\frac{\mathrm{K}\pi\cdot\mathrm{M}_{\parallel}}{\mathrm{M}_{\perp}^{2}\mathrm{c}\,\mathrm{B}} = \mathrm{M}_{\parallel}^{-1}\mathrm{M}_{\perp}^{-2}\mathrm{K}\Gamma^{-1}\mathrm{c}^{3}\mathrm{A}^{2}\,.$$

Это же можно записать еще и так:

$$[\sigma] = \frac{K\pi \cdot M_{\parallel}}{M_{\perp}^2 \cdot c \cdot B} = \frac{A \cdot c \cdot M_{\parallel}}{M_{\perp}^2 c B} = \frac{M_{\parallel}}{OM \cdot M_{\perp}^2}$$

Если же не делать различия между  $M_{\parallel}$  и  $M_{\perp}$ , то в системе СИ:  $[\sigma] = A^2 c^3 \kappa r^{-1} M^{-3}$ . Условием для существования потока массы является, очевидно, разность плотностей  $\rho_1$  и  $\rho_2$  в точках 1 и 2, находящихся на расстоянии  $l_{\parallel}$  (опять измеряем это расстояние в "продольных" метрах). Записывая равенство

$$q_m = D \frac{\rho_2 - \rho_1}{l_{\parallel}},$$

мы, точно также, как и для  $\sigma$ , можем определить размерность параметра D, он называется коэффициентом диффузии. Размерность плотности  $\rho$  есть кг $\cdot$ м<sub>||</sub><sup>-1</sup>м<sub>⊥</sub><sup>-2</sup>, поэтому

$$[D] = \frac{\mathbf{K}\mathbf{\Gamma} \cdot \mathbf{M}_{\parallel}^{2}\mathbf{M}_{\perp}^{2}}{\mathbf{M}_{\perp}^{2}\mathbf{c}\,\mathbf{K}\mathbf{\Gamma}} = \mathbf{M}_{\parallel}^{2}\mathbf{c}^{-1}.$$

Обратите внимание на то, что в размерность коэффициента диффузии не входит "кг", хотя этот коэффициент и введен нами "через поток массы". Диффузия частиц, описываемая коэффициентом *D*, связана, конечно, с переносом не только массы, одновременно "переносятся" и другие величины, характеризующие частицы.

Обсудим теперь вопрос о переносе тепловой энергии и импульса. Причиной теплопереноса является разность температур  $T_2 - T_1$  в точках 1 и 2, которые, как и выше, разделены расстоянием  $l_{\parallel}$ . Поток тепла

$$q_T = \lambda \frac{T_2 - T_1}{l_{\parallel}}.$$

Коэффициент теплопроводности  $\lambda$ , по определению, есть коэффициент пропорциональности между  $q_T$  и изменением температуры на единице длины в направлении от точки 2 к точке 1. Размерность  $\lambda$  вычисляется по аналогии с тем, как это делалось выше:

$$\left[\lambda\right] = \frac{\kappa \Gamma \cdot \boldsymbol{M}_{||}^2 \, \boldsymbol{M}_{\perp}^{-2} \, \boldsymbol{c}^{-3}}{\boldsymbol{K} \cdot \boldsymbol{M}_{||}^{-1}} = \frac{\kappa \Gamma \cdot \boldsymbol{M}_{||}^3}{\boldsymbol{M}_{\perp}^2 \, \boldsymbol{c}^3 \, \boldsymbol{K}}.$$

В знаменателе здесь появилась единица измерения температуры – Кельвин.

Последний коэффициент, который мы сейчас определим, это коэффициент вязкости. Представим себе два параллельно движущихся и трущихся друг о друга слоя жидкости или газа, пусть их скорости  $u_1$  и  $u_2$  измеряются в м<sub>||</sub>с<sup>-1</sup>. Пусть между этими слоями происходит обмен частицами, например, перпендикулярно направлению скоростей слоев перескакивают молекулы. Тогда эти слои обмениваются импульсом, причем поток импульса также перпендикулярен направлению указанных скоростей. Запишем соответствующее описанной только что схеме равенство:

$$q_p = \mu \frac{u_2 - u_1}{l_\perp}$$

В отличие от аналогичных равенств, для переноса заряда, массы или энергии, в знаменателе правой части формулы сейчас стоит "поперечный" размер. Для коэффициента вязкости легко написать теперь:

$$\left[\mu\right] = \frac{\kappa_{\Gamma} \cdot \mathbf{M}_{\parallel} \cdot \mathbf{M}_{\perp} \mathbf{c}}{c \, \mathbf{M}_{\perp}^2 c \, \mathbf{M}_{\parallel}} = \kappa_{\Gamma} \cdot \mathbf{M}_{\perp}^{-1} \mathbf{c}^{-1} \,.$$

Введенные нами величины *σ*, *D*, *λ* и *μ* часто называют кинетическими коэффициентами или коэффициентами переноса.

#### 7. Обязательно ли вводить новые единицы?

Конкретно мы хотим обсудить сейчас вопрос о том, обязательно ли нужно в "тепловых" задачах вводить единицу измерения температуры – Кельвин, а в задачах, связанных с электрическими явлениями (электрическим током, например) единицу силы тока – Ампер. Эти единицы считаются в системе СИ основными, также как единицы массы (кг), длины (м) и времени (с). Отвлечемся, конечно, пока от "продольных" и "поперечных" длин – их нужно вводить только тогда, когда в них действительно есть нужда.

Если мы вводили бы, скажем, коэффициенты D и  $\mu$  в системе СГС, то получили бы такие соотношения:

$$[D] = \frac{\mathrm{CM}^2}{\mathrm{c}}; \ [\mu] = \frac{\Gamma}{\mathrm{CM} \cdot \mathrm{c}}.$$

По сравнению с системой СИ здесь мало что изменяется – мы просто измеряем длину и массу другими масштабами. Но в термодинамике появляется температура. И соответственно, возникает альтернатива либо измерять температуру в энергетических единицах – Джоулях или эргах<sup>2</sup>, либо ввести новую единицу – Кельвин , но тогда автоматически появится и новая константа – k – постоянная Больцмана.

Размерности разных величин, так или иначе связанных с переносом тепла, будут, конечно, зависеть от того, как мы договоримся измерять температуру. Чтобы это проиллюстрировать, напишем еще раз равенство

$$q_{\mathrm{T}} = \lambda \frac{T_2 - T_1}{l} \,.$$

Предположим, что мы не вводим новых единиц для измерения температуры и хотим ограничиться только механическими единицами. Если  $[q_{\rm T}] = \kappa \Gamma \cdot c^{-3}$ ;  $[T_2 - T_1] = \kappa \Gamma \cdot M^2 c^{-2}$ ; [l] = M, то  $[\lambda] = \frac{\kappa \Gamma \cdot c^2 M}{c^3 \kappa \Gamma \cdot M^2} = M^{-1} c^{-1}$ . Размерность  $\lambda$  в системе еди-

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Такая возможность есть следствие того, что во многих задачах количество тепловой энергии, получаемой или отдаваемой каким-либо телом при нагревании или охлаждении, можно считать пропорциональным соответствующей разности температур.

ниц, где температура измеряется в энергетических единицах, вовсе не похожа на размерность этого же коэффициента в системе СИ! Аналогично обстоит дело и с введением единицы силы тока – Ампера. В системе СИ за включение этой единицы приходится "расплачиваться" появлением в формулах новой размерной постоянной  $\varepsilon_0$ . Размерность ее проще всего определить из вида закона Кулона.

В вакууме мы записываем закон Кулона так:

$$F = \frac{e_1 e_2}{4\pi \varepsilon_0 r^2},$$

где  $e_1, e_2$  – здесь электрические заряды,  $[e_1] = [e_2] = K\pi = A \cdot c$ ,  $[F] = H = \kappa r \cdot mc^{-2}$ ; [r] = m. Поэтому

$$[\varepsilon_0] = \frac{[e_1][e_2]}{[F][r^2]} = \frac{A^2 c^2}{\kappa \Gamma \cdot M \cdot c^{-2} M^2} = A^2 c^4 \kappa \Gamma^{-1} M^{-3}.$$

Физики предпочитают все же чаще пользоваться системой СГС. Главная причина этого в том, что на основе СГС – системы разработана очень стройная и симметричная схема вычислений в электродинамике. Мы кратко остановимся сейчас на так называемой гауссовой системе единиц. В этой системе не возникает постоянных типа  $\varepsilon_0$ , а размерности напряженности электрического и индукции магнитного полей совпадают (в системе СИ это не так!).

Закон Кулона в гауссовой системе записывается в наиболее простом виде:  $F = \frac{e_1 e_2}{r^2}$ . Для размерности заряда получается выражение:

$$[e] = [F^{1/2}r] = \text{дин}^{1/2} \cdot \text{см} = r^{1/2} \text{см}^{1/2} \text{c}^{-1} \text{см} = r^{1/2} \text{см}^{3/2} \text{c}^{-1}.$$

Плотность тока j = neu, здесь n - число заряженных частиц в 1 см<sup>3</sup>, <math>u -скорость переноса зарядов (ее называют также дрейфовой скоростью). Произведение  $e\vec{E}$  – есть сила, действующая на заряд,  $\vec{E}$  – напряженность электрического поля. Все эти опреде-

ления нам хорошо известны, но мы привели их для того, чтобы вычислить теперь размерность коэффициента электропроводности:

$$[\sigma] = \frac{[j]}{[E]} = \frac{[neu]}{[F]/[e]} = \frac{[ne^2u]}{[F]} = \frac{[ne^2u][r^2]}{[e^2]} = [nur^2] = \frac{1}{cM^3} \frac{cM}{c} cM^2 = c^{-1}.$$

Итак, в гауссовой системе  $[\sigma] = c^{-1}$ , а в системе СИ  $[\sigma] = A^2 c^3 \kappa r^{-1} m^{-3}$ . Сложность последнего выражения не свидетельствует в пользу системы СИ. И теперь мы понимаем, что можно и в электродинамике обойтись тремя основными единицами – см, г, с.

С другой стороны исторически сложилась такая ситуация, что электро- и радиотехнические измерения проводятся с использованием единиц системы СИ. Приборы в физических лабораториях и на заводах отградуированы повсеместно в Амперах, Вольтах, Ваттах и т.п. Ясно поэтому, что надо уметь уверенно пользоваться разными системами единиц.

Еще раз отметим, что введение новых основных единиц может быть связано с появлением и новых размерных постоянных. Про эти константы нельзя забывать, если вы пользуетесь методом размерностей для вывода формул.

#### 8. Кинетические коэффициенты для плазмы

Займемся последовательным вычислением коэффициентов переноса для простейшей модели плазмы- газа заряженных частиц. Прежде всего сделаем несколько замечаний о той модели, которую мы будем рассматривать. Будем считать, что плазму образуют не электроны и ионы, как это чаще всего бывает, а частицы с зарядами  $\pm e$  и с одинаковыми массами. Это нам нужно для того, чтобы не учитывать сейчас разницу масс электрона и иона, учет этой разницы усложнил бы наши вычисления, но не изменил бы тех выводов, которые мы в конце сформулируем. Следующая оговорка состоит в том, что мы рассматриваем плазму без магнитного поля. При наличии магнитного поля дело тоже усложняется, вычисление кинетических коэффициентов нужно было бы тогда проводить с учетом параметров, зависящих от магнитного поля. Замечание для знатоков: мы отвлекаемся от "кулоновского логарифма" – множителя возникающего при точном расчете и примерно на порядок меняющего численные значения вычисляемых величин. Этот множитель безразмерный, а мы вообще не заботимся сейчас о таких коэффициентах, из соображений размерностей их получить все равно нельзя.

Вычисление кинетических коэффициентов будем проводить в системе СИ. Цель, которую мы преследуем, состоит в изучении характера зависимости кинетических коэффициентов от температуры. Плазму считаем нерелятивистской (скорости частиц малы по сравнению со скоростью света) и классической (неквантовой).

Сначала вычислим коэффициент диффузии D. Предположим, что он зависит от массы частиц m, их скорости V и заряда e. В число определяющих параметров мы должны включить и размерную постоянную  $\varepsilon_0$  речь идет о частицах, взаимодействующих друг с другом по закону Кулона. Запишем:

 $D \sim e^x \varepsilon_0^y V^z m^t$ .

Размерность  $\varepsilon_0$  мы получили раньше:  $[\varepsilon_0] = A^2 c^4 \kappa r^{-1} m^{-3}$ . Равенство

$$M^{2}c^{-1} = A^{x}c^{x}A^{2y}c^{4y}\kappa\Gamma^{-y}M^{-3y}M^{z}c^{-z}\kappa\Gamma^{t}$$

приводит к системе уравнений:

$$2 = -3y + z; \quad -1 = x + 4y - z;$$
  
$$0 = x + 2y; \quad 0 = -y + t.$$

Решение этой системы единственно, правило N - K = 1 выполнено: x = 2; y = z = t = -1; значит

$$D \sim \frac{e^2}{\mathcal{E}_0 V m}$$

Чтобы явно учесть зависимость D от температуры T, заметим, что  $mV^2 \sim kT$ , окончательно получаем:

$$D \sim \frac{e^2}{\varepsilon_0 \left(kT\right)^{1/2} m^{1/2}}.$$

Повышение температуры ведет, как мы видим, к уменьшению D! Попробуйте сами понять и объяснить причину такого поведения коэффициента диффузии. Мы убедимся дальше, что другие кинетические коэффициенты –  $\lambda$ ,  $\mu$  и  $\sigma$  ведут себя иначе, они растут с ростом температуры.

Вычисление электропроводности  $\sigma$  совершенно аналогично. Записывая  $\sigma \sim e^x \varepsilon_0^y V^z m^t$ , приходим к равенству

$$A^{2}c^{3}\kappa\Gamma^{-1}M^{-3} = A^{x}c^{x}A^{2y}c^{4y}\kappa\Gamma^{-y}M^{-3y}M^{z}c^{-z}\kappa\Gamma^{t}.$$

Из этого соотношения получается опять четыре уравнения, решение этой системы таково: x = -2; y = 2; z = 3; t = 1. Снова учитывая связь скорости частиц и температуры, напишем:

$$\sigma \sim \frac{\varepsilon_0^2 V^3 m}{e^2} = \frac{\varepsilon_0^2 (kT)^{3/2}}{m^{1/2} e^2}.$$

На первый взгляд, не должна отличаться от уже приведенных и схема вычисления  $\lambda$ . Однако равенство

$$\lambda \sim e^x \mathcal{E}_0^y \mathbf{V}^z m^t$$

отличается тем, что теперь правило N - K = 1 не выполнено! В самом деле, в выражение размерности  $\lambda$  входит "Кельвин", поэтому число основных величин равно сейчас числу параметров, связь между которыми мы отыскиваем: N = K = 5. Попытаемся, основываясь на уже имеющемся у нас опыте, увеличить на этот раз не число основных единиц, а число параметров, определяющих коэффициент  $\lambda$ . Будем искать функциональную связь между величинами  $\lambda$ , e,  $\varepsilon_0$ , k, T, m. Мы исключили из набора параметров скорость частиц V, но включили вместо этого температуру T и постоянную Больцмана k. Это вполне разумная замена, ибо  $mV^2 \sim kT$ . Но теперь N = 6 и K = 5, правило N - K = 1 снова выполняется. Предположив, что

$$\lambda \sim e^{x} \mathcal{E}_{0}^{y} k^{z} T^{t} m^{s}$$

придем к уравнению:

$$\mathbf{K}\mathbf{\Gamma}\cdot\mathbf{M}\cdot\mathbf{c}^{-3}\cdot\mathbf{K}^{1}=\mathbf{A}^{x}\mathbf{c}^{x}\mathbf{A}^{2y}\mathbf{c}^{4y}\mathbf{K}\mathbf{\Gamma}^{-y}\mathbf{M}^{-3y}\mathbf{K}\mathbf{\Gamma}^{z}\mathbf{M}^{2z}\mathbf{c}^{-2z}\mathbf{K}^{-z}\mathbf{K}^{t}\mathbf{K}\mathbf{\Gamma}^{s}.$$

Мы учли, что  $[kT] = Дж = \kappa \Gamma \cdot M^2 c^{-2}$ . Выпишем систему пяти линейных уравнений:

$$-1 = -y + z + s$$
,  $1 = -3y + 2z$ ;  $-3 = x + 4y - 2z$ ;  $-1 = -z + t$ ;  $0 = x + 2y$ 

Решение этой системы: x = 4, y = 2, z = 7/2, t = 5/2; s = -1/2, а окончательный вид интересующей нас формулы для коэффициента теплопроводности:

$$\lambda \sim rac{oldsymbol{\mathcal{E}}_0^2 \left(kT
ight)^{5/2} k}{e^4 m^{1/2}}\,.$$

Получение формулы для вязкости плазмы мы предоставляем читателям. Результат же этого вычисления мы выписываем:

$$\mu = \frac{\varepsilon_0^2 v^5 m^3}{e^4} \sim \frac{m^{1/2} \varepsilon_0^2 (kT)^{5/2}}{e^4}.$$

Нам осталось сказать, что между разными коэффициентами переноса существуют вполне определенные связи. Разделим, например,  $\lambda$  на  $\sigma$ , для такого отношения получится:

$$\left(\frac{\lambda}{\sigma}\right) \sim \left(\frac{k}{e}\right)^2 T \; .$$

Это соотношение называется законом Видемана–Франца для плазмы. Отношение же  $\left(\frac{\lambda}{\mu}\right) \sim \left(\frac{k}{m}\right)$  не зависит от температуры вовсе. Заметьте еще, что оно не зависит и от

электрических характеристик (e и  $\mathcal{E}_0$ ) частиц.

Выпишем здесь еще кинетические коэффициенты для нашей модели плазмы в системе единиц СГСК (см-г-с-К):

$$D \sim \frac{e^2}{Vm} \sim \frac{e^2}{(mkT)^{1/2}}; \qquad \sigma \sim \frac{V^3m}{e^2} \sim \frac{m}{e^2} \frac{(kT)^{3/2}}{m^{3/2}};$$
$$\lambda \sim \frac{km^2}{e^4} \cdot \frac{(kT)^{5/2}}{m^{5/2}}; \qquad \mu \sim \frac{m^3 V^5}{e^4} \sim \frac{(mkT)^{5/2}}{m^2 e^4}.$$

В этой системе единиц формулы не содержат  $\varepsilon_0$ , но в них входит k. Проверку этих соотношений мы предоставляем читателям. Зависимости кинетических коэффициентов от температуры будут точно такими же и для более реалистичной – электронно-ионной плазмы. Мы не будем обсуждать сейчас этот вопрос подробнее.

#### 9. Гравитационная постоянная и скорость света

Продолжим теперь обсуждение вопроса о том, в каких случаях следует ожидать появления в формулах размерных постоянных. В этом разделе речь пойдет о гравитационной постоянной  $\gamma$  и скорости света *c*.

Естественно, что  $\gamma$  появляется в задачах, описывающих гравитационное взаимодействие, а *с* задачах, где речь идет о движении частиц со скоростями близкими к скорости света. Присутствует скорость *с* и в задачах, относящихся к распространению света или электромагнитного излучения- такое излучение есть просто поток фотонов, а они всегда движутся, конечно, со скоростью *с*.

Пример, который мы сейчас рассмотрим, требует одновременного включения в число определяющих параметров обоих констант –  $\gamma$  и *с*. Сейчас хорошо известно, что луч света, идущий из далекой галактики и проходящий вблизи края солнечного диска, отклоняется на малый угол  $\varphi_0 \approx 2 \cdot 10^{-6}$  радиана. Известны нам масса Солнца  $M_{\rm C} \approx 2 \cdot 10^{30}$  кг и его радиус  $R_{\rm C} \approx 7 \cdot 10^5$  км. Гравитационное поле Солнца служит при-

чиной отклонения светового луча, само же это поле определяется параметрами  $\gamma$ ,  $M_{\rm C}$  и  $R_{\rm C}$ . Было бы интересно попытаться получить формулу, связывающую угол  $\varphi_{\rm C}$  с параметрами  $\gamma$ ,  $M_{\rm C}$ ,  $R_{\rm C}$  и c. Никаких других параметров в нашей задаче нет. Говоря, что луч света проходит вблизи звезды, мы пренебрегаем, конечно, разницей между радиусом звезды и расстоянием от ее центра до ближайшей точки луча. Запишем, как обычно, формулу:

$$\varphi_{\rm C} \sim M_{\rm C}^{x} R_{\rm C}^{y} \gamma^{z} c^{t} \,.$$

Размерность гравитационной постоянной проще всего получить из закона всемирного тяготения:

$$[\gamma] = \frac{[Fr^2]}{[m^2]} = \mathbf{H} \cdot \mathbf{M}^2 \mathbf{K} \Gamma^{-2} = \mathbf{K} \Gamma^{-1} \mathbf{M}^3 \mathbf{c}^{-2}.$$

Угол же  $\phi_C\,$  – величина безразмерная, поэтому мы получим три таких уравнения:

$$x-z=0; y+3z+t=0; -2z-t=0.$$

Неизвестных же чисел у нас – четыре, правило N - K = 1 не выполнено. Но с подобной ситуацией мы уже сталкивались и знаем, что теперь нужна какая-то дополнительная информация. Зафиксируем число *x*, тогда: y = -x, z = x, t = -2x. Интересующая нас формула может быть представлена в таком виде:

$$\varphi_{\rm C} \sim \left(\frac{\gamma M_{\rm C}}{R_{\rm C}c^2}\right)^x.$$

Для определения числа *x* мы можем использовать теперь известное из наблюдений и приведенное выше численное значение  $\varphi_{\rm C}$ . Учитывая, что  $\gamma \simeq 6.7 \cdot 10^{-11} \frac{{\rm H} \cdot {\rm m}^2}{{\rm kr}^2}$ , а скорость  $c \simeq 3 \cdot 10^8 \frac{{\rm m}}{c}$ , мы легко проверим, что написанная формула правильна при  $x \simeq 1$ .

Соображения подобия позволяют, по-видимому, считать, что угол отклонения светового луча в гравитационном поле любой звезды с массой M и радиусом R определяется аналогичным образом и равен

$$\varphi \sim \frac{\gamma M}{Rc^2} \, .$$

В этих рассуждениях появилось два новых для нас момента. Во-первых, мы не можем утверждать только на основании сказанного выше, что x = 1. Формулы мы пишем только по порядку величины и, казалось бы, ничто не мешает нам считать, что x = 0.99или 1.02. Уверенность в том, что x = 1 основана не на приведенных формальных вычислениях, да и к тому же с неизвестным численным коэффициентом и с приближенными значениями всех параметров, а на опыте и соображениях уже не размерности, а разумности. Опыт говорит нам, что показатели степеней в формулах бывают обычно целыми числами или простыми дробями. В то же время не видно каких-либо оснований для того, чтобы считать, например, x = 8/9 или x = 19/21. Разумность и наше желание видеть формулы возможно более изящными играют вовсе не последнюю роль в физике! Нельзя, конечно, целиком отдаваться эмоциям, но ничего другого без точного решения обсуждаемой задачи мы сказать все равно не смогли бы. Точное же решение на самом деле приводит к x = 1.

Второе обстоятельство, которое мы хотим отметить, заключается в том, что безразмерная комбинация параметров M, R,  $\gamma$  и c приводит для большого числа звезд к значению  $\varphi \ll 1$ . Обратите внимание на то, что  $\varphi$  сейчас вовсе не является безразмерным постоянным коэффициентом, это функция других параметров, функция безразмерная, но вовсе не обязанная быть универсальной константой! Неопределяемая же из соображений размерности константа в правой части формулы  $\varphi \sim (\gamma M/Rc^2)$ , конечно, тоже есть, и вот она-то порядка единицы.

Малость значения функции  $\varphi$  для нашего Солнца вовсе не означает что эта функция всегда мала. Пользуясь полученной для нее формулой, можно оценить отклонение луча света, проходящего и вблизи нейтронных звезд. Так называют звезды, плотность которых примерно такая же, как плотность вещества внутри атомных ядер. Позже мы еще вернемся к таким сверхплотным сгусткам вещества. Сейчас же для нас достаточно сказать, что их массы по порядку величины совпадают с массой нашего Солнца, а радиусы составляют всего лишь десятки километров. Гравитационное поле нейтронных звезд намного "сильнее" поля Солнца, неудивительно, что типичное значение угла  $\varphi$  для них достигает уже десятых долей радиана! Читатель легко проверит это сейчас сам.

#### 10. Три фундаментальные константы

Фундаментальными (или мировыми) константами часто называют гравитационную постоянную  $\gamma$ , скорость света *с* и постоянную Планка  $\hbar$ , входящую в формулы, описывающие квантовые явления.

Наш читатель уже знает, вероятно, что излучаемая (или поглощаемая) атомами энергия квантуется. В простейшей квантовой модели атом рассматривается по аналогии с планетной системой. Электроны вращаются вокруг ядра по орбитам вполне определенных радиусов, переход же электрона с одной орбиты на другую должен сопровождаться излучением (или поглощением) кванта энергии величиной  $\hbar \omega$ . Здесь  $\omega$  – частота излучения, определяемая разностью энергий электрона на соответствующих орбитах. Отсюда ясно, что размерность  $\hbar$  в системе СИ определяется так:  $[\hbar] = Дж \cdot c = \kappa \Gamma \cdot M^2 c^{-1}$ , а в системе СГС:

 $[\hbar] = \Im \mathbf{p} \mathbf{\Gamma} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{\Gamma} \, \mathbf{c} \mathbf{M}^2 \mathbf{c}^{-1}.$ 

Теперь мы можем обсудить, например, вопрос об излучении энергии нагретым телом. Такое тело излучает обычно энергию в разных диапазонах. Потоки тепла, света и рентгеновского излучения можно рассматривать, конечно, как потоки квантов соответствующих частот.

Пусть температура излучающей поверхности равна *T*. Обозначим буквой q – количество энергии, излучаемой с единицы поверхности за единицу времени. Эта величина имеет смысл потока энергии, ее размерность в системе СИ  $[q] = \frac{Дж}{M^2c} = \kappa \Gamma \cdot c^{-3}$ . Кванты электромагнитного излучения движутся со скоростью *c*.Отвечающая температуре *T* характерная энергия есть, очевидно, kT. И естественно предположить, что функционально могут быть связаны четыре величины: q, (kT), c и  $\hbar$ . Из соображений размерности тогда мы легко получим формулу:

$$q \sim \left(kT\right)^4 c^{-2}\hbar^{-3}.$$

Часто этот закон записывают в виде

$$q = \sigma T^4$$

и называют законом Стефана–Больцмана. Коэффициент  $\sigma$  называется соответственно постоянной Стефана–Больцмана. Ясно, что в системе СИ

$$\sigma \sim k^4 c^{-2} \hbar^{-3}; \ [\sigma] = \kappa_{\Gamma} \cdot c^{-3} K^{-4}.$$

Приведем еще для полноты численные значения констант, входящих в написанные формулы:

$$k = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\#}{K} = 1,38 \cdot 10^{-16} \frac{\Im p\Gamma}{K},$$
  
$$\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \,\mathrm{kr} \cdot \mathrm{m}^2 \mathrm{c}^{-1} = 1,05 \cdot 10^{-27} \,\mathrm{r} \cdot \mathrm{cm}^2 \mathrm{c}^{-1}.$$

Таким образом, мы познакомились уже с несколькими размерными константами. Формулы для q и  $\sigma$  содержат две фундаментальные константы c и  $\hbar$ . Это есть прямое указание на то, что строгое решение задачи об излучении нужно строить на основе квантовой и одновременно релятивистской теории. Постоянная Стефана Больцмана, вычисляемая в такой теории, равна

$$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60\hbar^3 c^2} \simeq 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\kappa \Gamma}{c^3 \mathrm{K}^4} = 5,67 \cdot 10^{-5} \frac{\Gamma}{c^3 \mathrm{K}^4} \,.$$

Заметьте, кстати, что численный коэффициент  $(\pi^2/60)$  в последней формуле тоже можно считать при грубых оценках числом порядка единицы.

Вполне естественно, что существуют и такие физические процессы и явления, когда существенны квантовые эффекты и несущественны релятивистские. Примером такой ситуации могут быть электронные процессы в металлах. Мы увидим позже, что электронные скорости в атомах и твердых телах малы по сравнению со скоростью света, и поэтому c не входит в формулы, описывающие, скажем, кинетические явления в твердом теле.<sup>3</sup>

Зададим себе теперь такой вопрос. В каком случае в формулах могут содержаться все три фундаментальные константы?

Очевидно, что для этого существенными должны быть одновременно гравитация, релятивизм и квантование. Любопытно, что из  $\gamma$ , *с* и  $\hbar$  можно сконструировать величины с размерностями массы, длины и времени. Из соображений размерности такие соотношения строятся сразу же и однозначно и имеют вид:

$$m_p \sim \left(\frac{\hbar c}{\gamma}\right)^{1/2}; \ l_p \sim \left(\frac{\gamma\hbar}{c^3}\right)^{1/2}; \ t_p \sim \left(\frac{\gamma\hbar}{c^5}\right)^{1/2}$$

Если принять неопределенные численные коэффициенты в этих формулах равными единице, то мы получаем "естественные" масштабы для измерения масс, длин и времени. Эти масштабы впервые ввел М.Планк и они называются планковскими единицами. Выбор их естественен в том смысле, что нам его подсказывает сама Природа. При таком выборе единиц уже нет того произвола и случайности, которые характерны для выбора килограмма, метра и секунды. Говоря же о связи планковских единиц со "случайными", но привычными нам единицами систем СИ или СГС, мы должны, конечно, признать, что пользоваться первыми было бы не очень удобным. Нетрудно проверить, что численно  $m_p \sim 2 \cdot 10^{-8}$  кг,  $l_p \sim 2 \cdot 10^{-35}$  м и  $t_p \sim 5 \cdot 10^{-44}$  с. Для практических задач, возникающих в повседневной жизни, это слишком малые масштабы.

Современная физическая теория не может пренебрегать, однако, и такими масштабами. В космологии – науке, описывающей эволюцию Вселенной, Планковский период играет очень важную роль, именно планковские масштабы определяют самую раннюю историю нашего Мира. Строгой теории физических процессов происходящих на начальных стадиях жизни Вселенной, пока еще не существует. Никаких экспериментов со Вселенной (кроме, быть может, мысленных) мы проводить тоже не можем. Но уже сама возможность построения планковских единиц подсказывает нам, что будущая теория ранней Вселенной должна быть во всяком случае квантовой гравитационной

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Подчеркнем, что сейчас не имеются ввиду кинетические эффекты в магнитном поле или при наличии в среде излучения.

теорией. Чтобы лишний раз проиллюстрировать сколь непросто построить такую теорию, вычислим еще планковские единицы плотности и температуры:

$$\begin{split} \rho_p &\sim \frac{m_p}{l_p^3} \sim \frac{c^5}{\gamma^2 \hbar} \simeq 5 \cdot 10^{96} \frac{\mathrm{K}\Gamma}{\mathrm{M}^3} \,, \\ T_p &\sim \frac{1}{k} \left( \frac{\hbar c^5}{\gamma} \right)^{1/2} \simeq 10^{32} \,\,\mathrm{K} \,. \end{split}$$

Вероятно эти грандиозные численные значения должны заставить читателя окончательно поверить в то, что свойства вещества или излучения, характеризующиеся такими параметрами, не могут быть простыми и, скорее всего, вовсе непохожи на все то, к чему мы привыкли.

#### 11. Давление электронного газа в металле

Формулы, которые мы намереваемся получить сейчас, содержат только одну фундаментальную константу. Попытаемся понять какими параметрами должно определяться давление газа электронов.

Металл, как мы знаем, состоит из ионов, "сидящих" в узлах кристаллической решетки, и электронов, "гуляющих" между ионами. В каком-то смысле такая система напоминает рассматривавшуюся нами раньше модель плазмы, но есть и очень существенное отличие. Для частиц классической плазмы, как и для обычного молекулярного газа, мы можем пользоваться известными формулами кинетической теории:

$$P = nkT$$
;  $\frac{mv^2}{2} = \frac{3}{2}kT$ .

Здесь p – давление, n – число частиц в единице объема, m – масса частиц, v – их скорость. Квантовые эффекты в написанных формулах разумеется, не учтены. Для металла же такие формулы уже совершенно не годятся, электронный газ в металле – объект существенно квантовый. Заметим, что при  $T \rightarrow 0$  из классических формул следует, что  $p \rightarrow 0$  и  $V \rightarrow 0$ . Для электронов в металлах скорость и давление вовсе не стремятся к нулю с уменьшением температуры. Более того, скорость электронов в металле прак-

тически не зависит от температуры, и всегда  $m_e V_e^2 \gg kT$  ( $m_e$  – масса электрона,  $V_e$  – его скорость).

Будем основываться на самой простой квантовой схеме-модели атома Бора-Зоммерфельда. В этой модели электроны крутятся по орбитам, взаимодействуя с ядром в соответствии с законом Кулона. Для отрыва же электрона от нейтрального атома нужно, очевидно, сообщить ему дополнительную энергию. Это значит, что скорость "оторвавшегося" электрона не меньше, чем скорость электрона находящегося на внешней орбите. В последнем случае скорость определяется кулоновским взаимодействием и не зависит, конечно, от температуры. Для оценок можно считать, что электрон на внешней атомной орбите сравнительно слабо связан с ядром, поэтому ему достаточно передать лишь малую энергию по сравнению с его собственной, чтобы он "ушел гулять" по кристаллу. Отсюда следует, что скорости свободных электронов не должны сильно отличаться от скоростей, которые характерны для внешних орбит.

С другой стороны, само существование вполне определенных орбит в модели Бора – есть следствие квантового описания атома. Поэтому можно и нужно думать, что и характеристики свободных электронов, "гуляющих по кристаллу" (иначе их называют еще электронами проводимости) должны зависеть от постоянной  $\hbar$ . Если мы хотим вычислять давление электронного газа  $p_e$ , то естественно включить в число определяющих параметров (также, как и в классической формуле, кстати!) массу  $m_e$  и концентрацию  $n_e$ . Записывая, как обычно,  $p_e \sim \hbar^x m_e^y n_e^z$  и сравнивая размерности правой и левой частей этого равенства, мы получим: x = 2, y = -1, z = 5/3, то есть

$$p_e \sim \frac{\hbar^2}{m_e} n_e^{5/3} \,. \label{eq:period}$$

Точная формула для давления выводится в статистической физике и имеет вид:

$$p_{e} = \frac{\left(3\pi^{2}\right)^{2/3}}{5} \cdot \frac{\hbar^{2}}{m_{e}} \cdot n_{e}^{5/3}$$

(Численный коэффициент и здесь порядка единицы!) Точно таким же образом можно получить формулу и для скорости *V<sub>e</sub>* электрона проводимости:
$$\mathbf{V}_e \sim \frac{\hbar}{m_e} n_e^{1/3} \,.$$

Заметим теперь, что число частиц в единице объема  $n_e$  связано, по определению, со средним расстоянием между частицами *a* простым соотношением  $n_e \simeq a^{-3}$ . В данном случае под *a* нужно понимать среднее расстояние между электронами проводимости. Если же считать атомы в металле однократно ионизованными (такая ситуация типична), то *a* – есть в то же время и среднее расстояние между атомами. Не будет большой ошибкой, если при численных оценках подставлять вместо *a* и размер атома – в твердом теле, как мы знаем, эти величины также одного порядка.

Возможность численных оценок с помощью полученных выше формул связана с тем, что неопределяемые нами числовые коэффициенты по порядку величины не малы и не велики по сравнению с единицей.

Сами такие оценки достаточно поучительны и просты. Пусть плотность металла  $\rho$ , масса атома с нашей точностью совпадает с массой атомного ядра  $m_{\rm g}$ . Тогда число атомных ядер в единице объема  $n_{\rm g} \simeq \frac{\rho}{m_{\rm g}}$ . При однократной ионизации  $n_e \simeq n_{\rm g}$ , поэтому

$$V_e \sim \frac{\hbar}{m_e} \left(\frac{\rho}{m_{\pi}}\right)^{1/3}; \quad p_e \sim \frac{\hbar^2}{m_e} \left(\frac{\rho}{m_{\pi}}\right)^{5/3}.$$

Масса атомного ядра  $A_{n} \simeq Am_{n}$ , здесь A – массовое число, а  $m_{n}$  – масса нуклона (разницей масс нейтрона и протона мы, конечно пренебрегаем при таких оценках). Нам остается еще учесть, что  $m_{e} \simeq 9 \cdot 1 \cdot 10^{-31}$  кг  $\simeq 10^{-30}$  кг, а  $m_{n} \simeq 1838m_{e}$ . Подстановка чисел в формулу для скорости приводит к оценке  $V_{e} \sim 10^{6}$  м/с, другими словами  $V_{e} \ll c \simeq 3 \cdot 10^{8}$  м/с. Мы убедились, что электроны в металлах не нужно описывать релятивистскими формулами, они подчиняются законам нерелятивистской квантовой механики. Зависимость от A в формуле для  $V_{e}$  сравнительно слабая, типичные значения  $A \simeq 50-100$ .

Посмотрим, наконец, какова должна быть температура, чтобы величина kT стала порядка кинетической энергии электрона проводимости  $(m_e V_e^2)/2$ . Такая температура

называется температурой вырождения  $T_0$  и легко вычисляется. Для  $T_0$  получается оценка порядка десятков тысяч градусов. Ясно, что металл раньше расплавится и испарится, чем нарушится условие  $kT \ll \frac{m_e V_e^2}{2}$ . На этом основании электронный газ в металле называют квантовым вырожденным газом. Написанное здесь неравенство есть соответственно условие вырождения.

### 12. Промежуточные итоги

Пожалуй, уже настало время подвести краткий итог тому, о чем говорилось выше. Рассмотренные нами примеры относились к различным разделам физики и имели целью проиллюстрировать основные идеи и технику применения метода размерностей.

Мы хотим сейчас еще раз подчеркнуть, что метод размерностей эффективно работает только тогда, когда мы сумели правильно выбрать определяющие явление или процесс параметры. Было бы неправильно думать, что мы можем, пользуясь только соображениями размерности, получать новые физические законы. При выборе системы определяющих параметров явно или неявно подразумевается, что мы что-то уже знаем об обсуждаемой конкретной задаче, до какой-то степени умеем отделять главное от второстепенного, или хотя бы пытаемся это делать.

В той же Нобелевской лекции, которую мы цитировали в самом начале, Ф.Андерсон сказал и такие слова: "Искусство построения моделей заключается в умении отбросить реально существующие, но несущественные стороны проблемы, и чревато риском как для автора, так и для читателя. Автор может отбросить что-нибудь, что на самом деле важно; читатель, вооруженный слишком тонкой экспериментальной методикой или проделывающий чрезмерно аккуратные вычисления, может понять слишком буквально схематизированную модель, основная цель которой – это демонстрация какой-то возможности."

Те возможности метода размерностей, которые были продемонстрированы выше, существенно связаны не только с тем, что строившиеся нами формулы были степенными, но и с тем, что все они были одночленными. Мы подчеркивали также, что в простых задачах неопределяемые из соображений размерности коэффициенты – суть числа порядка единицы. Может быть, нелишне сказать, что отличие их в 2, 3, 5, даже 10 раз от единицы часто не так уж страшно. Пример тому – хорошо известная формула для

периода колебаний математического маятника  $T = 2\pi\sqrt{l/g}$ . Метод размерностей позволяет, конечно, связать период T с длиной маятника l и ускорением g, коэффициент же  $2\pi$  этим методом получен быть не может. Можно было бы, наверное, сказать, что  $2\pi$  – коэффициент сравнительно большой. С точки зрения качественного описания характера колебаний мы можем, однако, считать  $2\pi$  числом порядка единицы – нет ни-какой специальной причины, по которой в столь простой задаче должен был бы возникнуть очень большой (или малый) численный коэффициент.

Большое значение имеет и сам выбор системы функционально связанных параметров. При удачном выборе численный множитель типа  $2\pi$ , например, может и вообще не появиться. Если бы в примере с маятником мы отыскивали не связь T с l и g, а связь  $\omega$  с l и g, никакого множителя  $2\pi$  вообще не возникло бы, его происхождение связано лишь с определением величины  $\omega = 2\pi/T$ .

В тех случаях, когда при точном решении каких-то задач все же появляются числовые параметры или коэффициенты, сильно отличающиеся от единицы (скажем, на два порядка, а иногда и на порядок), – всегда имеет смысл поискать причину этого. Примером такой ситуации может служить наш расчет кинетических коэффициентов плазмы. В более точных формулах должен был бы возникнуть множитель, типичное значение которого ~ 20. Причиной появления такого большого безразмерного параметра является то, что мы не смогли учесть входящий в формулы логарифмический множитель, получивший название кулоновского логарифма. Аргументом этого логарифма также является безразмерная комбинация параметров задачи, но сама эта функция, к счастью, изменяется медленнее, чем степенные множители. Поэтому и найденные нами формулы верны с точностью до упомянутого логарифма. В грубом приближении можно включить логарифм в неопределяемый численный коэффициент. Но при более аккуратных вычислениях заменять логарифм константой, конечно, нельзя.

Не поможет метод размерностей и в тех случаях, когда формула, выражающая какую-либо закономерность, содержит другие нестепенные функции, например, синус или экспоненту. В случаях, когда есть причина для периодического изменения или экспоненциального роста интересующего нас параметра, метод размерностей может нам помочь разве что в выборе аргумента функции – естественно пытаться "конструировать" аргумент как безразмерную комбинацию каких-то параметров. Понятно должно быть и то что в безразмерном виде можно записывать и сами уравнения, выражающие физические закономерности. Приведем лишь один пример. Мы записывали раньше формулу для частоты пульсационных колебаний капли жидкости так:  $\omega \sim (\sigma/\rho a^3)^{1/2}$ . Но ту же самую закономерность можно написать и в безразмерном виде:  $\sigma/(\rho a^3 \omega^2) \sim 1$ . Безразмерная форма записи бывает иногда удобной, но она, конечно, не

единственна. Можно ведь записать и такие формулы:  $\frac{\rho a^3 \omega^2}{\sigma} \sim 1; \left(\frac{\rho a^3 \omega^2}{\sigma}\right)^2 \sim 1$  и т.п.

Естественно, разумеется, ограничиваться лишь простейшей формулой такого типа.

И наконец, лучше поздно, чем никогда. Авторы должны объясниться с читателями. Речь идет о том, что в большом и неоднородном тексте этой статьи мы не смогли (и даже не хотели) избегать обозначения одной и той же буквой разных физических величин. Например, буквой  $\sigma$  обозначены в разных разделах поверхностное натяжение, электропроводность и постоянная Стефана–Больцмана. Мы пошли на это совершенно сознательно потому, что не хотели отступать от сложившихся традиций и соглашений, а число понятий, которые мы обсуждаем, довольно велико.

В каждом разделе статьи мы максимально подробно объясняли о чем идет речь. Мы надеемся, что это нигде не должно привести к недоразумениям.

По аналогичным причинам мы не стали делать ни в разделах, ни в статье в целом сплошную нумерацию формул. Мы надеемся, что это тоже не создаст трудностей у читателе при чтении.

Можно считать, что с основами метода размерностей теперь мы знакомы. Наше дальнейшее изложение будет построено в основном по тематическому принципу. Мы обсудим это в следующей статье, которую мы надеемся предложить читателям в недалеком будущем. Но это вовсе не исключает использования уже сейчас аналогий между разными физическими явлениями и процессами.

### Литература

- 1. Липсон Г. Великие эксперименты в физике // М.: Мир, 1972, 216 стр.
- 2. *Андерсон* Ф. Локальные моменты и локализованные состояния. Нобелевская лекция, 1977 г. // Успехи физических наук 1979, т. 127, № 1, стр. 19-39
- 3. Тейлор Э., Уилер Дж. Физика пространства-времени // М., Мир, 1971 319 стр.
- 4. Стретт Дж.В. (Лорд Релей), Теория звука, т. 1 // М., ГТТИ, 1955, 503 стр.

#### Дополнительный список источников по проблеме метода размерностей

- 1. Бриджмен П. Анализ размерностей // Ижевск: НИЦ РХД, 2001, 148 стр.
- 2. *Крайнов В.П.* Качественные методы в физической кинетике и гидродинамике // М.: Высшая школа, 1989, 224 стр.
- Крайнов В.П. Лекции по избранным проблемам механики сплошных сред//Долгопрудный: Интеллект, 2014, 120 стр.
- 4. *Брук Ю.М., Стасенко А.Л.* Как физики делают оценки // В книге "О современной физике учителю". М.: Знание, 1975, стр.54–131.
- 5. Иванов Б.Н. Мир физической гидродинамики // М.: Едиториал УРСС, 2014, 240 стр.
- 6. Иванов Б.Н. Законы физики // М.: УРСС, 2016 368 стр.
- 7. *Баренблатт Г.И*. Автомодельные явления анализ размерностей и скэйлинг // Долгопрудный, Интеллект, 2009, 216 стр.
- 8. *Трубецков Д.И.* Две лекции о двух путях истории симметрии // Прикладная нелинейная динамика, 2013, Саратов, том 21, №4, 9–42.
- 9. Седов Л.И. Методы подобия и размерности в механике // М. Наука, 1981. 440 стр.

# DIMENSIONAL METHOD AND QUALITATIVE ASSESSMENTS OF PHYSICAL QUANTITIES

Ju.M. Bruk<sup>1</sup>, A.L. Stasenko<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>P.N.Lebedev Physical Institute Russian Academy of Science <sup>2</sup>Central Aerohydrodynamic Institute <sup>3</sup>Moscow Institute of Physics and Technology (State University)

yubruk@gmail.com, stasenko@serpantin.ru

Received 12.04.2016

The proposed survey presents a technique for constructing mathematical formulas in various fields of physics on the basis of the concept of dimensions and the numerical estimation of the quantity orders. Several specific problems are considered to illustrate one of the most efficient methods for the qualitative analysis of physical processes and phenomena. The principal ides of the method are important for qualitative modeling and, rather often, for obtaining numerical estimates preceding the exact solutions. The dimensional method is closely related to the concept of similarity in physics and mathematics, which are actively discussed in the contemporary mathematics.

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО НАПРЯЖЕНИЯ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ МЕМБРАННЫХ МИКРО-ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ СТРУКТУР НА БАЗЕ ПАКЕТОВ ПРОГРАММ TCAD И COMSOL MULTIPHYSICS

Н.А. Дюжев, Е.Э. Гусев, П.Ю. Глаголев

Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

bubbledouble@mail.ru

Поступила 19.08.2016

Представлен результат моделирования термического напряжения в диэлектрической мембране на кремниевой подложке в среде TCAD. Показана эпюра напряжений. Продемонстрирован маршрут формирования МДП транзистора, выходная и проходная характеристика, наглядно иллюстрируется распределение механических напряжений в МЭМС устройстве. В среде COMSOL Multiphysics сделано моделирование системы Si подложка – плёнка. Наглядно показана корреляция численного моделирования в программных средах и аналитического расчёта.

УДК 531.78

## Введение

В настоящее время технологии микромеханики, или микро-электромеханических систем (МЭМС) является высоковостребованной отраслью с высокими темпами роста [1,2]. Одна из актуальных проблем МЭМС технологий, оказывающей заметное влияние на качество производимых продуктов сводится к определению величин механических напряжений при изготовлении интегральных схем и МЭМС устройств на Si пластинах. Напряжения и деформации, возникающие на подложках, тонких пленках и многослойных структурах оказывает значительное влияние на надежность и динамические характеристики изделий[3,4].

Деформация возникает при градиенте температуры структуры, вследствие разницы между температурными коэффициентами линейного расширения (ТКЛР) различных слоёв. Необходимо учитывать также эффект магнитострикции, обратный пьезоэлектрический эффект возникающий в результате действия внешних сил, создающих деформацию. В результате, напряжение растяжения в пленке в составе многослойной структуры, как правило, приводит к растрескиванию или отслаиванию[5,6,7]. С другой стороны, наличие напряжения может повысить предел упругости системы, предел выносливости, коррозионно-механическую стойкость, быстродействие транзисторов. Возможность предвидения и контроля величин напряжений, позволит не только избежать разрушения прибора [3], но и улучшить параметры надежности и устойчивости изделия.

## Моделирование термического напряжения в диэлектрической мембране в среде TCAD

Представлен результат моделирования термического напряжения в диэлектрической мембране на кремниевой подложке с кристаллографической ориентацией(100) на базе пакета программ приборно-технологического моделирования TCAD.

В программной среде TCAD в разделе sprocess не предусмотрена возможность задания величины модуля Юнга Е и коэффициента Пуассона u. Однако, присвоив значение модуля подложки К и модуля сдвига G материала, можно рассчитать требуемые величины, решив систему уравнений (1):

$$\begin{cases} K = \frac{E}{3(1-2 \cdot u)} \\ G = \frac{E}{2(1+u)} \end{cases}$$
(1)

Параметры материала использовались из библиотеки TCAD. Для нитрида кремния величина модуля подложки К составляет 3.240 · 10<sup>11</sup> (Па) и модуля сдвига G 1.495 · 10<sup>11</sup> (Па) соответственно. Решая систему уравнений (1), получено значение модуля Юнга для Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, равное 3.888 · 10<sup>11</sup> (Па). Аналогичные расчёты сделаны для диоксида кремния. Табличное значение модуля подложки К составляет 6.534 · 10<sup>10</sup> ( Па) и модуля сдвига G 2.792 · 10<sup>10</sup> (Па) соответственно. Корень уравнения системы (1): модуль Юнга для SiO<sub>2</sub> составляет 7.30 · 10<sup>10</sup> (Па). При вычисления в TCAD температурные коэффициенты линейного расширения материала α составили: кремний с кристаллографической ориентацией (100)  $2.5 \cdot 10^{-6}$  (1/°C), диоксид кремния  $1.0 \cdot$  $10^{-6}$  (1/°С) и нитрид кремния  $3.4 \cdot 10^{-6}$  (1/°С). Величина разницы температуры осаждения плёнки и комнатной ∆Т : нижний SiO<sub>2</sub> 850(°С), нижний Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 400(°С), верхний SiO<sub>2</sub> 350(°C) и верхний Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 330(°C). Учитывая, что в среде TCAD по умолчанию исходные напряжения в материале отсутствуют, то из экспериментальных данных работы [8] величина стресса в кремнии составила (Па). В результате моделирования получена эпюра напряжений представленная на рис. 1.

Из рис. 1 можно заключить, что термический стресс создаёт в диоксиде кремния отрицательные напряжения, в нитриде кремния положительные напряжения.

С целью анализа корреляции результатов численного моделирования с данными аналитического расчета, проведено вычисление величины напряжений  $\sigma_{\text{терм}}[6]$  по формуле (2):

$$\sigma_{\text{терм}} = \mathbf{E} \cdot \Delta \alpha \cdot \Delta \mathbf{T} \qquad (2)$$

где  $\Delta \alpha$  – разница ТКЛР слоёв материалов



Рис. 1. Эпюра механических напряжений

плёнка	термический стресс (аналитика), Па	термический стресс (TCAD), Па	относительная погрешность, %
нижний SiO <sub>2</sub>	-9,31E+07	-8,20E+07	12%
нижний Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	3,72E+08	3,56E+08	4%
верхний SiO <sub>2</sub>	-6,13E+07	-5,90E+07	4%
верхний Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	3,07E+08	2,93E+08	5%

Таблица 1. Сравнение результатов аналитического расчёта и моделирования в ТСАД

Результаты аналитических вычислений и численного моделирования приведены в таблице №1.

Анализируя результаты численного моделирования и аналитических расчетов, можно заключить о хорошей сопоставимости результатов.

## Моделирование транзистора металл-диэлектрикполупроводник (МДП) в TCAD

Природа механических напряжений многогранна. Общий стресс включает в себя термические напряжения, но не ограничивается ими. Например, при моделировании транзисторной МДП (металл-диэлектрик-полупроводник) структуры с каналом n-типа учёт напряжений позволяет получить более точные данные [9]. С одной стороны пассивация Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> позволяет создать слабо залегающие области n-типа [10]. С другой стороны, суммарное отрицательное (сжимающие) напряжение в нитридных спейсерах создаёт растягивающие напряжение в решетке кремниевой подложки, что представлено на рис. 2.



Рис. 2. Вид структуры МДП транзистора и распределение примеси бора после формирования затвора транзистора

Для формирования транзистора МДП типа с проводимостью n-типа используется подложка Si p-типа КДБ12(100), т.е. кремний легированный бором с исходной концентрацией атомов  $1 \times 10^{15}$  ат./см<sup>2</sup> с кристаллографической ориентацией (100). Подложку подвергают термообработке для формирования защитного слоя оксида кремния и минимизации дефектов вблизи поверхности. Далее следует операция ионной имплантации атомами p-типа (бором) с целью подгонки порогового напряжения до требуемого значения. Затем «дырявый» оксид удаляется жидкостным травлением, и образец повторно окисляется для формирования одного из ключевых элементов - подзатворного диэлектрика. Величина подзатворного SiO<sub>2</sub> составляет несколько HM. Уменьшение толщины подзатворного SiO<sub>2</sub> ведет к возрастанию токов утечки, увеличение толщины – к уменьшению тока стока насыщения транзистора.

Далее формируется затвор транзисторной структуры посредством осаждения поликремния, последующего легирования, литографии и удаления материала Si\*, не защищенного маской (рис. 2)

Длина затвора определяется критическими проектными нормами литографии, в данной работе 130 нм. Затем создают слабо легированные области (LDD), легируя образец атомами п-типа с малой энергией, чтобы примесь находилась в приповерхностной области, что представлено на рисунке 3.

После этого, формируются спейсеры в 2 этапа: осаждение плазмохимического нитрида кремния, травление Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> жидкостным способом, что показано на рисунке 4.

Таким образом, делается задел для области стока и истока: при последующей имплантации примеси n-типа, атомы фосфора не проникают в область канала благодаря нитридным спейсерам. Следующим этапом создают области стока и истока посредством ионной имплантации с энергией, в несколько раз увеличенной, по сравнению с предыдущей операцией имплантации при формировании LDD областей (рис. 5)

Затем осаждают слой алюминия, проводят литографию и удаляют слой металла незащищенного маской. Таким образом, формируют металлические контакты (рис. 6).

Далее показано распределение механических напряжений в финальной структуре (рис. 7).



Рис. 3. Вид структуры МДП транзистора и распределение результирующей примеси после формирования LDD-областей



Рис. 4. Вид структуры МДП транзистора после формирования нитридных спейсеров



Рис. 5. Область стока-истока п-типа



Рис. 6. Финальная структура МДП транзистора



Рис. 7. Распределение механических напряжений в финальной структуре

Затем сделано вертикальное сечение при x=0. Распределение механических напряжений показано на рисунке 8.

Из рисунков 7 и 8 можно заключить, что механические напряжения убывают вглубь подложки. Максимальное напряжение сосредоточено в подзатворном диэлектрике и составляет 106 (МПа). Основной вклад в величину напряжений вносится на этапе формирования затвора. Кроме того видно, что область канала транзистора испытывает положительные (растягивающие) напряжения благодаря нитридным спейсерам. Таким образом, варьируя температуру пассивации поверхности можно управлять величиной подвижности носителей [11]. Поэтому, увеличивается межатомное расстояние. Следовательно, увеличивается подвижность носителей заряда, а значит и величина тока стока транзистора.

Проходная характеристика разработанного транзистора представлена на рисунке 9.

Из рисунка 9 видно, что пороговое напряжение составляет 0.45 (В), величина тока стока прямо пропорциональна напряжению сток-исток, что согласуется с п-типом (донорным) проводимости. Далее показан график (рис. 10) с выходной характеристикой транзистора.

Из рисунка 10 можно заключить, что с увеличением величины положительного напряжения подаваемого на затвор возрастает ток стока насыщения транзистора. Это связано с тем, что электроны из областей подложки, стока и истока перемещаются под действием поля в область канала. Также можно заметить увеличение тока стока насыщения в пологой области, что связано с модуляцией длины канала структуры.



Рис. 8. Распределение напряжений при вертикальном сечении



Рис. 9. Проходная характеристика МДП транзистора



Рис. 10. Выходная характеристика МДП транзистора

### Численное моделирование в среде COMSOL Multiphysics

В рамках данной работы проведено численное моделирование с помощью программного пакета для мультифизического моделирования COMSOL Multiphysics. Данный программный пакет позволяет моделировать различные физические процессы, описание которых возможно в виде системы дифференциальных уравнений в частных производных, с помощью метода конечных элементов. Программа имеет полный спектр инструментов для моделирования: построения модели, описания физического процесса, построения сетки разбиения, моделирования и постобработки результатов расчета. Моделирование может учитывать различные свойства материалов, источники воздействия и граничные условия [12].

Описание модели было произведено с помощью блока «Solid Mechanics» (механика твердого тела) в двумерном пространстве. При выборе модели материала была выбрана модель «Linear Elastic Material» (модель линейного упругого материала). Данная модель образует основу для большинства структурных механических моделирований.

Для линейного упругого материала, закон Гука выражает тензор напряжений  $\sigma_{ij}$  через тензор упругой деформации (формула (3)) :

$$\sigma = \sigma_{ex} + C : (\mathcal{E} - \mathcal{E}_{inel}), \tag{3}$$

где C – тензор упругости 4-го порядка, «:» - обозначение тензорного произведения,  $\mathcal{E}$ - общая деформация,  $\mathcal{E}_{inel}$  - неупругая деформация.

Упругая деформация  $\varepsilon_{el}$  представляет собой разницу между общей деформацией  $\varepsilon$ и всеми неупругими деформациями  $\varepsilon_{inel}$ . Дополнительный вклад в общую величину напряжений может внести внешнее напряжение  $\sigma_{ex}$ , вызванное начальным напряжением или вязкоупругим напряжением.

В случае геометрической нелинейности используются второй тензор напряжений Пиолла-Кирхгофа и тензор напряжений Грина-Лагранжа.

В силу симметрии, тензор деформации  $\mathcal{E}_{ii}$  можно записать в виде (формула (4)):

$$\varepsilon_{ij} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}$$
(4)

Аналогичное представление применимо к тензору напряжений  $\sigma_{ij}$  (формула 5):

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_x & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_y & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_z \end{bmatrix}$$
(5)

Вследствие симметрии, тензор упругости 4-го порядка *С* может быть полностью представлен симметричной матрицей 6 на 6 элементов (формула(6))

$$D = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1112} & C_{1123} & C_{1113} \\ C_{1122} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2212} & C_{2223} & C_{2213} \\ C_{1133} & C_{2233} & C_{3333} & C_{3312} & C_{3323} & C_{3313} \\ C_{1112} & C_{2212} & C_{3312} & C_{1212} & C_{1223} & C_{1213} \\ C_{1123} & C_{2223} & C_{3323} & C_{1223} & C_{2313} \\ C_{1113} & C_{2213} & C_{3313} & C_{1213} & C_{2313} & C_{1313} \end{bmatrix},$$
(6)

которая является матрицей упругости *D*. В случае изотропного материала матрица упругости имеет вид (формула (7)):

$$D = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & 1-\nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & \nu & 1-\nu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} \end{bmatrix}$$
(7)

Существует два различных способа представления ортотропной и анизотропной информации. Стандартное упорядочение данных преобразовывает показатели следующим образом:

[ 11 ]		1		x
22	$\leftrightarrow$	2	$\leftrightarrow$	У
33		3		z.
12,21		4		xy
23,32		5		yz.
13,31		6		_ <i>xz</i> _

Таким образом, закон Гука представляется в форме, включающим матрицу упругости *D* (формула (8)):

$$\begin{bmatrix} \sigma_{x} \\ \sigma_{y} \\ \sigma_{z} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{x} \\ \sigma_{y} \\ \sigma_{z} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \end{bmatrix}_{ex} + D \begin{pmatrix} \varepsilon_{x} \\ \varepsilon_{y} \\ \varepsilon_{z} \\ 2\varepsilon_{xy} \\ 2\varepsilon_{xy} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{xz} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \varepsilon_{x} \\ \varepsilon_{y} \\ \varepsilon_{z} \\ 2\varepsilon_{xy} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{xz} \end{bmatrix}_{inel} \end{pmatrix}$$
(8)

Так как моделирование производилось в двумерном пространстве, то формула 8 может быть представлена в более простой форме (формула(9)):

$$\sigma_x = \sigma_{xex} + D\sigma_{xel} \tag{9}$$

Учитывая тот факт, что в данной конкретной задаче отсутствуют внешние напряжения, получим следующее выражение для закона Гука (формула(10)):

$$\sigma_x = D\sigma_{x_{el}} \tag{10}$$

Акцент авторов в данной работе был сделан на термическом напряжении, возникающем в пленке после проведения технологической операции. Как было сказано выше, основные параметры, влияющие на механические напряжение пленки: температурный коэффициент линейного расширения материалов, модуль Юнга, коэффициент Пуассона пленки и подложки, а также толщина слоев исследуемой структуры.

Как известно [14], обобщенное выражение для определения термического стресса имеет вид (формула(11)):

$$\sigma_{L1} = \frac{(\alpha_2 - \alpha_1)\Delta T E_1 + [1 + nd + \nu_1 + \nu_2 nd]}{(1 + nd)^2}$$
(11)

где  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  – температурные коэффициенты расширения пленки и подложки соответственно,  $\Delta T$  – разница температур,  $E_1$  – модуль Юнга пленки,  $n = \frac{E_1}{E_2}$  – отношение модулей Юнга пленки и подложки,  $d = \frac{t_1}{t_2}$  – отношение толщин пленки и подложки,  $v_1$  и  $v_2$  – коэффициенты Пуассона для пленки и подложки соответственно. Формула (2), для вычисления термического напряжения, является упрощенным выражением формулы (11) для тонких слоёв материалов с противоположным знаком.

Перед началом двухмерного моделирования были заданы начальные и граничные условия. Разница между температурой осаждения и температурой измерения  $\Delta T$  составляет 330(°C). На рисунке 11 показана область поперечного сечения исследуемой структуры, для которой отображены граничные условия. Точке «1» на рисунке соответствует точка фиксированного ограничения (fixed constraint), а точке «2» - точка предписанного перемещения (prescribed displacement). Выбор точек «1» и «2» обусловлен необходимостью задания граничных условий с целью минимального влияния на результат моделирования.



Рис. 11. Отображение граничных условий, необходимых для дальнейшего моделирования



Рис. 12. Построение сетки в программе COMSOL Multiphysics

Далее была построена сетка конечных элементов. Расчетная сетка конечных элементов необходима для двух задач. Первая – разбиение смоделированных в САПР геометрий на меньшие части или элементы. По ним можно записать систему уравнений, описывающую решение главного уравнения. Также сетка используется для отображения области решения физических задач [13]. Кроме того, конечный результат моделирования во многом зависит от частоты, величины и плавности сетки. Очевидно, что чем мельче разбить исследуемую структуру на конечные элементы при построении сетки, тем более точными будут результаты моделирования, но время расчёта будет более продолжительное. На рисунке 12 представлен фрагмент, который отображает метод построения сетки для данного конкретного случая.

После построения сетки было произведено моделирование исследуемой структуры, причём свойства материала были изотропными. На рисунке 13 изображено распределение тензора напряжения всей структуры, а на рисунке 14 отображено распределение тензора напряжения части двухслойной структуры, захватывающую пленку SiO<sub>2</sub>.



Рис. 13. Распределение тензора напряжения структуры Si/SiO<sub>2</sub>



Рис. 14. Распределение тензора напряжения части структуры Si/SiO<sub>2</sub> на границе раздела подлох пленка



Рис. 15. График зависимости тензора напряжения пленки SiO2 от положения по x-координате



Рис. 16. График зависимости тензора напряжения пленки Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> от положения по х-координате

На рисунке 13 видно, что после проведения термообработки образец Si/SiO<sub>2</sub> изменил геометрические размеры.

Также были получены графики тензора напряжения для пленок SiO<sub>2</sub> и Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> толщиной  $50(_{MKM})$ . Данные графики показаны на рисунках 15 и 16. С помощью этих графиков было определено значение напряжения для пленок оксида и нитрида, которые составили 47,7(*MПa*) и  $-133,6(M\Pi a)$  соответственно.

Из рисунков 15 и 16, необходимо отметить, что на краях пленки напряжение резко изменяется вследствие краевых эффектов. Также из рисунков 15 и 16 видно, что напряжение пленки  $SiO_2$  имеет положительный знак, тогда как напряжение пленки  $Si_3N_4$  отрицательно.

Результаты моделирования термических напряжений были сравнены с результатами, рассчитанными по формуле (11). Согласно формуле (11) продольное термическое напряжение для нитрида кремния составляет ( $-115(M\Pi a)$ ), а для оксида кремния 34.6 ( $M\Pi a$ ). В таблице 2 представлены значения, вычисленные с помощью теоретической формулы (11) и рассчитанные по результатам моделирования в COMSOL Multiphysics для двух материалов пленок – Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> и SiO<sub>2</sub>.

Исходя из формулы 11 одним из параметров, с помощью которого можно повлиять на термическое напряжение является отношение толщин пленки и подложки, так как остальные параметры являются параметрами материала. Пусть толщина подложки остается постоянной. Следовательно, варьируя толщину плёнки, будет изменяться величина механических напряжений, вызванные разницей ТКЛР слоёв материалов.

Произведено параметрическое моделирование для пленок нитрида и оксида, где в качестве параметра выбрана толщина пленки. Также, для сравнения был произведен расчет термического напряжения для разных толщин пленок по теоретической формуле (11). Результаты представлены на рисунках 17 и 18. На рисунке 17 изображены графики зависимостей термического напряжения от толщины пленки  $Si_3N_4$  рассчитанные с помощью COMSOL Multiphysics и по теоретической формуле. На рисунке 18 отображены те же зависимости только для пленок оксида кремния.

Анализируя рисунки 17 и 18 можно сказать, что термическое напряжение пленки уменьшается по модулю с увеличением толщины пленки, что согласует с формулой (11). Также, исходя из данных рисунков видно, что напряжение перестает возрастать по модулю при толщине пленки менее 10 мкм, поэтому можно сделать следующий вывод: при малых толщинах пленки (толщина подложки на несколько порядков больше толщины пленки) термическое напряжение пленки не зависит от ее величины.



Рис. 17. Сравнение зависимостей термического напряжения пленки  $Si_3N_4$  от толщины пленки (сплошная линия соответствует зависимости, рассчитанной с помощью COMSOL Multiphysics; пунктирная линия соответствует теоретической зависимости)

	Термическое напряжение,	Термическое	Относительная
Материал	полученное по результатам	напряжение,	погрешность,
пленки	моделирования в COMSOL	вычисленное по	
	Multiphysics,	формуле (11),	
Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	-133,6	-115	14
SiO <sub>2</sub>	47,7	34,6	27,5

Таблица 2. Сравнение результатов аналитического расчёта и моделирования в COMSOL



Рис. 18. Сравнение зависимостей термического напряжения пленки SiO<sub>2</sub> от толщины пленки (сплошная линия соответствует зависимости, рассчитанной с помощью COMSOL Multiphysics; пунктирная линия соответствует теоретической зависимости)

Заключение. В среде TCAD рассчитаны термические напряжения в диэлектрической мембране на кремниевой подложке. Продемонстрирован маршрут формирования МДП транзистора, схемотехническое моделирование. С помощью программы COM-SOL Multiphysics было произведено математическое моделирование, вследствие которого были рассчитаны термические напряжения пленок  $Si_3N_4$  и  $SiO_2$  в структурах  $Si/Si_3N_4$  и  $Si/O_2$ . Получена зависимость термического напряжения от толщины пленки, исходя из которой, сделан вывод о том, что при малых толщинах пленки термическое напряжение пленки не зависит от ее толщины. Результаты моделирования в пакетах TCAD и COMSOL Multiphysics хорошо согласуются с аналитическим расчётом.

Поддержка. Работа была выполнена при поддержке Минобрнауки России, ГК № 3.2501.2014/К, с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Микросистемная техника и электронная компонентная база» МИЭТ.

### Литература

- 1. Беспалов В.А., Васильев И.А., Дюжев Н.А., Мазуркин Н.С., Новиков Д.В., Попков А.Ф. Моделирование первичного преобразователя скорости потока газа мембранного типа // Известия Вузов, Электроника, 2014, №3, с.50-56.
- 2. Дюжев Н.А., Королёв М.А., Катеев М.В., Гусев Е.Э. Моделирование зависимости выходных характеристик первичного преобразователя датчика потока мембранного типа от его конструктивных параметров // Известия Вузов, Электроника, 2015, №6, с. 644-647.
- 3. *Lindroos V., Tilli M., Lehto A., Motooka T.* Handbook of Silicon Based MEMS Materials and Technologies // Burlington, Elsevier, 636 p., 2010.
- 4. Laconte J., Flandre D., Raskin J.-P. Micromachined thin-film sensors for SOI-CMOS Co-Integration // Springer, 294 p., 2006.
- Sinha A.K., Levinstein H.J., Smith T.E. Thermal stresses and cracking resistance of dielectric films (SiN, Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, and SiO<sub>2</sub>) on Si substrates // Journal of Applied Physics. Vol. 49, p.2423 – 2426, 1978
- 6. Сайт производителя программного та TCAD // URL: http://www.synopsys.com/tools/tcad.
- 7. *Майссел Л., Глэнг Р.* Технология тонких плёнок // Москва, Советское радио, том 2, глава 12,768с., 1977
- 8. Дюжев Н.А., Дедкова А.А., Гусев Е.Э., Новак А.В. Методика измерения механических напряжений в тонких плёнках на пластине с помощью оптического профилометра // Известия Вузов, Электроника, 2016, №4, с. 367-372.
- 9. *Fantini P*. Modeling oriented to Non-Volatile Memory technology platforms // Conference Italy, 2010, 20 January.
- 10. Королёв М.А., Крупкина Т.Ю., Ревелева М.А. Технология, конструкции и методы моделирования кремниевых интегральных микросхем // Москва, БИНОМ, 2007, часть 1, 397 с.
- Рубцевич И.И., Соловьев Я.А., Высоцкий В.Б., Дудкин А.И., Ковальчук Н.С. Исследование свойств пленок нитрида и оксида кремния, полученных методом плазмохимического осаждения на кремниевую подложку // Технология и конструирование в электронной аппаратуре, 2011, № 4, с. 29 – 32.
- 12. Сайт производителя программного пакета для мультифизического моделирования Comsol MultiPhysics // URL:http://www.comsol.com.
- 13. Сайт производителя программного пакета для мультифизического моделирования Comsol MultiPhysics // URL:http://www.comsol.ru
- Lehman J. J. and Lakes R. S. Stiff, strong, zero thermal expansion lattices via material hierarchy // Composite Structures, vol. 107, p.654-663, January 2014.

# NUMERICAL SIMULATION OF THERMAL STRESS IN MICROELECTROMECHANICAL STRUCTURES WITH SOFTWARE PACKAGE TCAD AND COMSOL MULTIPHYSICS

N.A. Djuzhev, E.E. Gusev, P.U. Glagolev

National Research University of Electronic Technology, Moscow

bubbledouble@mail.ru

Received 19.08.2016

It shows the result of thermal stress simulation dielectric membrane on a siliconsubstrate in TCAD environment. It is shown that stress diagram. Demonstrated route formation of MDS transistor, and the output and transfer characteristic, evidently illustrated the distribution of mechanical stresses in the MEMS device. In an environment made COMSOL Multiphysicsmodeling of the Si substrate - film. It demonstrates the correlation of numerical modeling insoftware environments and the analytical calculation.

# ВЫЧИСЛЕНИЕ НАПРЯЖЕННОСТИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В КРЕМНИЕВОМ АВТОЭМИССИОННОМ НАНОКАТОДЕ

## В.И. Кретов

Московский технический университет связи и информатики

vkretov@mtuci.ru

Поступила 19.09.2016

В статье представлены результаты расчета потенциала и напряженности электрического поля при автоэлектронной эмиссии из конического катода малого размера. Сравниваются три задачи: в одной потенциал вычисляется непосредственно внутри катода, в другой учитывается пространство, заполненное вакуумом, вокруг катода, в третьей, в дополнение ко второй задаче, учитывается зазор между катодом и анодом.

УДК 519.6

### 1. Введение

В данной статье мы продолжаем исследование электронной автоэмиссии, начатое в [1, 2, 3, 10]. В тех статьях мы изучали теплоперенос и возможный фазовый переход (плавление катода) в коническом автоэмиссионном катоде из кремния. Мы рассматривали область, включающую только катод (рис. 1.1). В настоящей статье мы будем рассматривать три варианта формулировки задачи, обозначим их I, II, III.



Рис. 1.1. Модель катода

Вариант I — это задача из работ [1, 2, 3]. В задачах II и III катод помещен в параллелепипед, заполненный вакуумом, который моделирует пространство вокруг катода. II и III отличаются тем, что в II верхнее основание катода лежит на верхней стороне параллелепипеда, а в III основание катода находится внутри параллелепипеда, соответственно, между верхним основанием катода и верхней стороной параллелепипеда есть зазор, заполненный вакуумом, см. рис. 1.1. Более подробно об этих вариантах см. ниже.

Математическая формулировка задачи, исследуемой в [1] имеет вид:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} - \hat{k} \triangle \theta = -\frac{1}{2} \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \hat{F}, \qquad (1.1)$$

$$\varepsilon \hat{\alpha} \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \varepsilon \hat{\beta}^2 \Delta \varphi = \frac{1}{\varepsilon} (\varphi - \varphi^3) + \chi (1 - \varphi^2) (\theta - \bar{\theta}_0), \qquad (1.2)$$

$$\operatorname{div} j = 0. \tag{1.3}$$

Эта модель учитывает возможность фазового перехода (плавления внутри катода). Здесь  $\theta$  — безразмерная температура,  $\varphi$  — функция порядка, определяющая фазовое состояние вещества, j — плотность тока внутри катода,  $\hat{F}$  — джоулево тепло,  $\varepsilon$  малый параметр, который получается при регуляризации задачи Стефана-Гиббса-Томсона, см. [4]. Остальные параметры являются константами,  $\hat{\alpha}$  и  $\hat{\beta}$  получены из условия Гиббса-Томсона [4],  $\hat{k}$  — удельная температуропроводность. Все параметры безразмерные, подробнее см. [1].

Здесь мы рассмотрим подробнее часть задачи отвечающую за вычисление плотности тока, и не будем останавливаться на вычислении температуры и функции порядка. Все необходимые для вычисления потенциала величины, зависящие от температуры, мы берем из [1] при температуре, близкой, но меньшей температуры плавления. Плотность тока находится по формуле  $j = \sigma E$ , где E — напряженность электрического поля, а  $\sigma$  — удельная проводимость катода, которая, вообще говоря, зависит от температуры. E находится из выражения  $E = -\nabla \Psi$ , где  $\Psi$  — потенциал электриче-



Рис. 1.2. Распределение температуры на оси катода. Температура дана в безразмерных единицах, см. (1.4)

ского поля, который получается из уравнения Лапласа. Удельная проводимость  $\sigma(T)$  находится с помощью формул из [5, 6]. В нашей задаче распределение температуры на оси катода при численном решении (см. [1]) имело вид, изображенный на рис. 1.2. На этом графике температура приведена в безразмерных единицах,

$$\theta = \frac{c}{l}(T - T_0), \tag{1.4}$$

где c —удельная теплоемкость, l — скрытая теплота плавления, T — температура в Кельвинах,  $T_0$  — температура плавления кремния,см. [1]. Как видно, температура во всей области почти постоянна, за исключением верхнего основания (на графике находится слева), где она несколько меньше. На этом и всех последующих графиках единица расстояния вдоль оси катода z равна  $10^{-5}$  м, что соответствует высоте катода, участвовавшего в эксперименте из [7].

Как отмечено выше, в [1], [2] мы выполняли моделирование при очень высоких температурах (близких к температуре плавления кремния равной 1683 К). Так мы берем во всей области температуру, полученную при прежних вычислениях (см. рис. 1.2) для того, чтобы вычислить удельную проводимость, нужную для вычисления потенциала. Формула для проводимости имеет вид [5, 6, 8]

$$\sigma(T) = \sigma_0 \exp\left(\frac{-W_g}{2k_{\rm B}T}\right),\,$$

где

$$\sigma_{0} = e\sqrt{N_{c}N_{v}} \left(\frac{eA_{n}}{\sqrt{3k_{B}m_{n}^{*}}}T^{-3/2} + \frac{eA_{p}}{\sqrt{3k_{B}m_{p}^{*}}}T^{-3/2}\right) = e\frac{(2\pi k_{B})^{\frac{3}{2}}}{h^{3}}\sqrt{(m_{n}^{*}m_{p}^{*})^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{eA_{n}}{\sqrt{3k_{B}m_{n}^{*}}} + \frac{eA_{p}}{\sqrt{3k_{B}m_{p}^{*}}}\right).$$

Здесь e — заряд электрона,  $N_c, N_v$  — эффективные плотности состояний для зоны проводимости и валентной зоны,  $k_{\rm B}$  — постоянная Больцмана, h — постоянная План-

ка,  $W_g$  — ширина запрещенной зоны,  $m_n^*$  и  $m_p^*$  — эффективные массы электронов и дырок соответственно,  $A_n$  и  $A_p$  — некоторые коэффициенты.

Вычисленная по этой формуле проводимость при температуре как на рис. 1.2 примерно равна  $\sigma\approx 24300~{\rm Cm/m}.$ 

## 2. Методы

В [1], [2] рассматривалась область, состоящая только из катода, причем задача решалась в сферических координатах. Катод представлял собой усеченный конус, см. рис. 1.1. На поверхности катода ставились граничные условия  $\Psi|_{r=r_0} = 0, \Psi|_{r=r_1} = \Psi_1, \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{n}}\Big|_{\Gamma_S} = 0.$ 

В реальности в автоэмиссионной установке катод окружен вакуумом, в который эмитируют электроны. Поэтому естественно рассматривать катод, помещенный в вакуум. Мы рассматриваем катод как усеченный конус, помещенный в параллелепипед, заполненный вакуумом, см. рис. 1.1. Итак, мы имеем три варианта области, в которой проводится моделирование: только катод в виде усеченного конуса в задаче I из [1], [2], см. рис. 1.1, катод, помещенный в параллелепипед, заполненный вакуумом, и где верхнее основание катода совпадает с верхней стороной параллелепипеда (задача II), и, наконец, задача III, где верхнее основание находится внутри параллелепипеда.

В задаче II (без зазора) на верхней и нижней стороне параллелепипеда, ограничивающего рассматриваемую область, ставятся следующие граничные условия:  $\Psi\Big|_{\Gamma_0} = 0$  и  $\Psi\Big|_{\Gamma_1} = \Psi_1$ , соответственно. Как и в статье [1],  $\Psi_1 = 4$  В. На боковой поверхности катода и на боковой поверхности области, в которой решаются уравнения, ставятся условия Неймана (см. [9]). В задаче III верхнее основание катода находится внутри области моделирования. В этом случае верхняя сторона области моделирования соответствует аноду, и между анодом и катодом имеется некоторый зазор *h*. Т.е. в отличие от задач I и II, рассматривающих только катод, задача III достаточно точно моделирует реальную задачу об эмиссии с анодом и катодом.

Во всех областях в задачах I, II и III мы решаем уравнение Лапласа для нахождения потенциала (с соответствующими граничными условиями):

$$\nabla(\sigma\nabla\Psi) = 0, \tag{2.1}$$

$$\Psi|_{\Gamma_0} = 0, \tag{2.2}$$

$$\Psi|_{\Gamma_1} = \Psi_1. \tag{2.3}$$

$$\left. \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{n}} \right|_{\Gamma_S} = 0, \tag{2.4}$$

$$E = -\nabla \Psi. \tag{2.5}$$

Здесь  $\Gamma_0$  и  $\Gamma_1$  — верхняя и нижняя границы области моделирования соответственно,  $\Gamma_S$  — боковая поверхность области моделирования. В уравнении  $\sigma$  вне катода считается малой. В вычислениях мы берем значение  $\sigma = 10^{-7}$ . Дальнейшее уменьшение  $\sigma$  не влияет на результат. Геометрические параметры варьировались в определенных пределах. Мы базируемся на параметрах, используемых в экспериментах [7]. Везде, где не оговаривается иное, высота катода равна  $10^{-5}$  м (одна безразмерная единица



Рис. 2.1. Потенциал в катоде. Вариант II

на графике), расстояние от вершины конуса до пересечения боковой поверхности с верхнем основанием —  $2 \cdot 10^{-8}$  м, угол  $\vartheta$  при вершине конуса — 0,1 радиан.

В задачах II и III используется метод конечных элементов, в отличие от задачи I, где использовался метод конечных разностей.

В первую очередь приведем типичные графики потенциала и напряженности, см. рис. 2.1, 2.2. Для всех наших вычислений в задачах I и II распределение потенциала и напряженности не имеет качественных различий, поэтому мы приводим эти графики только один раз для задачи II. На графиках изображен потенциал и напряженность на оси катода. Верхнее основание катода соответствует нулю на графике.

Приведем результаты вычислений, изменяя угол  $\vartheta$  при вершине катода. При этом мы будем сохранять площадь верхнего основания и высоту.

Результаты вычислений приведены на графике, см. рис. 2.3. На графике показана напряженность в центре верхнего основания катода. В остальной области напряженность меняется мало, как видно на рис. 2.2.

Наконец, перейдем к задаче III. В задаче III распределение потенциала и напряженности принципиально отличается от задач I и II, см. рис. 2.4, 2.5. Видно, что потенциал существенно изменяется только в зазоре между катодом и анодом. Соответственно, максимальное значение напряженности по-прежнему достигается на верхнем основании, а внутри области напряженность меняется мало. Для большей наглядности оба графика приведены не на всей оси катода, а только на ее части, прилегающей к верхнему основанию катода.

В задаче III при моделировании мы будем варьировать зазор между катодом и анодом при том, что остальные параметры останутся неизменными. Приведем соот-



Рис. 2.2. Напряженность поля в катоде. Вариант II



Рис. 2.3. График зависимости напряженности от угла д при сохранении площади верхнего основания. Варианты I, II

ветствующий график (см. рис. 2.6). Наиболее близко к результатам, приведенным для задач I и II, находится результат при величине зазора, равной 0,004. Варьируя



Рис. 2.4. Потенциал. Задача III



Рис. 2.5. Напряженность поля. Задача III

угол при этом зазоре, получим результаты, приведенные на рис. 2.7. Можно сказать, что зависимость от угла явно не прослеживается, а незначительно отличающиеся значения на графике объясняются погрешностью вычислений.



Рис. 2.6. Зависимость напряженности поля от величины зазора. Угол  $\theta = 0,1$ . Зазор приведен в единицах  $10^{-5}$  м, как на остальных графиках



Рис. 2.7. Зависимость напряженности поля от угла. Задача III. Зазор 0,004. Горизонтальная пунктирная линия показывает среднее значение

### 3. Результаты

В результате вычислений установлено, что для I и II вариантов модели результаты численного моделирования не имеют качественных отличий, хотя численные значения напряженности могут заметно отличаться при больших значениях угла при вершине катода. При маленьких углах численные значения отличаются не очень сильно. Результаты моделирования показывают, что задача III (с зазором) имеет качественное отличие от задач I и II. Оно заключается в том что основное падение потенциала, и, следовательно, наибольшие напряженности достигаются в зазоре, а не внутри катода. При этом установлена зависимость напряженности от величины зазора. Еще одно отличие от задач I и II — практическое отсутствие зависимости от угла при вершине катода. Полученные результаты показывают, что, вообще говоря, результаты моделирования для задачи с зазором между катодом и анодом, и задачи, включающей только катод, различаются существенно. Однако, при определенной величине зазора, допустимо использовать первый вариант модели для грубого анализа.

### 4. Discussion

This paper continues our work published in [1, 2, 3] but in opposition to those articles where we concerned on temperature calculation and process of melting and emission itself, here we calculate only potential distribution and field strength. It is shown in this paper that for more accurate results it is not enough to take into consideration only cathode itself, the problem including a space between cathode and anode should be considered instead. The results of these calculation could be applied for further theoretical studies of field emission cathodes. We notice that the problem solved here is electrostatic problem, but in reality there is a current in the experimental device so in our future work we are going to take into account emission current and then perform new calculations of our main (phase-field) problem to get heat distribution and analyze melting and nucleation process with new circumstances.

### Литература

- 1. *Danilov V.G., Gaydukov R.K., Kretov V.I, Rudnev V.Yu.* Modelling of Liquid Nuclei Generation for Field-Emission Silicon Nanocathode // IEEE Transactions on Electron Devices, 2014, 61, 4232-4239.
- 2. Danilov V.G., Rudnev V.Yu., Kretov V.I. Simulation of the heat transfer in the nanocathode // Open Journal of Applied Sciences, 2012, 2, 78-81.
- 3. *Danilov V.G., Rudnev V.Yu., Kretov V.I.* Simulation of the heat transmission in the nano–sized cathode. Fourth International Conference for Differential Equations and Applications dedicated to Ya. B. Lopatinskii // Book of Abstracts; Donetsk, Ukraine, 2012, p. 94.
- 4. *Caginalp G*. Stefan and Hele–Shaw type models as asymptotic limits of the phase field equations // Physical Review A, 1989, 39, 5887-5896.
- 5. Стильбанс Л.С. Физика полупроводников // Советское радио, 1967.
- 6. Шалимова К.В. Физика полупроводников // Энергоатомиздат, М., 1985.
- Dyuzhev N., Gudkova S., Makhiboroda M., Fedirko V. Study of emission properties of selicon cathodes of different geometry. Vacuum Science and Technology // Proc. of XII Science-Technical Conference with Participation of Foreign Specialists; Bykov, D.V., Ed.; MIEM, Moscow, 2005, pp. 221-224.
- 8. Данилов В.Г., Руднев В.Ю., Гайдуков Р.К., Кретов В.И. Математическое моделирование эмиссии из катодов малых размеров // Горячая линия Телеком, М., 2014.
- 9. Vinogradova E.M., Egorov E.N., Televnyy D.S. Mathematical modeling of field emitter array. // Vacuum, 2016, 133, 45-50.
- Данилов В.Г., Руднев В.Ю., Гайдуков Р.К., Кретов В.И. Математическое описание режима "плавлениезатвердевание" в автоэмиссионном катоде при учете эффекта Ноттингама // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, 2013, 9(1), 39–84.

# CALCULATION OF ELECTRIC FIELD STRENGTH IN FIELD-EMISSION SILICON NANOCATHODE

## V.I. Kretov

Moscow Technical University of Communication and Informatics

vkretov@mtuci.ru

Received 19.09.2016

This paper presents the results of numerical calculations of the potential and electric field strength in field emission from a conic cathode of small dimensions. Here the following three problems are compared: in one of them, the potential is calculated directly inside the cathode, in the second problem, the vacuum space around the cathode is taken into account, and in the third problem, the gap between the cathode and the anode is considered in addition to the second problem.

# РАСЧЕТЫ РЕЗОНАНСОВ В АТОМНОЙ, МОЛЕКУЛЯРНОЙ И ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ НА ОСНОВЕ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

С.А. Позднеев

Физический институт им.П.Н.Лебедева, РАН Отделениие квантовой радиофизики Лаборатория фотохимических процессов

pozdneev@sci.lebedev.ru

Поступила 10.03.2016

Посвящается памяти выдающегося физика и математика Фаддеева Людвига Дмитриевича

Представлены расчеты различных характеристик (таких как сечения, скорости реакций и т.д.) резонансных процессов лазерной, атомной, молекулярной и ядерной физики основанные квантовой теории рассеяния в системе нескольких частиц. Обсуждаются результаты исследования процессов столкновения электронов и атомов с двухатомными молекулами, двухатомных молекул между собой, находящимися в определенных возбужденных колебательно-вращательных состояниях. Рассмотрены различные приближения, необходимые для расчетов реальных физических систем, состоящих из нескольких тел, которые применимы для моделирования как прямых реакций, так и реакций, происходящих с образованием промежуточного переходного комплекса. Результаты расчетов сечений столкновений электронов и атомов с двухатомными молекулами, а также двухатомных молекул между собой, сопоставляются с имеющимися экспериментальными данными и результатами расчетов других авторов.

УДК 539.17

## 1. Введение

Потребности практики, связанные с разработкой новых химических лазеров на электронных переходах атомов и молекул [1], средств диагностики плазмы [1,2], лазерном термоядерном синтезе [1–3], астрофизическими исследованиями [1–4], развитием новых нано-технологий [3], созданием новых химических соединений с заданными свойствами и целенаправленным поиском оптимальных путей их синтеза [1–7], с разработкой ЭВМ новых поколений, в частности оптических и нейро-ЭВМ [7], с и т.д. требуют новых методов и основанных на них средств для расчетов основных характеристик различных элементарных процессов, таких как взаимодействия излучения с веществом, столкновения электронов и атомов с атомами и молекулами, молекул и нуклонов между собой и т.п.

Например, для расширения спектрального диапазона и повышения мощности подобных химических лазеров [1] необходим целенаправленный поиск химических реакций, обладающих заданными свойствами, экспериментальное изучение которых не в состоянии обеспечить в конкретных приложениях данными, необходимой точности и полноты.

Поэтому в настоящее время большое внимание привлекают теоретические методы исследования подобных процессов.

Основные трудности при этих исследованиях характеристик элементарных процессов ядерной, атомной и молекулярной физики связаны с многомерностью задачи и с тем, что для наиболее типичных реакций не выполняются приближения теории возмущений [5–7]. Таким образом в настоящее время можно выделить несколько направлений, по которым проводится эти исследования

Исследования, основанные на классических уравнениях Гамильтона–Якоби, полуклассических, квазиклассических представлениях, а также модели, основанные на адиабатическом приближении, квантовомеханические модели.

Принципиальные трудности при решении этой задачи связаны со сложностью формулировки асимптотических граничных условий для состояний рассеяния. Это обстоятельство особенно ярко проявляется в расчетах сечений при энергиях налетающих частиц выше порога развала на свободно движущие частицы (диссоциация). Именно поэтому при решении подобных задач во многих работах [4–7] существенное внимание уделяется разработке упомянутых выше методов и различных модификаций адиабатического, борновского и других приближений, причем основная особенность этих методов состоит в том, что реальная многочастичная система приводится к двухчастичной, в рамках которой и определяют все динамические характеристики процессов рассеяния (амплитуды, фазы и сечения рассеяния, константы скоростей реакций и т.п.). В результате таких приближений существенно сужается спектр исследуемых свойств реальной многочастичной системы т.к. она обладает качественно новыми, не свойственными двухчастичной системе свойствами.

Поэтому следующим естественным приближением для последовательных квантовомеханических расчетов сечений элементарных процессов ядерной, атомной и молекулярной физики является метод квантовой задачи рассеяния в системе нескольких частиц.

Наиболее последовательным и математически корректным методом исследования элементарных процессов в области низких и средних энергий является метод, основанный на интегральных уравнениях, сформулированных Л. Д. Фаддеевым и О. Я. Якубовским [6], которые описывают нерелятивистское движение нескольких частиц, взаимодействующих при помощи парных потенциалов.

Корректная формулировка задачи рассеяния для системы нескольких частиц, разработанная в этих работах позволила реализовать новые численные методы для моделирования различных процессов ядерной, атомной и молекулярной физики, математически строго обосновать различные, приведенные выше приближенные методы решения многочастичных задач и корректно определить границы применимости этих приближений, а также взаимосвязь между ними. Первые попытки применить интегральные уравнения квантовой теории рассеяния для расчетов различных элементарных процессов были предприняты в работах [4-7]. Однако основное внимание в этих работах уделялось постановке задачи, выбору основных приближений и численных методов решения. В результате построенные модели этих работ эквивалентны моделям с применением приближения Борна. Это связано с большими вычислительными трудностями прямого численного решения систем интегральных уравнений, которые в основном определяются нелокальной природой этих уравнений.

Поэтому в работах [6,7] было предложено использовать дифференциальные уравнения, которые получаются при помощи дифференцирования интегральных уравнений в конфигурационном пространстве. Основные достоинства дифференциальной формулировки следующие:

- локальность дифференциальных уравнений значительно сокращает вычислительные ресурсы, необходимые для для обращения матриц, возникающих после дискретизации системы интегральных уравнений;

- асимптотика каждой отдельной компоненты ВФ для пары частиц описывается в терминах соответствующих якобиевых координат и содержит лишь один член, порожденный собственной функцией данной связанной пары, а не сумму по всем парам, как в случае решения уравнения Шредингера;

- дифференциальная формулировка позволяет получить модифицированные дифференциальные уравнения для задачи рассеяния в системе заряженных частиц на основе прямых асимптотических методов;

- модифицированные дифференциальные уравнения позволили исследовать низкоэнергетические и угловые особенности в амплитудах рассеяния систем нескольких заряженных частиц и получить обширную информацию об особенностях протекания элементарных процессов и методов управления этими процессами;

- дифференциальная формулировка позволяет создать методы и средства решения задачи рассеяния в системе нескольких тел в модели граничных условий [6].

Системы интегральных уравнений (СИУ) и системы дифференциальных уравнений (СДУ) квантовой теории рассеяния в системе нескольких частиц, полученные в работах [6,7], являются основой для решения многочисленных теоретических и прикладных задач квантовой механики, математической физики, гидродинамики, теории упругости и т.д. и т.п.

Аналитическое решение СИУ и СДУ в общем случае является скорее исключением [6,7], чем правилом. Поэтому значительный интерес представляют методы численного решения этих уравнений, которые стали особенно актуальными в связи с широким применением этих уравнений для исследования различных характеристик элементарных процессов лазерной, атомной и молекулярной физики. Для этих целей и были разработаны соответствующие численные методы и основанные на них пакеты прикладных программ (ППП)[7,8].

Поэтому в настоящей работе на основе метода квантовой теории рассеяния в системе нескольких частиц как в интегральной так и в дифференциальных формах с использованием разработанных численных методов и реализованного на их основе ПО в виде ППП проведены исследования различных процессов (связанных состояний и состояний рассеяния (упругого рассеяния, возбуждения, перестройки и диссоциации), происходящих при столкновении протонов с атомами и ионами, электронов с двухатомными молекулами водорода, галогенов, галогеноводородов и их изотопозамещенных модификаций, лития, азота и галогенидов щелочей, находящихся как в ос-
новных так и в возбужденных колебательно-вращательных состояниях [7]. Произведены расчеты различных процессов, происходящих при столкновении атомов водорода с ионами углерода, гелия, процессов, происходящих при столкновении с атомами, находящимися в высоко озбужденных (ридберговских) состояниях [7,8]. Проведены исследования элементарных процессов, происходящих при столкновании электронов и атомов с двухатомными молекулами и трехатомными ( $O + CS_2$ , O + OCS) молекулами, процессов с участием трех атомов, первоначально находящихся в свободном состоянии ( $H + H + H \rightarrow H_2(v = n) + H$ ), а также двухатомных молекул между собой, в частности расчет обмена колебательной энергией в процессе столкновения молекул HCl. Представлены исследования реакции  $O + CF_3I \rightarrow IO + CF_3$  на основе кластерной модели в рамках квантовой теории рассеяния в системе трех тел.

В качестве иллюстрации универсальности предлагаемого метода проведены также расчеты в области ядерной физики, а именно расчеты процессов происходящих при столкновении нейтронов и протонов с дейтонами, альфа-частиц с ядрами <sup>8</sup>Be, а также связанных состояний иона позитрония, ядер трития и гелия-3 [7–9].

# 2. Математические основы построения моделей

Интегральные уравнения квантовой теории рассеяния в системе трех тел [6,7] формулируются для трех частей на которые разбивается полная волновая функция система трех тел

$$\Psi = \sum_{i=1}^{3} \Psi_i,$$

каждая из которых соответствует всевозможным разбиениям системы трех частиц на невзаимодействующие подгруппы. Эти уравнения в импульсном пространстве в случае рассеяния частицы 1 на связанной паре (2,3) имеют следующий вид [6]:

$$\Psi_{i} = \Phi_{i}\delta_{i1} - G_{0}(Z)T_{i}(\Psi_{j} + \Psi_{k}),$$

$$i, j, k = 1, 2, 3; 3, 1, 2; 2, 1, 3;$$

$$(1)$$

где  $\Phi_1$  описывает исходное состояние системы трех тел: свободное движение частицы 1 и связанное состояние пары (2,3);  $G_0(Z) = (H_0 - Z)^{-1}, Z = E + i0, H_0$  – оператор свободного движения трех частиц; *E*-полная энергия системы трех тел, равная сумме кинетической энергии налетающей частицы 1 и энергии связи пары (2,3),  $T_i$  – парная Т-матрица, которая определяется однозначно через парные потенциалы взаимодействия  $V_i$  при помощи уравнений Лимпана–Швингера [5–7]

$$T_i = V_i + V_i G_i T_i, (2)$$

Для описания движения трех частиц в системе центра инерции воспользуемся общепринятыми координатами Якоби, которые определяются следующим образом:

$$\vec{k}_1 = (m_3 \vec{q}_2 - m_2 \vec{q}_3) / (m_2 + m_3),$$
  
$$\vec{p}_1 = m_3 (\vec{q}_1 + \vec{q}_2) - (m_1 + m_2) \vec{q}_3 / (m_1 + m_2 + m_3)$$

где  $m_i, \vec{q_i}$  – массы и импульсы каждой частицы. Аналогично определяются координаты  $\vec{k_2}, \vec{p_2}, \vec{k_3}, \vec{p_3}$ .

В этих переменных

$$\Phi_1(\vec{k}_1, \vec{p}_1) = \varphi(\vec{k}_1)\delta(\vec{p}_1 - \vec{p}_1^o)$$

где  $\varphi$  – волновая функция начального состояния системы (2,3) с энергией связи  $\kappa_1^2, \vec{p}_1^\circ$  – импульс налетающей частицы 1.

$$Z = p_1^{o^2}/2n_1 + \kappa_1^2/2m_{23} + i0,$$
  
$$n_1 = m_1(m_2 + m_3)/(m_1 + m_2 + m_3), m_{23} = m_2m_3/(m_2 + m_3)$$

Операторы G<sub>0</sub> и T<sub>i</sub> являются интегральными с ядрами следующего вида:

$$T_i(\vec{k}_i, \vec{k}'_i, \vec{p}_i, \vec{p}'_i; Z) = t_i(\vec{k}_i, \vec{k}'_i; Z - p_i^2/2n_i)\delta(\vec{p}_i - \vec{p}'_i),$$
  
$$G_0(\vec{k}_i, \vec{k}'_i, \vec{p}_i, \vec{p}'_i; Z) = \delta(\vec{k}_i - \vec{k}'_i)\delta(\vec{p}_i - \vec{p}'_i)/[k_i^2/2m_{jk} + p_i^2/2n_i - Z].$$

Парные Т-матрицы  $t_i(\vec{k}_i, \vec{k}'_i; Z)$ , входящие в ядра уравнений (1) имеют особенности по переменной Z: полюса, соответствующие дискретному спектру парных подсистем и разрез по положительной части вещественной оси, порождаемой спектром задачи двух тел, причем явный вид этих особенностей дает спектральное представление Т-матрицы [6]:

$$\begin{split} t(\vec{k}, \vec{k}'; Z) &= V(\vec{k} - \vec{k}') + \sum_{i} \psi_i(\vec{k}) \psi_i(\vec{k}') / (\kappa_i^2 + Z) + \\ \int t(\vec{k}, \vec{x}; x^2 \pm i0) t(\vec{k}', \vec{x}; x^2 \pm i0) dx / (Z - x^2/2m), \end{split}$$

где  $\psi_i(\vec{k}) = (\kappa_i^2 + k^2)\varphi_i(\vec{k})$ , а  $-\kappa_i^2$  и  $\varphi_i(\vec{k})$  – энергия и ВФ связанного состояния двух частиц в импульсном представлении.

Полюса Т-матрицы, соответствующие дискретному спектру, порождают особенности в компонентах волновых функций  $\Psi_i$ , выделяя которые, получим следующее представление:

$$\Psi_0(\vec{k}, \vec{p}; \vec{p}^0, \vec{k}^0) = \delta(\vec{k} - \vec{k}^0)\delta(\vec{p} - \vec{p}^0) - \sum_{\alpha, \beta} A_{\alpha, \beta} \frac{(\vec{k}, \vec{p}; \vec{k}^0, \vec{p}^0; p^{02}/2n + k^{02}/2m - i0)}{[p^2/2n + k^2/2m + p^{02}/2n + k^{02}/2m + i0]},$$
(3)

$$\Psi_{i_{\alpha}}(\vec{k},\vec{p};\vec{p}_{\alpha}^{o}) = \varphi_{i_{\alpha}}(\vec{k}_{\alpha})\delta(\vec{p}_{\alpha}-\vec{p}_{\alpha}^{o}) - B_{i_{\alpha}}(\vec{k},\vec{p};\vec{p}_{\alpha}^{0})/[p^{2}/2n+k^{2}/2m+p_{\alpha}^{02}/2n_{\alpha}+\kappa_{i_{\alpha}}^{02}+i0], \quad (3')$$

$$B_{i_{\alpha}}(\vec{k}_{i},\vec{p}_{i};\vec{p}_{i}^{o}) = \sum Q_{\gamma\alpha}^{i_{\alpha}}(\vec{k},\vec{p};\vec{p}_{i_{\alpha}}^{0};\kappa_{i_{\alpha}}^{2}+p_{\alpha}^{02}/2n_{\alpha}-i0) +$$

$$+\sum_{i_{\alpha}}\varphi_{i}(\vec{k}_{\gamma}^{i_{\alpha}})R_{\gamma\alpha}^{i_{\alpha},i_{\gamma}}(\vec{p}_{\alpha}^{0},\vec{p}_{\gamma};-\kappa_{i_{\alpha}}^{2}+p_{\alpha}^{02}/2n_{\alpha}-i0)/[-p_{\alpha}^{02}/2n_{\alpha}-\kappa_{i_{\alpha}}^{2}+p_{\alpha}^{02}/2n_{\alpha}-\kappa_{i_{\gamma}}^{2}-i0)]$$

A, B, Q, R - гладкие функции своих переменных. Такое разделение особенностей естественно возникает само по себе при численном решении интегральных уравнений (1). Для однозначного определения этих функций можно поступить следующим образом: подставить  $\Psi_i$  в виде (3) (3') в уравнение (1) и приравнять коэффициенты при одинаковых особенностях. Таким образом, получим уравнения для функций через которые в явном виде выражаются все основные характеристики задачи трех тел: ВФ, элементы S – матрицы, амплитуды и сечения различных процессов, происходящих в системе трех тел [6,7]. В представленных выше обозначениях порядок индексов указывает направление процессов рассеяния, а смысл индексов следующий - "0 соответствует процессам, когда все три частицы свободны, " $i_{\alpha}$ "или " $i_{\beta}$ "соответствуют процессам, когда пара частиц " $\alpha$ "или " $\beta$ "образуют состояние с индексом " $i_{\alpha}$ "или " $i_{\beta}$ ".

В этом случае имеем:

$$\begin{split} S_{00}(\vec{k},\vec{p};\vec{k}',\vec{p}') &= \delta(\vec{k}-\vec{k}')\delta(\vec{p}-\vec{p}') - 2\pi i\delta(k^2/2m + p^2/2n - k'^2/2m - p'^2/2n) \times \\ &\times \sum_{\alpha,\beta} A_{\alpha,\beta}(\vec{k},\vec{p};\vec{k}',\vec{p}';k'^2/2m + p'^2/2n + i0), \\ S_{0i_{\alpha}}(\vec{k},\vec{p};\vec{p}'_{\alpha}) &= -2\pi i\delta(k^2/2m + p^2/2n + \kappa_{i_{\alpha}}^2 - p'^2/2n_{\alpha}) \times \\ &\times \sum_{\gamma} [Q_{\gamma,\alpha}^{i_{\alpha}}(\vec{k},\vec{p};\vec{p}'_{\alpha}; -\kappa_{i_{\alpha}}^2 + p_{\alpha}'^2/2n_{\alpha} - i0) + \\ &+ \sum_{i_{\gamma}} \varphi_{i_{\gamma}}(\vec{k}_{\gamma})R_{\gamma\alpha}^{i_{\alpha,i_{\gamma}}}(\vec{p};\vec{p}'_{\alpha}; -\kappa_{i_{\alpha}}^2 + p_{\alpha}'^2/2n_{\alpha} + i0)], \\ S_{i_{\alpha}0}(\vec{p}_{\alpha},\vec{k}';\vec{p}') &= -2\pi i\delta(-k'^2/2m + p'^2/2n - \kappa_{i_{\alpha}}^2 + p_{\alpha}^2/2n_{\alpha}) \times \\ &\times \sum_{\beta} [\widetilde{Q}_{\beta\alpha}^{i_{\alpha}}(\vec{p}_{\alpha};\vec{p};\vec{k}',\vec{p};k''2m + p'^2/2n + i0) + \\ &+ \sum_{i_{\beta}} \varphi_{i_{\beta}}(\vec{k}_{\beta})R_{\gamma\alpha}^{i_{\alpha,i_{\beta}}}(\vec{p};\vec{p}_{i_{\alpha}}; -\kappa_{i_{\alpha}}^2 + p_{\alpha}^2/2n_{\alpha} + i0)], \\ S_{i_{\alpha},i_{\beta}}(\vec{p}_{\alpha};\vec{p}_{\beta}) &= \delta_{\alpha\beta}\delta(\vec{p}_{\alpha} - \vec{p}_{\alpha}) - 2\pi i\delta(-\kappa_{i_{\alpha}}^2 + p_{\alpha}^2/2n_{\alpha} + \kappa_{i_{\beta}}^2 - p_{\beta}'^2/2n_{\beta}) \times \\ &\times R_{\alpha\beta}^{i_{\alpha}i_{\beta}}(\vec{p}_{\alpha};\vec{p}_{\beta}; -\kappa_{i_{\beta}}^2 + p_{\beta}'^2/2n_{\beta}), \end{split}$$

где  $W_{\alpha\beta} = A_{\alpha\beta} - T_{\alpha}\delta_{\alpha\beta}$  определяется как решения системы уравнений

$$W_{\alpha\beta}(Z) = W^0_{\alpha\beta}(Z) + T_{\alpha}G_0(Z)\sum_{\gamma\neq\alpha}W_{\alpha\beta}(Z),$$

которые естественным образом разбиваются на сумму слагаемых  $A_{\alpha\beta}, Q_{\alpha\beta}, \widetilde{Q}_{\alpha\beta}, R_{\alpha\beta}$ .

Необходимо отметить, что в явном виде потенциалы не участвуют в уравнениях (1), а в них содержится более общая характеристика Т-матрицы, которые связаны с потенциалами уравнениями (2). Поэтому, хотя в данном методе формально и используются потенциалы, по существу моделируются Т-матрицы, для построения которых и применяется метод Бейтмана [5–7], который в некоторых случаях позволяет получить и аналитическое решение [7].

Интегральные уравнения (1) обладают хорошими (с математической точки зрения) свойствами: фредгольмовость, однозначная разрешимость и т.д. только при определенных условиях на двухчастичные данные [6]:

1) парные потенциалы, в общем случае нелокальные,  $V_i(k, k')$  являются гладкими функциями k, k' и удовлетворяют условию

$$|V_i(k, k')| \le (1 - |k - k'|)^{1-\epsilon}, \quad \epsilon > 0;$$

2) точка Z=0 не является особой точкой для уравнений (1.3), т.е. все три длины рассеяния в парных каналах конечны;

 положительный двухчастичный спектр непрерывен. Это условие существенно для нелокальных потенциалов, так как только в этом случае могут появляться положительные собственные значения, и оно выполняется практически для всех реальных физических потенциалов.

Кулоновские потенциалы и потенциалы твердого кора не удовлетворяют первому условию, причем кулоновские потенциалы приводят к особенности в Т-матрицах типа  $| k - k' |^{-2}$ , а потенциалы жесткого кора к медленному убыванию Т-матрицы при больших импульсах. При нарушении второго условия теряется фредгольмовость уравнений (1) при Z = 0, что приводит к эффекту Ефимова [9], заключающемуся в том, что при критическом значении константы связи, когда длина рассеяния впервые обращается в бесконечность, в системе трех частиц при определенных условиях может возникнуть бесконечный дискретный спектр. Как указано в [9], наиболее благоприятный случай проявления этого эффекта со стороны соотношения масс, это случай двух тяжелых частиц и одной легкой, который реализуется в молекулярной физике - отрицательный молекулярный ион.

В случае кулоновских потенциалов необходима модификация этих уравнений, причем в этом случае наиболее удобной является дифференциальная формулировка [6,7]:

$$(-\Delta_{x_i} - \Delta_{y_i} + V_i(x_i) - E)\Psi_i = -V_i \sum_{j \neq i} \Psi_j, \qquad (4)$$

где

$$V_{i} = n_{i}/x_{i} + V_{st}(x_{i}), \quad n_{i} = \frac{q_{k}q_{j}}{\sqrt{(2m_{kj})}},$$
  
$$\vec{x}_{i} = \sqrt{\left(\frac{2m_{j}m_{k}}{m_{j} + m_{k}}\right)}(\vec{r}_{j} - \vec{r}_{k}), \quad \vec{y}_{i} = \sqrt{\left(\frac{2m_{i}(m_{j} + m_{k})}{m_{i} + m_{j} + m_{k}}\right)}\vec{r}_{i} - \frac{m_{j}\vec{r}_{j} + m_{k}\vec{r}_{k}}{m_{j} + m_{k}},$$
  
$$\vec{x}_{i} = c_{ij}\vec{x}_{j} + s_{ij}\vec{y}_{j}, \qquad \vec{y}_{i} = -s_{ij}\vec{x}_{j} + c_{ij}\vec{y}_{j},$$
  
$$s_{ij}^{2} = \frac{m_{k}\sum_{k}m_{k}}{(m_{i} + m_{j})(m_{j} + m_{k})}, \qquad s_{ij}^{2} + c_{ij}^{2} = 1$$

 $V_{st}(x_i)$  - парные короткодействующие потенциалы взаимодействия. Связь между импульсным и координатным представлениями определяется фурье-преобразованием:

$$\Psi(\vec{k}_i, \vec{p}_i) = (2\pi)^{-3} \int \exp{-i(\vec{k}_i \vec{x}_i + \vec{p}_i \vec{y}_i)} \Psi(\vec{x}_i, \vec{y}_i) d\vec{x}_i d\vec{y}_i$$

Для однозначного решения этих уравнений необходимо добавить граничные условия, который имеют следующий вид [6,7]:

$$\begin{split} \Psi_{i}(\vec{x}_{i},\vec{y}_{i})_{x_{i},y_{i}\to0} &\to 0, \\ \Psi_{i}(\vec{x}_{i},\vec{y}_{i})_{\rho=\sqrt{x^{2}+y^{2}}\to\infty} \to \phi_{i}(x_{i})\exp(i\vec{k}_{i}\vec{y}_{i}-iw_{i}^{0}) + \\ &+ \sum_{j}A_{ij}(\hat{y}_{j},\hat{k}_{i})\phi_{i}(x_{j})\frac{\exp(i\sqrt{E}_{j}|\vec{y}_{j}|+iw_{ij})}{|y_{j}|} + A_{0i}(\hat{X},\hat{k}_{i})\frac{\exp(i\sqrt{E}|X|+iw_{0})}{|X|^{5/2}}, \end{split}$$

где

$$w_{i}^{0} = \frac{n_{i}}{2|\vec{k}_{i}|} \ln[|\hat{k}_{i}|| - (\vec{k}_{i}, \vec{x}_{i})], \quad w_{ij} = \sum_{k \neq j} \frac{n_{k}}{2|s_{jk}\sqrt{E_{k}}} \ln 2\sqrt{E_{k}}|\vec{y}_{k}|,$$
$$w_{0} = -\frac{|\vec{X}|}{2\sqrt{E}} \sum_{i} \frac{n_{i}}{|\vec{x}_{i}|} \ln 2\sqrt{E}|\vec{X}|, \quad n_{i} = \frac{kq_{i}q_{j}}{\sqrt{(2m_{ij})}}, \quad E_{k} = E - \kappa_{j},$$

Уравнения Фаддеева (1–6) являются точными уравнениями для описания динамики трех попарно взаимодействующих бесструктурных частиц, причем предположение о парном взаимодействии между частицами трехчастичной системы является естественным, так как все характеристики процессов в такой системе, в первую очередь, будут определяться парным взаимодействием. Это полностью подтверждается экспериментальными результатами в прямых реакциях ядерной и атомной физики, где столкновения близкие и парные потенциалы определяют всю динамику реакции [5–9].

В качестве парных потенциалов взаимодействия электронов с атомами молекулы в конкретный расчетах реальных процессов применялись потенциалы нулевого радиуса (ПНР) [5] и потенциалы вида

$$V(r) = \lambda \exp(-\beta r)/r,$$

параметры которых определялись на основе энергии связи электрона в отрицательном ионе, длин рассеяния и эффективного радиуса, причем учет спина (в случае гомоядерных молекул) осуществлялся следующим образом. В качестве длины рассеяния использовалась величина [4,5,7,10-12]

$$\frac{1}{a} = \frac{1}{a_1} = \frac{1}{a_2} = \frac{1}{4} \left( \frac{3}{a_t} + \frac{1}{a_s} \right),$$

где  $a_t$  и  $a_s$  – триплетная и синглетная длины рассеяния соответственно.

Парные потенциалы взаимодействия между атомами в молекулах моделировались потенциалами Морзе

$$V(r) = D\left(1 - \exp\left(-\alpha(r - r_0)\right)\right),$$

параметры которых определялись на основе спектроскопических данных [2,4,5,10–12].

Здесь следует заметить особо, что применение метода классических траекторий к расчету столкновения атома с двухатомной молекулой на основе ППЭ в общем случае не применимо, т.е. ППЭ могут возникнуть лишь в случае, когда химическая реакция происходит с образованием промежуточного комплекса. Метод же квантовой задачи рассеяния применим к любым химическим реакциям, для которых выполняются условия, перечисленные выше.

В случае молекулярных реакций частицы, участвующие в реакции, являются сложными комплексами (атомы с электронной оболочкой), и поэтому их внутренняя структура может играть существенную роль. В этом случае для описания процессов рассеяния в системах нескольких частиц с нетривиальной внутренней структурой применяются различные методы - метод проекционных операторов Фешбаха, метод R-матрицы и т.д. [3-9] причем все они сводились к построению феноменологических моделей для описания эффективных взаимодействий, которые позволяют рассматривать частицы со сложной внутренней структурой.

# Результаты расчетов

В настоящее время исследование различных процессов столкновений электронов с молекулами необходимы для практических исследований активных сред газоразрядных и химических лазеров, спектров полярных сияний и свечения ночного неба в полярной ионосфере, различных плазмохимических установок и т.д.[1-4].

Поэтому особую важность приобретает разработка и применение универсальных методов и соответствующих программных средств для моделирование сечений этих процессов, основой которых является квантовая теория рассеяния в системе нескольких частиц [6,7], причем именно в этом случае с единых методологических позиций исследуются существенно различные процессы, происходящие в системах нескольких частиц.

Результаты исследования сечений процессов, происходящих при столкновении электронов с двухатомными молекулами

$$e + AB(v_1, J_1) \to \begin{cases} e + AB(v_1, J_1) & -\text{процессы упругого рассеяния,} \\ e + AB(v_2, J_2) & -\text{ колебательно вращательное возбуждение,} \\ A^-(eA) + B & -\text{диссоциативное прилипание (ДП)} \\ A + B^-(eB) & \text{электрона к молекуле,} \\ e + A + B & -\text{диссоциация молекулы} \end{cases}$$

находящимися как в основном, так и в возбужденных колебательно-вращательных состояниях, выполненных на основе квантовой теории рассеяния в системах нескольких частиц как в интегральной, так и в дифференциальной формах, представлены на рис. 1–7, а также в [7,8] вместе с экспериментальными данными и расчетами других авторов [2,4,12].



Fig. 1. Зависимость сечения реакции диссоциативного прилипания электронов к молекулам водорода от энергии: 000 - экспериментальные данные [12], ---, ...., -.-. - результаты расчетов (2–5,12–14) в различных приближениях, ---- результаты расчетов настоящей работы.





Fig. 2. Зависимость сечения реакции диссоциативного прилипания электронов к молекулам водорода. и их изотопозамещенным аналогами от энергии:  $\circ \circ \circ -$  экспериментальные данные [12], —— – результаты расчетов настоящей работы.

Fig. 3. Диссоциация молекул водорода, первоначально находящимся в возбужденных колебательных состояниях: — — — — результаты расчетов в ПНР [3–5], — — — результаты расчетов настоящей работы.

В качестве конкретных двухатомных молекул были исследованы молекулы  $H_2^+$ ,  $H_2$ , HD,  $D_2$ ,  $F_2$ ,  $Cl_2$ ,  $Br_2$ ,  $I_2$ , HF, DF, HCl, DCl, HBr, DBr, HI, DI, RbCl, RbBr, CsCl, CsBr, KI,  $Li_2$ .

В этих расчетах основное приближение состоит в том, что взаимодействие налетающего электрона с электронами и ядрами молекулы-мишени заменяется взаимодействием налетающего электрона с каждым из атомов в целом, считая атом силовым центром. Таким образом, сложная многочастичная задача по расчетам сечений рассеяния электрона двухатомными молекулами сводится к задаче столкновения в системе трех тел, для решения которой и применяется метод квантовой задачи рассеяния в системе нескольких тел. Данное приближение представляется разумным при энергиях налетающего электрона меньших, чем энергия электронного возбуждения молекулы.



Fig. 4. Диссоциативное прилипание электрона к молекулам галогенов:  $\circ \circ \circ -$  экспериментальные данные [12], — – результаты расчетов настоящей работы.



Fig. 5. Рассеяние электронов молекулами галогеноводородов: 000 – экспериментальные данные [12], — – результаты расчетов настоящей работы.

В качестве исходных данных в подобной постановке задачи используются парные потенциалы взаимодействия, массы и энергии сталкивающихся частиц.

На рис. 1,2 представлены результаты расчетов реакции ДП электрона к двухатомным молекулам водорода - простейшей химической реакции, вызываемой электронами, вместе с экспериментальными данными и многочисленными расчетами, выпол-



Fig. 6. Сечения упругого рассеяния электронов молекулами *RbBr*, *RbCl*:  $\circ \circ \circ -$  экспериментальные данные [12], — – результаты расчетов настоящей работы.



Fig. 7. Сечения упругого рассеяния электронов молекулами  $CsBr, CsCl, KJ: \circ \circ \circ -$ экспериментальные данные [12], — - результаты расчетов настоящей работы.

ненными в различных приближениях [5–14]. В приближении задачи трех тел проявляется как изотопический эффект, впервые предсказанный Ю.Н.Демковым [5,14] - рис. 1., так и эффект Ефимова [9], который проявляется в не монотонной зависимости сечения от энергии в окрестности порога развала на три свободные частицы, что представлено в увеличенном масштабе на рис. 2.

На рис. 3 представлены результаты расчетов диссоциации молекул водорода и дейтерия, первоначально находящихся в возбужденных колебательных состояниях, на рис. 4 представлены зависимости сечений ДП электрона к молекулам галогенов, на рис. 5 представлены сечения процессов, происходящих при столкновениях электронов с молекулами галогеноводородов, а на рис. 6,7 сечения упругого рассеяния электронов молекулами *RbBr*, *RbCl*, *CsBr*, *CsCl*, *KJ*.

Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными [2,4,12–14] показывает, что моделирование взаимодействия электрона с каждым из атомов молекулы при помощи как локальных, так и нелокальных потенциалов, приведенных выше в рамках многократного рассеяния позволяет получить удовлетворительное согласие с экспериментом (совпадение порядков сечений, включая изотопические эффекты и пороговые особенности).

Применение квантовой теории рассеяния в системе трех частиц для расчетов столкновений электронов с молекулами галогеноводородов в описанном выше приближении показывает значительное расхождение между результатами расчетов и экспериментальными данными по сечениям перестройки диссоциативного прилипания (в 4–5 раз). Это свидетельствует о том, что расчет процессов ДП электронов к молекулам галогеноводородов в этом приближении является достаточно грубым, так как использованные потенциалы эффективно учитывают взаимодействие только в *s* и *p* состояниях. В случае молекул галогеноводородов, которые являются дипольными молекулами, дальнодействующее взаимодействие существенно влияет на величину сечений [2,4,12].



Fig. 8. Зависимость от главного квантового числа сечений столкновений высоковозбужденных рибберговских атомов натрия и рубидия с атомами гелия, аргона и ксенона: 000 - экспериментальные данные [12], — – результаты расчетов настоящей работы, - - - – результаты расчетов в импульсном приближении [2–5], -.-.- – результаты расчетов в модифицированном импульсном приближении [2–5].

Для учета дальнодействующего взаимодействия использовалась модель, в которой молекула галогеноводорода приближенно рассматривалась как система, состоящая из протона (p), электрона (e) и атома галогена (X), вследствие большой энергии электронного сродства атома электрона к атому галогена ( $\sim 4$  эВ), в противоположность атому водорода (0,75 эВ). Таким образом, для расчетов сечений рассеяния электронов этими молекулами можно использовать квантовую теорию рассеяния в системе четырех частиц

В этом же приближении проведены расчеты столкновений между атомами *He*, *Ne*, *Ar*, *Xe* и высоковозбужденными ридберговскими атомами *Na* и *Rb* которые в данных расчетах представлялись как положительный ион и слабосвязанный электрон на высокой орбите - рис. 8.

Данные процессы представляют собой как практический (ридберговские состояния наблюдались в спектрах ряда астрофизических объектов, таких, как солнечные протуберанцы, планетарные туманности и т. п.), так и теоретический интерес, который связан с тем, что высоковозбужденные атомы, являясь квантовыми объектами, обладают рядом классических свойств [2–5, 7–14].

Результаты исследований перезарядки протонов на атомах гелия выполнены на основе квантовой теории рассеяния в системе четырех частиц (два протона и два электрона). В этом случае применялись аналитические решения системы уравнений (1), полученные в приближении [7].

Результаты расчетов сечений реакции



$$Na + J \rightarrow Na^+ + J^-$$

Fig. 9. Сечения реакции  $Na + J \rightarrow Na^+ + J^-$ :  $\circ \circ \circ -$  результаты расчетов настоящей работы, — – результаты расчетов на основе классической механики [2,4,5,10–12], штриховая линия – результаты расчетов в приближении сильной связи [2,4,5,10–12], штрих пунктирная линия – результаты расчетов в квазиклассическом приближении [2,4,5,10–12].

выполнены на основе квантовой теории рассеяния в системе трех частиц  $Na^+$ , *e* и *J* представлены на рис. 9. В этом случае применялись дифференциальные уравнения с соответствующими граничными условиями.

На основе предлагаемого метода в приближении эйконала [6,7] проведены расчеты сечений ионизации атомов водорода протонами (рис. 10).

Моделирование сечений столкновения протонов с отрицательными ионами водорода - реакция нейтрализации

$$H^{+} + H^{-} \rightarrow H + H,$$
  
$$Li^{+} + H^{-} \rightarrow Li + H$$
  
$$Li^{+} + D^{-} \rightarrow Li + D$$

а также процессов, обратных реакции нейтрализации

$$H + H \rightarrow H^+ + H^-$$

выполнены на основе квантовой теории рассеяния в системе четырех заряженных частиц и представлены на рис. 11–13.

В этом же приближении произведены расчеты реакции диссоциативной рекомбинации  $e + He_2^+ \to H + H$  – рис. 14.

Рассмотрим применение квантовой теории рассеяния в системе нескольких частиц для расчетов молекулярных реакций типа



Fig. 10 Сечения ионизации атомов водорода протонами: • • • – экспериментальные данные [12], — – результаты расчетов настоящей работы, ⊔ ⊔ ⊔ ◊ ◊◊ – расчеты проведенные на основе классической механики [2–4].



Fig. 11. Сечения реакции нейтрализации  $H^+ + H^- \rightarrow H + H: \circ \circ \circ -$ экспериментальные данные [2,12,13], — – результаты расчетов настоящей работы, -.-.- – расчеты работ [2-5].



Fig. 12. Сечения реакции нейтрализации  $Li^+ + H^- \rightarrow Li + H: \circ \circ \circ -$  экспериментальные данные [2,12,13], — – результаты расчетов настоящей работы, -.-.- – расчеты работ [2-5].



Fig. 13. Сечения реакции, обратной реакции нейтрализации  $H + H \rightarrow H^+ + H^-: \circ \circ \circ$  – экспериментальные данные [12], — – результаты расчетов настоящей работы.



Fig. 14 Сечения реакции диссоциативной рекомбинации:  $\circ \circ \circ -$  экспериментальные данные [12], — – результаты расчетов настоящей работы, -.-.- – расчеты проведенные на основе классической механики [2–5].

$$A + BC(v_1, J_1) \to \begin{cases} A + BC(v_1, J_1) & -\text{процессы упругого рассеяния,} \\ A + AB(v_2, J_2) & -\text{колебательно вращательное возбуждение,} \\ B + AC(v_3, J_3) & -\text{реакции перестройки молекулы с} \\ C + AB(v_4, J_4) & \text{колебательно-вращательным возбуждением,} \\ A + B + C & -\text{процессы диссоциация молекулы} \end{cases}$$

на примерах конкретных расчетов следующих молекулярных систем таких как

$$CsBr + R \rightarrow Cs^+ + Br^- + R,$$

где R = Xe, Hg, которые и представлены на рис. 15,16. Отметим, что все расчеты проводились в приближении, в котором ион атома галогена рассматривался как система состоящая из двух частиц - атома галогена и электрона, в связи с тем, что атом галогена имеет достаточно большое сродство к электрону. Таким образом расчеты данной реакции сводились к решению задачи в системе четырех тел – электрон, атом галогена, атом Cs и атом R.

Моделирование колебательного возбуждения продуктов в реакции

$$O(^{3}P) + CS(X^{1}\Sigma^{+}) \rightarrow CO(X^{1}\Sigma^{+}, v = n) + S(^{3}P)$$



Fig. 15. Сечения реакции  $CsBr + Xe \rightarrow Cs^+ + Br^- + Xe: \bullet \bullet \bullet -$  экспериментальные данные [10], -.-.-. – результаты расчетов настоящей работы, — – расчеты проведенные на основе классической механики [10].



Fig. 16. Сечения реакции  $CsBr + Hg \rightarrow Cs^+ + Br^- + Hg$ : ••• – экспериментальные данные [10], — – результаты расчетов настоящей работы, -.-.- – расчеты проведенные на основе классической механики [10].

Отметим основные особенности этой реакции: реакция происходит без образования промежуточного комплекса и основная доля поступательной энергии переходит в колебательную энергию молекулы *CO*, причем приближенная оценка этого состояния, полученная на основе модели столкновения в системе трех твердых шаров [10], дает следующую величину

$$E_v/E_t \sim 8/9.$$

Поэтому основные характеристики этой реакции определяются динамикой столкновения, которая достаточно последовательно описывается приближением квантовой задачи трех тел на основе уравнений (1); применение же классических, квазиклассических и приближенных квантовомеханических методов расчета затруднено в связи с отмеченными выше недостатками этих приближений. Результаты расчета этой реакции вместе с экспериментальными данными [2–8] представлены на рис. 17.

В качестве подтверждения универсальности описанного метода для расчета сечений химических реакций с участием трех атомов, первоначально находящихся в свободном состоянии

$$A + B + C \rightarrow \begin{cases} A + BC(v_1, J_1) & -\text{процессы образования связанных пар,} \\ A + AB(v_2, J_2) & -\text{находящихся в основных и} \\ B + AC(v_3, J_3) & -\text{возбужденных} \\ C + AB(v_4, J_4) & \text{колебательно-вращательных состояниях,} \\ A + B + C & -\text{процессы диссоциация молекулы} \end{cases}$$



Fig. 17. Обмен колебательной энергией при столкновении между молекулами HCl (рисунок справа):  $\circ \circ \circ -$  экспериментальные данные [12], — – результаты расчетов настоящей работы. Расчеты сечения реакции  $O + CF_3J \rightarrow JO + CF_3$  (рисунок слева):  $\circ \circ \circ -$  экспериментальные данные [12], — – результаты расчетов настоящей работы.

на рис. 18–19 приведены результаты расчета колебательного возбуждения продуктов в реакции

$$H + H + H \to H_2(v = n) + H,$$

а также константы скорости реакции

$$He + He + He \rightarrow He_2(v = n) + He$$

Результаты расчетов колебательно-вращательного возбуждения продуктов в реакции

$$S({}^{3}P) + O_{2}({}^{3}\Sigma_{g}, v = v_{0}, J = J_{0}) \to SO({}^{3}\Sigma, v = v_{n}, J = J_{n}) + O({}^{3}P)$$

вместе с результатами классического расчета и экспериментальными данными [10,12] представлены в [7], а также результаты расчетов сечений следующих процессов:

$$H + H_2(v = 1) \to H_2(v = 0, 1) + H,$$
  

$$O({}^{3}P) + N_2(X^{1}\Sigma_g^+) \to NO({}^{2}\Pi) + N({}^{4}S),$$
  

$$O({}^{3}P) + O_2({}^{3}\Sigma_g^-) \to O_2({}^{3}\Sigma_g^-) + O({}^{3}P)$$

показывают хорошее совпадение с экспериментальными данными в среднем, квазиклассическими расчетами и расчетами методом сильной связи.

Необходимо отметить, что приведенные модели позволяют качественно оценить данные эксперимента и не претендуют на точное воспроизведение эксперименталь-



Fig. 18. Зависимость константы скорости реакции  $O({}^{3}P)+CS(X^{1}\Sigma^{+}) \rightarrow CO(X^{1}\Sigma^{+}, v = n) + S({}^{3}P)$  от колебательного квантового числа v (левый рисунок): ооо – результаты расчетов работы [10], +++ – результаты расчетов настоящей работы. Зависимость константы скорости реакции  $H + H + H \rightarrow H_{2}(v = n) + H$  от колебательного квантового числа v (правый рисунок) ++++ – результаты расчетов настоящей работы.



Fig. 19. Зависимость константы скорости реакции  $He + He + He \rightarrow He_2 + H$  от энергии — – экспериментальные данные [10], – – – – расчеты работы [10], – – – результаты расчетов настоящей работы.

ных данных. Именно в этом и состоит основное достоинство подобных расчетов, которые при наличии достаточно грубых приближений (приближение задачи нескольких тел, применение парных потенциалов типа Морзе и т. п.) позволяют качественно воспроизвести экспериментальные данные, о чем свидетельствуют расчеты, представленные на рис. 5–10.

Основное приближение в этих расчетах состоит в том, что взаимодействие налетающего атома (состоящего из электронов и ядер) с электронами и ядрами молекулы мишени заменяется взаимодействием с каждым из атомов, в целом считая атом силовым центром. Необходимо также отметить, что в предлагаемом методе исходными данными являются парные потенциалы взаимодействия энергии и массы сталкивающихся частиц, а не поверхности потенциальной энергии (ППЭ), которые необходимы при проведении расчетов сечений химических реакций классическими, полуклассическими и квазиклассическими методами, причем именно достаточно точный расчет ППЭ является основной трудностью перечисленных выше методов [2,4,10]. В рассматриваемом методе ППЭ может быть получена непосредственно в процессе решения системы уравнений, как это показано в [4–7].

Следует отметить, что с ростом числа частиц сложность решения системы уравнений значительно возрастает. Кроме этого в этих расчетах необходимо учитывать внутреннюю структуру сталкивающихся частиц, что осуществляется на основе редукции исходных уравнений (1,2) к системе динамических уравнений с эффективным межкластерным взаимодействием, в общем случае нелокальным.

Данный способ эффективен, когда число частиц, составляющих сталкивающиеся кластеры, невелико. Поэтому для исследования реальных физических систем необходимо рассматривать различные приближения, например модели взаимодействия составных частиц.

В качестве применения кластерного приближения в рамках квантовой теорией рассеяния и системе трех частиц проведены расчеты сечения реакции (Puc.17)

$$O + CF_3J \rightarrow JO + CF_3$$

В этом приближении эффективное взаимодействие между кластерами O, CF<sub>3</sub>, J моделировалось потенциалами Морзе, параметры которых определялись на основе согласования между расчетами и какой-либо одной точкой сечения, полученной в эксперименте.

Расчеты молекулярных реакций, происходящих при столкновении двухатомных молекул между собой

$$AB(v_1, J_1) + CD(v_2, J_2) \rightarrow$$
  
 $\rightarrow \begin{cases} AB(v_1, J_1) + CD(v_2, J_2) & - \text{процессы упругого рассеяния,} \\ AB(v_3, J_3) + CD(v_4, J_4) & - \text{колебательно вращательное возбуждение,} \\ AC(v_5, J_5) + BD(v_6, J_6) & - \text{реакции перестройки молекулы с} \\ CB(v_7, J_7) + AD(v_8, J_8) & \text{колебательно-вращательным возбуждением} \end{cases}$ 

произведены на основе квантовой теории рассеяния в системе четырех частиц в полюсном приближении. В этом же приближении на рис.21 представлены результаты моделирования следующих химических реакций:

$$HCl(v=n) + HCl(v=0) \rightarrow HCl(v=n-1) + HCl(v=1)$$



Fig. 19. Зависимость константы скорости реакции  $He + He + He \rightarrow He_2 + H$  от энергии — – экспериментальные данные [10], - - - – расчеты работы [10], -.-.- – результаты расчетов настоящей работы.

В качестве демонстрации универсальности предлагаемого метода на рис.20 представлены результаты расчетов простейших ядерных процессов, происходящих при низко-энергетическом рассеянии нейтрона и протона на дейтоне.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проекты – 98-002-17266 и 01-02-16075, Академии Наук Тайваня, проект – NCS-85-2112-М-007-009, и Академии Наук Китая, проект – NSF 19734030.

#### Литература

- Басов Н.Г., Гавриков В.Ф., Позднеев С.А., Щеглов В.А. О новом типе химических лазеров на электронных переходах с цепным механизмом возбуждения // Квантовая электроника, 1987, 14, N 9, с. 1772-1786. Басов Н.Г., Гавриков В.Ф., Позднеев С.А., Щеглов В.А. О возможном расширении спектрального диапазона излучения химических лазеров на электронных переходах. // Квантовая электрононика, 1987, 14, N 9, с.1787-1806. Zuev V.S. and Mikheev L.D. Photochemical Lasers // Harwood Academic Publishers, 1991, 120 p.
- 2. Christophorou L.G. Electron molecule interaction and their application // N.Y., Acad.Press, 1984, 681 p.
- 3. Андрианов А.С. и др. Квантовая наноплазмоника// Долгопрудный, Интеллект, 2015, 368 с.
- 4. Смирнов Б.М. Физика слабоионизированного газа // М.: Наука, 1972, 416 с.

- 5. Демков Ю.Н., Островский В.Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике // Л. Изд-во ЛГУ, 1975, 240 с.
- Меркурьев С.П., Фаддеев Л.Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц // М., Наука, 1985, 398 с. Веселова А.М., Меркурьев С.П., Фаддеев Л.Д. Дифракционное взаимодействие адронов с ядрами // Киев, Наукова Думка, 1987, 107 с.
- Позднеев С.А. Применение квантовой теории рассеяния для расчетов различных процессов ядерной, атомной и молекулярной физики // М.:, Янус-К, 2001, 412 с.; Позднеев С.А. Столкновения электронов с молекулами, находящимися в возбужденных колебательно вращательных состояниях // ЖЭТФ, 2000, 117, №, с. 35-50; Позднеев С.А. Резонансы в рассеянии электронов молекулами // ЖЭТФ, 2004, 126, №5, с.1051-1072; Pozdneev S. The Efimov in neutron deuteron scattering near deuteron breakup threshold // Phys.Lett., 1983, B125, N7, p.355-358.
- Позднеев С.А. Пакет прикладных программ для решения систем интегральных и интегро-диффференциальных уравнений квантовой задачи трех тел // Пакеты прикладных программ: Функциональное наполнение. М., Наука, 1986, с. 48-62.
- 9. *Ефимов В.* Низкоэнергетические свойства трех резонансно взаимодействующих частиц // Л.: Ин.Ядерной физики, 1978, препринт ЛИЯФ №436 24 с.
- 10. Никитин Е.Е. Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах // М.: Химия, 1970, 559 с.
- 11. Huber K.P., Gerzberg G. Constants of Diatomic Molecules // New Jersey, Academic Press, 1979, 727 p.
- 12. Schultz G.J. Resonances in electron impact on diatomic molecules // Rev.Mod.Phys., 1973, 45, N 3, p.423-486.
- Казанский А.К., Фабрикант И.И. // УФН, 143, 602, 1984; Fabricant I.I., Hotop H.// Phys.Rev., 2001, A63, p.022706
- 14. Demkov Yu.N. // Phys.Lett., 1965, 15, 235-238.

# CALCULATIONS OF RESONANCES IN NUCLEAR, ATOMIC AND MOLECULAR PHYSICS ON THE BASIS OF THE QUANTUM THEORY OF SCATTERING

# S.A. Pozdneev

P.N.Lebedev Physical Institute, RAS Department of quantum Radiophysics Laboratory of Photochemical processes

pozdneev@sci:lebedev:ru

Received 10.03.2016

The quantum theory of few-body scattering based on the Faddeev–Yakubovsky equations is used to calculate the main characteristics of resonances processes in laser, atomic, molecular and nuclear physics such as: the electron and atom scattering with the diatomic initial rovibrational exiting molecules, simulation of bounded and scattering states for nuclear physics. The results of this calculations are compared with available experimental data and other calculations. Elementary processes in gas and plasma, quantum theory of few-body scattering, resonances, Faddeev equations.

# Информация и правила для авторов

#### Общие положения

Журнал «Наноструктуры. Математическая физика и моделирование» (сокращенно: НМФМ) публикуется с 2009 года и является периодическим научным изданием. Электронная версия журнала размещается на сайте http://www.nano-journal.ru. Основная цель издания: представление новых теоретических и вычислительных методов моделирования наноструктур и мягкой материи, общих подходов в исследовании мезосистем, а также ключевых экспериментальных результатов в данной области и связанных с этим проблем математической физики.

Журнал НМФМ имеет междисциплинарный характер и в силу этого несет определенную образовательную направленность, а не только узко научную. Работы, представляемые в журнал, должны содержать вводные сведения, которые обеспечат понимание постановок задач и восприятие результатов не только прямыми специалистами. Определения понятий, объяснение обозначений и терминов, оценки характерных параметров, теоретические предпосылки и идеи, используемые методы, и т.п., должны быть кратко объяснены в тексте статьи, имея в виду читателей, специализирующихся в иных направлениях. Должны быть описаны базовые математические модели и уравнения. Во Введении и в последующих разделах очерчивается стратегия и основные трудности, это увязывается с используемыми моделями. Структура статьи ориентируется на прояснение общей логики и методики исследования, содержит резюмирующие выводы. В тексте должны быть рассмотрены характерные примеры (хотя бы, методические), ясно илюстрирующие предлагаемые алгоритмы.

Журнал публикует научные обзоры, исследовательские статьи и краткие научные сообщения, а также избранные аналитические и информационно-образовательные материалы, тексты докладов и циклов лекций, прочитанных в университетах, научных центрах, на школах-семинарах, конференциях, нигде ранее не публиковавшиеся и не принятые к публикации в других изданиях. Язык публикации в журнале НМФМ, как правило, русский. Работы, представляемые в журнал, не могут иметь научно-популярный или компилятивный характер. Все статьи рецензируются и могут быть отклонены редколлегией журнала. В случае принятия работы к печати ее авторы передают издателю журнала НМФМ право на разовую безвозмездную публикацию текста и его размещение в электронной версии на сайте журнала. Перевод опубликованных в журнале статей на другие языки может осуществляться только с разрешения и при участии авторов.

# Порядок представления статей

- В редакцию изначально представляются:
  - файл статьи, файлы с иллюстрациями;
  - о сопроводительное письмо, можно в электронной форме, содержащее сведения об объеме статьи и обо всех авторах (фамилии, имена, отчества, полные названия мест работы, почтовый адрес с индексом, номер контактного телефона с кодом города, электронный адрес автора, ответственного за переписку с редакцией); предпочтительно, чтобы это письмо было выполнено на бланке учреждения, в котором работает кто-то из авторов, было заверенное печатью и содержало утверждение о возможности открытого опубликования статьи;
  - файл с переводом на английский язык названия статьи, фамилий и инициалов авторов, аннотации, ключевых слов.
- Авторские файлы могут быть присланы на электронный адрес: <u>papers@nano-journal.ru;</u> (резервный адрес в случаях затруднений с пересылкой: <u>nano@miem.edu.ru</u>) или переданы в редакцию на любом электронном носителе. Авторы получают из редакции подтверждение о получении их материалов.
- Телефон (факс) редакции: +7 (495) 916-8876. Адрес редакции: Москва 109028,
   Б. Трехсвятительский пер., 3/12, Московский институт электроники и математики (МИЭМ), комн. 449.

# Общие требования к представляемым файлам

- Допускается использование текстовых редакторов WORD и LATEX.
   К рабочим файлам должна быть приложена их pdf-копия. В названии файлов используется латинский алфавит, пробелы заменяются знаком \_. Шапка статьи содержит название, инициалы и фамилии авторов, место работы, электронный адрес, краткую аннотацию, ключевые слова. В аннотации не следует использовать формулы и ссылки на текст работы или список литературы; в конце она должна содержать индекс УДК (к английской версии аннотации можно добавить индексы зарубежных рубрикаторов).
- Объем кратких сообщений 4-8 страниц, исследовательских статей, как правило, до 20 страниц, а обзоров более 20 страниц. Верхняя граница согласуется с редколлегией. При подсчете объема нужно ориентироваться на страницы формата A4, шрифт 12, знаков в строке 80, интервалов между строками 1.
- Авторы не должны злоупотреблять сокращениями, составленными из заглавных начальных букв терминов. Предпочтительней каждый раз использовать полное наименование объекта. Возможно использование только устоявшихся аббревиатур.

# Требования к файлам Word

- Рекомендуемый шрифт Times New Roman.
- Строки в пределах абзаца не должны разделяться символом возврата каретки (Enter).
- Нельзя использовать автоматическое создание сносок, автоматический перенос или автоматический запрет переносов, создание списков, автоматический отступ и т.п.
- Ссылки на список литературы даются цифрами в квадратных скобках: [1], [5,6,7], [1-9].
- Все без исключения формулы и обозначения размерности, даже состоящие из одной латинской буквы, и в тексте и вынесенные в отдельную строку, всегда набираются в формульном редакторе и никогда в обычном текстовом редакторе.

• При создании таблицы рекомендуется использовать возможности Word или MS Excel. Таблицы, набранные вручную (с помощью большого числа пробелов), не принимаются.

### Требования к иллюстрациям

- Иллюстрации представляются в отдельных файлах, черно-белыми. Они должны иметь разрешение не менее 600 dpi.
- Форматы файлов TIFF, EPS, PSD, JPEG.

# Требования к списку литературы

- Ф.И.О. авторов или редактров выделяются курсивом.
- Для статей приводится название. Названия отделяются от выходных данных знаком //. Расположение выходных данных указано на образце ниже. Номер тома выделяется жирным шрифтом, номер выпуска дается в скобках. Указываются номера первой и последней страниц статьи, либо уникальный номер статьи и ее объем. Для книг желательно указывать их объем. Если известна ссылка на электронный архив или сайт, то ее желательно указать.

*Фамилия И.О.* Название статьи // Назв. журн., 2000, **1** (1), 1-6.

Family F.M. and Family F. Title of the paper // Name of the Jornal, 2006, 73, 165313, 9 pp.

Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название книги // Наука, С.-П., 1999, 176 стр.

*Family F.M.* Title of the paper // In book: Family F.M. (et al. eds), Title of the collection, Publisher, Boston, 2005, 9-24.

Family F.M. (ed.), Title of the collection // Publisher, N.Y., 2005, 324 pp.

*Фамилия И.О.* Название доклада // Доклад на конференции «Название конференции (место и дата проведения)»; ссылка на электронный ресурс.

# Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

#### Журнал зарегистрирован

в Министерстве РФ по делам печати, телерадиовещания и средств массовых коммуникаций. Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-34934 от 29 декабря 2008 г.

#### Учредители

Московский институт электроники и математики (МИЭМ), Европейский центр по качеству

#### Издатель

Европейский центр по качеству

# ПОДПИСКА НА ЖУРНАЛ НМФМ

На второе полугодие 2017 г. подписаться на журнал можно в любом отделении связи по каталогу Агентства Роспечать «Журналы России», рубрика «Физико-математические науки», подписной индекс 70017. Редакция предлагает подписчикам возможность безвозмездно получить подборку прошлых выпусков журнала. Пришлите на электронный адрес nanostructures@hse.ru (или на почтовый адрес: 123458, Москва, ул. Таллинская, д. 34, каб. 429, редакция журнала НМФМ) копию подписной квитанции, а также адрес для отсылки выпусков.