

АКТУАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ СОВРЕМЕННОГО ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ

Выпуск посвящен 150-летию со дня рождения Анри Пуанкаре

Учредитель

*Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования
"Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова
360004 Нальчик, ул. Чернышевского 173*

*Журнал зарегистрирован
в Министерстве РФ по делам печати, телерадиовещания
и средств массовых коммуникаций в 2003 г.
(свидетельство ПИ №77-16938 от 28 ноября 2003 г.)*

Редакционная коллегия

Главный редактор: Хапачев Ю.П. – доктор физ.-мат. наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик

Зам. главного редактора: Дышеков А.А. – доктор физ.-мат. наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик

- Абрамов А.М. – чл.-корр. Российской академии образования, Московский институт развития образования, г. Москва
- Аристов В.В. – чл.-корр. РАН, Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов, г. Москва
- Бахмин В.И. – исполнительный директор Института Открытое общество, г. Москва
- Григорьев М.С. – доктор химических наук, Институт физической химии РАН, г. Москва
- Ивахненко Е.Н. – доктор философских наук, профессор, РГГУ, г. Москва
- Карамурзов Б.С. – доктор технических наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик
- Кетенчиев Х.А. – доктор биологических наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик
- Кочесоков Р.Х. – доктор философских наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик
- Крайzman В.Л. – доктор физ.-мат. наук, профессор, Ростовский госуниверситет, г. Ростов-на-Дону
- Лисичкин Г.В. – доктор химических наук, профессор, МГУ, г. Москва
- Лю Цзо И – доктор технических наук, профессор, Технологический университет, г. Гуанджоу, Китай
- Молодкин В.Б. – чл.-корр. НАН Украины, профессор, Институт металлофизики НАН Украины, г. Киев
- Оранова Т.И. – доктор химических наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик
- Ошхунов М.М. – доктор технических наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик
- Савин Г.И. – академик РАН, профессор, Отдел информатики и вычислительной техники РАН, г. Москва
- Скворцов Н.Г. – доктор социологических наук, профессор, С.-Пб. госуниверситет, г. Санкт-Петербург
- Тлибеков А.Х. – доктор технических наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик
- Ткачук В.А. – чл.-корр. РАН, академик АМН, профессор, МГУ, г. Москва
- Филатов В.П. – доктор философских наук, профессор, Российский государственный гуманитарный университет, г. Москва
- Шустова Т.И. – доктор биологических наук, профессор, С.-Пб. НИИ уха, горла, носа и речи, г. Санкт-Петербург
- Шхануков М.Х. – доктор физ.-мат. наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик

PERSONALIA

К 150-летию со дня рождения Жюль Анри Пуанкаре

Первый выпуск нашего журнала "Актуальные вопросы современного естествознания" был посвящен 100-летию со дня рождения академика А.Н. Колмогорова (25.04.1903 – 20.10.1987).

В этом году исполнилось 150 лет со дня рождения величайшего математика, члена Парижской Академии Наук Жюль Анри Пуанкаре (29.4.1854 – 17.7.1912). Труды Пуанкаре в области математики, с одной стороны, завершили сложившееся к концу XIX века классическое направление, с другой стороны, открыли пути к возникновению и развитию новой математики и механики. Принципиальным является то, что в этой новой математике наряду с количественными соотношениями устанавливаются впервые такие факты, которые имеют принципиальный качественный характер.

В области теории дифференциальных уравнений Пуанкаре исследовал разложения решений дифференциальных уравнений по начальным условиям и малым параметрам, доказал асимптотичность некоторых рядов, выражающих решения уравнений с частными производными. После изучения особых точек системы дифференциальных уравнений, он построил качественную теорию их, исследовал характер хода интегральных кривых на поверхности тора, ряд свойств их в n -мерном пространстве. Кроме того, Пуанкаре дал приложения этих исследований к задаче о движении трех тел, изучил периодическое решение задачи и асимптотическое поведение решений. Им были впервые введены методы малого параметра, неподвижных точек, уравнений в вариациях и разработана теория интегральных инвариантов. Пуанкаре впервые был изучен новый класс трансцендентных функций – автоморфные функции. Он доказал существование таких функций с заданной фундаментальной областью, построил для них ряды, доказал теорему сложения и показал возможность униформизации алгебраических кривых. Для функций нескольких комплексных переменных была построена теория интегралов, аналогичная интегралу Коши. Пуанкаре впервые ввел основные понятия комбинаторной топологии и дал первую интуитивную формулировку общего понятия размерности.

Для проблем математической физики Пуанкаре было исследовано колебание трехмерных континуумов, задачи теплопроводности и теории потенциала электромагнитных колебаний. Пуанкаре разработал так называемый метод выметания для обоснования принципа Дирихле. Пуанкаре, независимо от А. Эйнштейна в 1905 году в работе "О динамике электрона" развил математические следствия "принципа относительности".

Философская позиция Пуанкаре сформировалась впоследствии как новое направление – конвенционализм.

Чрезвычайно важны работы Пуанкаре и в области небесной механики, в том числе об устойчивости движения и о фигурах равновесия гравитирующей вращающейся жидкости.

Особое место занимают и имеют значение работы Пуанкаре в области механики. Поясним это несколько подробнее.

Суть проблемы должна быть понятна из нашумевшего в свое время заявления президента Международного союза теоретической и прикладной механики сэра Джеймса Лайтхилла, сделанного им с существенным опозданием только в 1986 году ([1], с.38).

"Здесь я должен остановиться и снова выступить от имени широкого всемирного братства тех, кто занимается математикой. Мы все глубоко сознаем сегодня, что энтузиазм наших предшественников по поводу великолепных достижений ньютоновской механики побудил их к обобщениям в этой области предсказуемости, в которые до 1960 года мы все охотно верили, но которые, как мы теперь понимаем, были ложными. Нас не покидает коллективное желание признать свою вину за то, что мы вводили в заблуждение широкие круги образованных людей, распространяя идеи о детерминизме систем, удовлетворяющих законам движения Ньютона, – идеи, которые, как выяснилось после 1960 года, оказались неправильными".

На одном из аспектов проблемы, вызвавшей столь "необычное" признание, мы сейчас и остановимся.

Основной проблемой в аналитической динамике является проблема интегрирования. В конце XIX века Анри Пуанкаре показал [2], что не все динамические системы похожи друг на друга, как до него считалось. Существуют системы двух типов: интегрируемые и неинтегрируемые. Для первых мы можем исключить взаимодействие между частицами и свести задачу к задаче о свободном движении. Для вторых – неинтегрируемых – оказывается необходимо отказаться от описания в терминах траекторий (т.е. фактически детерминизма) и перейти к вероятностному описанию.

Возможность исключения потенциальной энергии с помощью канонического преобразования и переходу к новым циклическим переменным – это и есть основная характеристика интегрируемых динамических систем в смысле Пуанкаре. Значит, для интегрируемых систем, после преобразования гамильтониана в соответствующий вид, отсутствует член с потенциальной энергией, а значит, исключается фактически взаимодействие между частицами.

До 1889 года предполагалось (правда, молчаливо [3]), что все динамические системы интегрируемые, а проблемы, связанные с задачей трех и более тел – чисто технические, вычислительные. Однако Пуанкаре показал, что в общем случае невозможно получить каноническое преобразование, сохраняющее вид гамильтоновых уравнений, которое приводило бы к циклическим переменным [4], причем, большинство систем как раз неинтегрируемые.

В чем же смысл столь сильного математического утверждения? Что было бы если бы Пуанкаре доказал интегрируемость всех динамических систем?

Это означало бы, что все без исключения динамические системы с любым числом частиц по существу изоморфны движению свободных, не взаимодействующих друг с другом частиц. Это означало бы, что они, эти частицы, никогда не могут выступать как коллектив, то есть когерентно! А это значит, что не может быть самоорганизации в принципе! Не может, значит, в интегрируемом мире возникнуть и жизнь!

Однако этого мало. Пуанкаре не только доказал неинтегрируемость, но и указал причину неинтегрируемости систем. Это существование резонансов между степенями свободы и возникновение проблемы, так называемых "малых знаменателей" [5].

Эта проблема была известна в астрономии и до Пуанкаре. Но именно его теорема показала, что основная трудность, связанная с расходимостью в решении задач динамики, не может быть устранена и делает невозможным введение циклических переменных для большинства динамических систем, начиная с системы трех тел. Вот как эту проблему в свое время оценивал Макс Борн [3]: "Было бы весьма странно, если бы Природа укрылась от дальнейшего прогресса познания за аналитическими трудностями проблемы многих тел".

С появлением работ Колмогорова (см. библиография в [6]), продолженных Арнольдом и Мозером, и появлением КАМ-теории (Колмогорова – Арнольда – Мозера) проблема неинтегрируемости и малых знаменателей стала рассматриваться как отправная точка нового развития динамики, и в том числе динамики, как когерентных движений, так и хаотических [7].

КАМ-теория рассматривает влияние резонансов на траектории. В разных точках фазового пространства динамической системы существуют резонансы, в других их нет. Резонансы соответствуют рациональным соотношениям между частотами. Поскольку мера рациональных чисел по сравнению с мерой иррациональных чисел равна нулю, то резонансы встреча-

ются крайне редко, большинство точек в фазовом пространстве нерезонансные. Резонансы приводят к периодическим движениям, отсутствие резонансов – к квазипериодическому движению. Следовательно, периодические движения, как правило, исключение из общего случая движений более сложного вида.

Основной результат КАМ-теории состоит в том, что существует два совершенно различных типа траекторий. Первые – слегка изменившиеся квазипериодические траектории. Вторые – стохастические траектории, возникающие при разрушении резонансов [5]. КАМ-теория не приводит к динамической теории хаоса, но она показывает, что при малых значениях некоторого параметра получается промежуточный режим, в котором сосуществуют траектории двух типов – регулярные и стохастические. Из хаотического состояния возможно появление регулярной структуры, то есть возникает самоорганизация.

Литература

1. Lighthill J. The Recognized Failure of Predictability in Newtonian Dynamics // Proceedings of the Royal Society. 1986. P.35-50.
2. Poincare H. Methodts nouvelles de la mecanique celeste. Paris: Gauthies Villars, 1882.
3. Тейбор М. Хаос и интегрируемость в нелинейной механике. М.: Эдиториал УРСС, 2000.
4. Пуанкаре А. Новые методы небесной механики // Пуанкаре А. Избранные труды. Т.1,2. М.: Наука, 1971-1972.
5. Арнольд В.И., Авец А. Эргодические проблемы классической механики. Серия “Регулярная и хаотическая динамика”. №11. 1999.
6. Колмогоров в воспоминаниях. Сборник воспоминаний посвященных великому ученому России крупнейшему математику XX века академику Андрею Николаевичу Колмогорову. 25.04.1903 – 20.10.1987. Редактор-составитель А.Н.Ширяев. М.: “Физ.-мат. лит.” ВО “Наука”, 1993. С.633-733.
7. Пригожин И., Стенгерс И. Время, хаос, квант. М.: Прогресс, 1999. 266 с.

УДК 539.26/27.548.4:548.734

Природа влияния наноразмерных дефектов и упругого изгиба на динамическое рассеяние рентгеновского излучения в кристаллах

В.Б. Молодкин, А.И. Низкова

Институт металлофизики НАН Украины, Киев

С целью создания новых высокоинформативных методов диагностики случайно распределенных наноразмерных дефектов (СРНД), которые не могут наблюдаться традиционными неразрушающими методами, такими, как рентгеновская топография, для которой такие наноразмерные либо в одном из измерений, либо во всех трех измерениях дефекты оказываются за пределами чувствительности метода, разработаны физические основы метода деформационных зависимостей полной интегральной отражательной способности (ПИОС), которая оказалась уникально чувствительной к СРНД.

Впервые теоретически и экспериментально доказано наличие зависимостей от однородной упругой макроскопической деформации интегральной интенсивности диффузного рассеяния, экстинкционных факторов или коэффициентов экстинкции, обусловленных рассеянием на дефектах как для когерентной (μ_{ds}), так и для диффузной (μ^*) составляющих ПИОС и эффективного статического фактора Дебая-Валлера, показатель которого считается пропорциональным интегральной интенсивности диффузного рассеяния.

Установлена природа возможных механизмов как аддитивного, так и неаддитивного влияния упругих деформаций (УД) и СРНД в объеме динамически рассеивающего монокристалла на величину ПИОС при различной степени асимметрии отражений, которая позволяет существенно усиливать эффект влияния УД на ПИОС. Показано, что неаддитивность совместного влияния СРНД и УД на величину ПИОС Лауэ-рефлексов свидетельствует о существенной роли эффектов экстинкции из-за рассеяния на СРНД и об относительном росте их влияния на ПИОС при возрастании УД, что обеспечивается, к примеру, присутствием в исследуемом монокристалле крупных в двух измерениях и наноразмерных в одном СРНД, влияние которых на величину ПИОС оказывается по отмеченным причинам сравнимым с влиянием упругой деформации при любой силе изгиба и при любой степени асимметрии используемых Лауэ-рефлексов. Наноразмерные в трех измерениях дефекты при обычно достаточно низких их концентрациях из-за слабого проявления для них указанных экстинкционных эффектов приводят к аддитивному влиянию СРНД и УД на ПИОС при любой степени асимметрии отражений.

Доказана возможность разделения влияния на ПИОС СРНД и УД путем факторизации выражений для ПИОС на множители, зависящие только от СРНД и только от УД. В том числе феноменологически впервые деформационные поправки к факторам экстинкции деформационных зависимостей брэгговской и диффузной составляющих ПИОС упруго изогнутых монокристаллов с микродефектами также факторизованы на множители, зависящие только от СРНД и только от УД. При этом найдена в явном виде зависимость указанных поправок от характеристик СРНД. Это впервые обеспечило возможность адекватного количественного определения характеристик СРНД путем фитирования теоретических и экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС.

1. Введение

Известно, что для образцов с дефектами характер поведения зависимостей ПИОС от радиуса кривизны (ρ) упругого цилиндрического изгиба $R_i(1/\rho)$, присущий упруго изогнутым совершенным кристаллам [12], качественно сохраняется во всем рассмотренном интервале изменения деформации (кривизны $1/\rho$), т.е., как и в случае совершенных кристаллов, кривые являются немонотонными с минимумом при отрицательных деформациях (вектор дифрак-

ции направлен от центра кривизны дифракционной плоскости). С ростом величины упругой деформации по обе стороны от этого минимума происходят сначала параболическое, а затем линейное изменения значений R_i . Однако «скорость» возрастания зависимости $R_i(1/\rho)$ до и после минимума резко уменьшается с ростом степени искажений, обусловленных дефектами, по сравнению с совершенным (без дефектов) кристаллом. Чувствительность зависимостей $R_i(1/\rho)$ к дефектам кристаллической решетки (по мере роста уровня искажений кристаллов кривые $R_i(1/\rho)$ проявляют тенденцию к распрямлению) позволяет использовать указанные зависимости для получения характеристик СРНД.

С точки зрения получения наиболее общих сведений об одновременном влиянии однородного упругого изгиба и локализованных полей дефектов на рассеяние рентгеновских лучей (РЛ) наибольший интерес представляет изучение приближения тонкого ($\mu_0 t_0 \leq 1$, μ_0 – коэффициент фотоэлектрического поглощения, t_0 – толщина кристалла) кристалла, в котором учитывается вклад двух типов волновых полей.

Анализ литературных данных, полученных в таком приближении, показывает, что зависимость ПИОС от градиента деформации B в идеальных кристаллах можно условно разбить на три области, а именно: слабую, промежуточную ($B \leq 1$) и сильную ($B > 1$). Для слабого и промежуточного уровней деформации приближение геометрической оптики [1], являющееся главным членом разложения в ряд точного решения [2], показывает [3, 4], что зависимость ИОС $R_i(B)$ описывается последовательно параболическим и линейным законами соответственно для малой и промежуточной деформации. При больших же градиентах деформации экспериментальные зависимости могут быть количественно описаны соответствующими формулами точного решения, предусматривающими приближение ИОС с ростом B к ее кинематическому пределу [2].

При переходе к рассмотрению тонких реальных (с локализованными искажениями) упруго изогнутых кристаллов [5-7] экспериментально впервые обнаружен на качественном уровне эффект частичной потери чувствительности зависимости к присутствию упругой деформации, который, однако, может быть подавлен при переходе к сильно асимметричной геометрии дифракции.

Наблюдающиеся закономерности поведения зависимостей $R_i(1/\rho)$ в тонком совершенном и реальном кристаллах могут быть объяснены при использовании результатов динамической теории рассеяния РЛ кристаллами с однородно распределенными дефектами [9] и ее обобщения на случай неоднородного распределения [13, 14]. Для идеальных изогнутых кристаллов известно [1-3], что с ростом деформации изменяются дифракционные условия с глубиной в непоглощающем кристалле для каждой из двух волновых мод (происходит искривление этих мод). В частности, в [3, 4] показано, что это обстоятельство приводит к возникновению линейной зависимости $R_i(1/\rho)$ для промежуточных значений деформации. Учет же интерференционного поглощения, которое увеличивается с ростом деформации, и, следовательно, уменьшает ПИОС и конкурирующего влияния, т.е. увеличения ПИОС за счет уширения кривых отражения при изменении дифракционных условий, сопровождающегося миграцией точек возбуждения по дисперсионной поверхности, обеспечивает наблюдающуюся немонотонность хода рассматриваемых кривых при отрицательных деформациях. Эффект потери чувствительности $R_i(1/\rho)$ к деформации реального кристалла обусловлен конкурирующим характером влияния на дифракцию двух исследуемых типов искажений решетки: с одной стороны уменьшением экстинкционной длины в деформированном кристалле, по сравнению с идеальным, и дополнительным вкладом диффузного рассеяния, а с другой стороны – уменьшением величины структурного фактора ($F_{rh}^{Re} > F_{rh}^P e^{-L}$) и, главное, дополнительными потерями энергии волновых полей за счет диффузного рассеяния, учитываемых коэффициентом μ_{ds} [9]. Оказалось, что при слабых и промежуточных уровнях деформации эти механизмы могут быть использованы для количественного описания экспериментальных величин ИОС в рамках следующей модели.

ПАОС R_i реального упруго изогнутого кристалла может быть представлена в виде суммы когерентной R_i^C и диффузной R_i^D , где

$$R_i^C = \frac{C|\chi_{rh}^*|}{2\sin 2\theta} e^{-M_0^*} \left[1 - \exp\left(-\frac{\pi C^2}{2|B|}\right) \right] \int_{-1}^1 \frac{d\xi}{\sqrt{1-\xi^2}} \times \frac{\operatorname{ch}(M_\beta^* \xi) \operatorname{ch}\left[\left(\frac{M^* C^2}{2} + 2\right) \ln\left(\sqrt{1 + \left(\frac{D}{C}\right)^2 (1-\xi^2)} + \left(\frac{D}{C}\right) \sqrt{1-\xi^2}\right)\right]}{\sqrt{1 + \left(\frac{D}{C}\right)^2 (1-\xi^2)}}. \quad (1)$$

Здесь M_0^* – показатель фактора нормального поглощения, M_β^* описывает влияние поглощения в асимметричной геометрии Лауэ, $B = (\partial^2/\partial z^2 - \partial^2/\partial x^2)(\mathbf{h}\mathbf{u})$ – нормализованный градиент деформации, $D = Bt_0$ – эффективная деформация, t_0 – толщина кристалла в единицах Λ^*/π , Λ^* – экстинкционная длина для σ -поляризации, M^* – коэффициент аномального поглощения, C – поляризационный фактор, равный 1 или $\cos 2\theta$. Остальные обозначения соответствуют [2]. Однако основное отличие формулы (1) от результатов и обозначений [2] состоит в перенормировке согласно [10, 13, 14] констант динамического рассеяния $\chi_{ih}^* \rightarrow \chi_{ih} e^{-L}$, $\chi_{rh}^* \rightarrow \chi_{rh} e^{-L}$, $\mu_0^* \rightarrow \mu_0 + \mu_{ds}$ для когерентной составляющей. Для диффузной составляющей используется следующее выражение [10]:

$$R_i^D = \frac{\pi^2 (\chi_{rh})^2}{\lambda \sin 2\theta} C^2 \left(\frac{t}{\gamma_1} \right) e^{-M_0} (1 - e^{-2L}) \frac{\operatorname{sh} M_\beta}{M_\beta} e^{-\mu^* t_0} \frac{\gamma_1}{\gamma_0}. \quad (2)$$

Экспериментально наблюдается чрезвычайно высокая чувствительность величины ПАОС как к наличию малых концентраций СРНД, так и к слабым УД [9]. Целью настоящей работы являлась разработка физических основ и апробация метода определения характеристик СРНД путем использования деформационных зависимостей ПАОС.

2. Влияние упругого изгиба на диффузное рассеяние и экстинкционные эффекты в монокристаллах с дефектами

В работах [13, 14, 16, 17] в основу модели рассеяния рентгеновских лучей упруго изогнутым монокристаллом с СРНД было заложено предположение о том, что упругая деформация не влияет на диффузное рассеяние и коэффициенты экстинкции, обусловленные рассеянием на дефектах. В работе [17] измерения значений ПАОС (с точностью 3%) проводились на двухкристальном спектрометре с использованием $\text{MoK}_{\alpha 1}$ -излучения в бездисперсионной схеме. Использовалось (220)-отражение от плоскостей, составляющих угол ψ с нормалью к поверхности кристалла. Величины углов для образцов 1, 2 и 3 составляли соответственно $\psi = 2,13^\circ$, $\psi = 2,05^\circ$ и $\psi = 0,38^\circ$. Были получены деформационные зависимости ПАОС, изображенные маркерами на рис. 1.

В табл. 1 приведены значения структурно чувствительных параметров ПАОС для динамического рассеяния, полученные фитированием зависимостей ПАОС от деформации [17] на основе указанной модели [14, 16, 17].

Дефектная структура образцов 1-3 сформировалась в результате преципитации кислорода в кремнии, широко изученной экспериментально и теоретически [19]. Известно, что при отжиге в объеме монокристалла Si, выращенного по методу Чохральского, образуются дискообразные выделения SiO_2 , концентрация и размер которых зависят от концентрации кислорода после выращивания, длительности и температуры отжига. Для образцов, изучаемых в

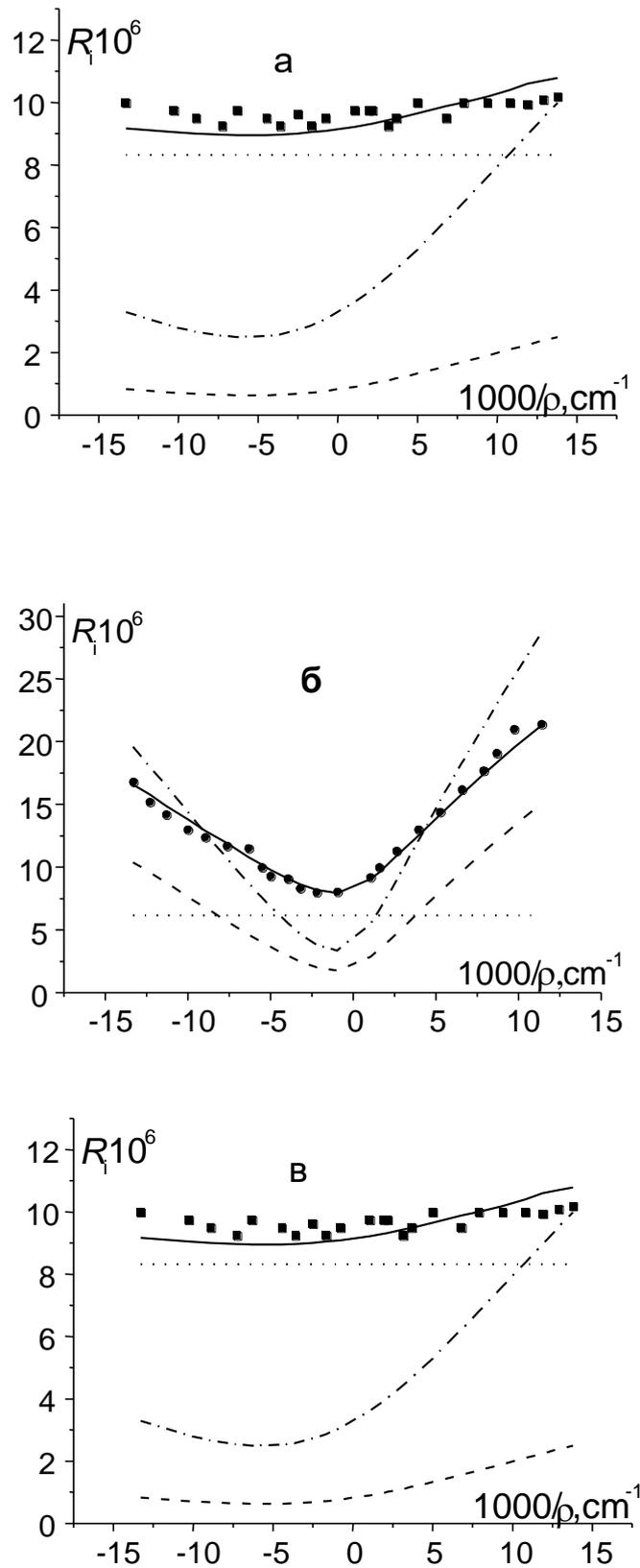


Рис. 1. Рассчитанные значения зависимостей ПИОС от кривизны монокристаллов Si, прошедших термообработку: при 1080°C в течение 4 ч (рис. 1а), при 1080°C в течение 6 ч (рис. 1б), при 1080°C в течение 10 ч (рис. 1в) (сплошная линия). Соответствующие экспериментальные значения (маркеры); штрих и пунктир – когерентная и диффузная составляющие ПИОС соответственно, штрих-пунктир – ПИОС кристалла без СРНД [17].

Таблица 1

Значения структурно чувствительных параметров ПИОС для динамического рассеяния, полученные фитированием в рамках указанной модели [14, 16, 17] зависимостей ПИОС от деформации (маркеры на рис. 1) [17] и рассчитанные из литературных данных о дефектной структуре образцов (в круглых скобках).

| № образца | $L \cdot 10^3$ | $\mu_{ds}, \text{см}^{-1}$ | $\mu^*, \text{см}^{-1}$ | GOF |
|-----------|----------------|----------------------------|-------------------------|-------------|
| 1 | 4±0,2 (3,01) | 3,7±0,2 (0,99) | 0 (0,14) | 0,78 (4,41) |
| 2 | 10±0,1 (8,35) | 13±1 (4,30) | 0 (1,03) | 1,35 (32,8) |
| 3 | 13±3 (16,3) | 20±2 (17,9) | 0 (2,67) | 0,73 (1,19) |

настоящей работе, концентрация кислорода составляла $1,1 \cdot 10^{18}$ атомов/см³. Отжигались они 4 часа, 6 часов и 10 часов соответственно при температуре $T = 1080^\circ\text{C}$.

Известно, что при температурах отжига выше 1173 К напряжения, создаваемые в кристалле вокруг преципитатов SiO₂, частично ослабляются за счет образования дислокационных петель. Влияние упомянутых СРНД разных типов на величины ПИОС характеризуется структурно чувствительными параметрами динамического рассеяния рентгеновского излучения, причем дефекты разного типа вносят аддитивный вклад в эти параметры, т.е. $L = L_{cl} + L_{b.l.} + L_{s.l.}$, $\mu_{ds} = \mu_{dsc.l.} + \mu_{ds.b.l.} + \mu_{ds.s.l.}$, $\mu^* = \mu^*_{cl} + \mu^*_{b.l.} + \mu^*_{s.l.}$. Определенные с использованием комбинированного метода ПИОС [18] и литературных данных [19] значения указанных параметров динамического рассеяния для образцов 1, 2 и 3 приведены в табл. 1 в круглых скобках.

На рис. 2 линиями изображены рассчитанные зависимости ПИОС от радиуса упругого изгиба при значениях параметров динамического рассеяния MoK_α-излучения, рассчитанных из литературных данных о дефектной структуре образцов [18, 19] и приведенных в круглых скобках в табл. 1. Из этих данных следует, что различия рассчитанных и экспериментальных зависимостей ПИОС существенно превышают ошибку экспериментальных измерений.

Для образца 1 со слабо развитой дефектной структурой наблюдается меньшее, чем для образца 2, расхождение с экспериментом расчетов, проведенных в рамках модели, предполагающей независимость диффузного рассеяния и экстинкционных эффектов от упругой деформации. При этом, как видно из табл. 1, значения величин параметров динамического рассеяния L , μ_{ds} и μ^* , определенные из оптимально возможных результатов фитирования деформационной зависимости [17] в рамках указанной модели, в пределах погрешности определения практически совпадают с рассчитанными из литературных данных о дефектной структуре образца 1. Это обусловлено низкой чувствительностью ПИОС к СРНД из-за малых значений этих параметров.

Для образца 3 с сильно развитой дефектной структурой значения величин параметров динамического рассеяния L , μ_{ds} и μ^* , определенные путем аналогичного фитирования деформационной зависимости [17], значительно меньше значений, рассчитанных из литературных данных о дефектной структуре образца 3. Однако, хотя вклад диффузной составляющей в данном случае определяет величину ПИОС, из-за малой степени асимметрии использованного в данном случае рефлекса эти данные не позволяют сделать вывод о наличии и характере зависимости диффузной составляющей от степени упругой деформации. Действительно, из рис. 2в видно, что в этом случае зависимость от деформации даже когерентной составляющей ПИОС проявляется слабо (штриховая линия).

Для более корректного описания уже обсужденных кривых на рис. 2а и рис. 2в, а также, особенно для описания их и в случае рис. 2б, где наблюдается наиболее существенное расхождение рассчитанных и экспериментальных данных для реальных значений параметров L ,

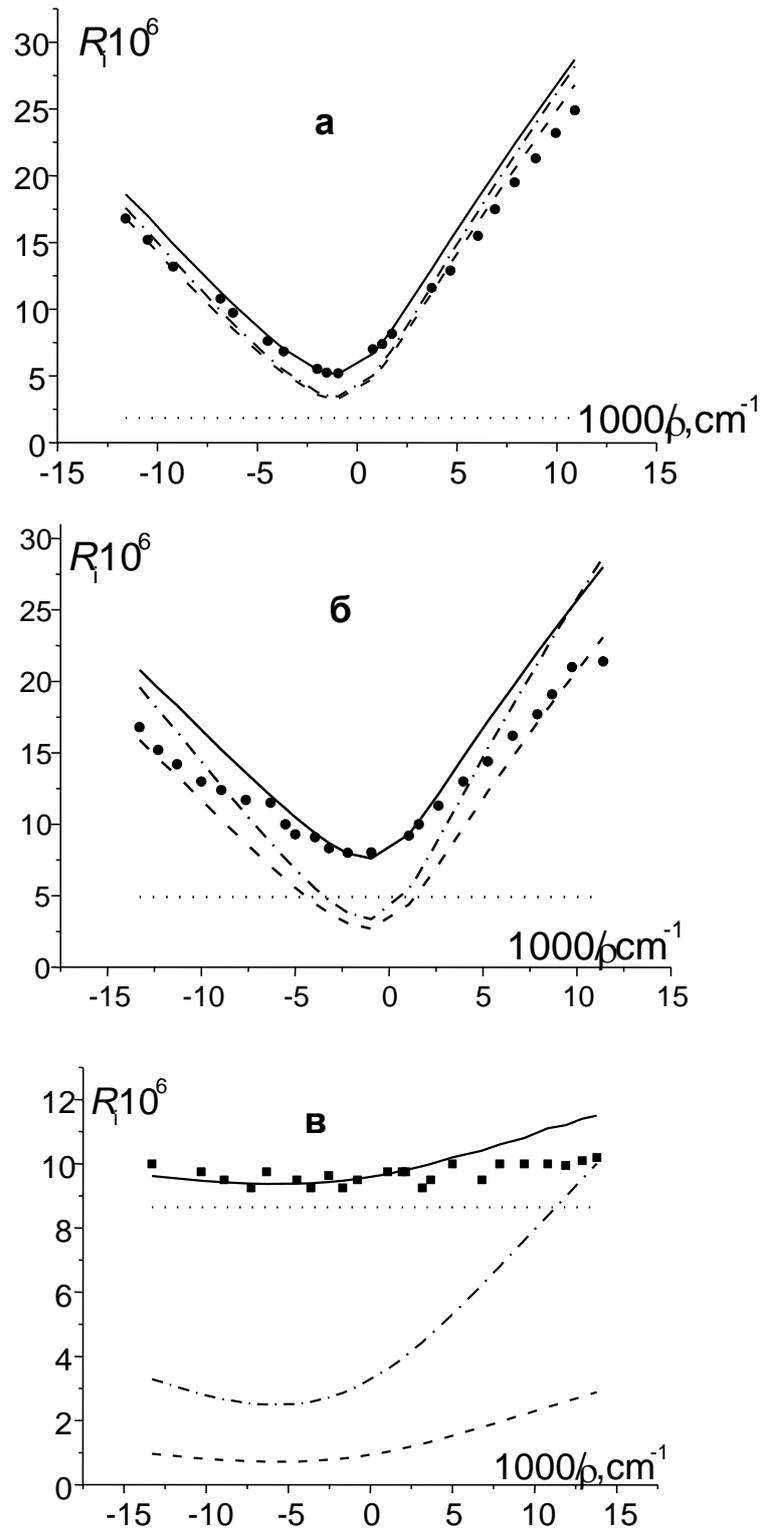


Рис. 2. Рассчитанные с использованием выражений согласно [14, 16, 17] зависимости ПИОС от кривизны монокристаллов Si, содержащих СРНД, характеризующиеся значениями параметров динамического рассеяния: $L = 0,00301$, $\mu_{ds} = 0,99 \text{ см}^{-1}$, $\mu^* = 0,14 \text{ см}^{-1}$ (рис. 2а), $L = 0,00835$, $\mu_{ds} = 4,30 \text{ см}^{-1}$, $\mu^* = 1,03 \text{ см}^{-1}$ (рис. 2б), $L = 0,0163$, $\mu_{ds} = 17,9 \text{ см}^{-1}$, $\mu^* = 2,67 \text{ см}^{-1}$ (рис. 2в) (сплошная линия). Соответствующие экспериментальные значения ПИОС (маркеры) для монокристаллов Si, прошедших термообработку: при 1080°C в течение 4 ч (рис. 2а), при 1080°C в течение 6 ч (рис. 2б), при 1080°C в течение 10 ч (рис. 2в); штрих и пунктир – когерентная и диффузная составляющие ПИОС соответственно, штрих-пунктир – ПИОС кристалла без СРНД [17].

μ_{ds} и μ^* , модель, предполагающая независимость от деформации величин факторов динамического рассеяния и величины вклада диффузной составляющей в ПИОС, по-видимому, нуждается в уточнении. Неадекватность модели подтверждается значениями показателя добротности фитирования, приведенными в круглых скобках в табл. 1, и особенно ярко иллюстрируется рис. 2б, на котором рассчитанные в ее рамках зависимости ПИОС от радиуса деформации (линии) не совпадают наиболее существенно с зависимостями, полученными экспериментально (маркеры) для образца 2. Таким образом, для образца 1 наблюдается недостаточное влияние (вклад) микродефектов, а для образца 3 – деформации. В образце 2 эти вклады сравнимы и достаточно заметны.

В соответствии с [20-22] влияние упругой деформации на величины ПИОС и ее компонент при наличии в кристалле локализованных дефектов структуры можно описать, вводя поправки к величинам параметров динамического рассеяния, зависящие от степени деформации.

По определению все величины L , μ_{ds} и μ^* являются интегральными [9]:

$$\begin{aligned} L &\sim RD \sim \int \mu_{ds}(\theta) d\theta; \\ \mu_{ds} &\sim \int \mu_{ds}(\theta) RB(\theta) d\theta / \int RB(\theta) d\theta; \\ \mu^* &\sim \int \mu_{ds}(\theta) \mu_{ds}(\theta) d\theta / \int \mu_{ds}(\theta) d\theta. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $\mu_{ds}(\theta) \sim R_D(\theta)$, где $R_D(\theta)$ и $R_B(\theta)$ – диффузная и брэгговская кривые отражения. Если рассматривать более строго, то находить интегральные значения необходимо не для $\mu_{ds}(\theta)$, а для всего фактора экстинкции, и, следовательно, интегрировать следует не коэффициент экстинкции $\mu_{ds}(\theta)$, а сам фактор экстинкции $\exp(-\mu_{ds}(\theta)t_0)$ (случай Лауэ) или $1/(\mu_0 + \mu_{ds}(\theta))$ (случай Брэгга). Использованное здесь упрощение справедливо при условии $\mu_{ds}(\theta)t_0 \ll 1$, т.е. $\mu_{ds}(\theta) \ll \mu_0$, которое, как следует из данных табл. 1, выполняется для образца 2.

Как видно из формул (3) все три величины по определению должны в общем случае различным образом зависеть от деформации, т.к. сами кривые отражения под интегралом и их полуширины различным образом чувствительны к деформации изгибом. Имеется в виду эффект различного относительного изменения их ширины при деформации. Так, если распределение диффузного фона много шире брэгговского, то более чувствительной к изгибу будет брэгговская кривая отражения. При малых изгибах кристалла, когда происходит уширение и, следовательно, увеличение отражательной способности когерентного пучка и аналогичное увеличение за счет уширения, а также, по-видимому, конкурирующее уменьшение интенсивности диффузного рассеяния вследствие дополнительного расширения провала в диффузной кривой отражения, величина μ_{ds} может изменяться даже в сторону уменьшения, что видно из анализа формул (3). Это будет происходить до тех пор, пока полуширина $R_B(\theta)$ с ростом изгиба не станет порядка полуширины $R_D(\theta)$ или $\mu_{ds}(\theta)$, что есть практически одно и то же. При этом $\mu_{ds} \rightarrow \mu^*$, после чего изменение μ_{ds} с деформацией станет равным изменению μ^* как по величине, так и по знаку, т.е. оно уже станет положительным, как и изменение μ^* , которое не меняет знак и положительно при любом изгибе. Таким образом, изгиб сначала устраняет причину, по которой μ_{ds} всегда существенно больше μ^* , а далее и μ_{ds} и μ^* растут одинаково. Указанный рост обусловлен уширением диффузной кривой отражения. Однако этот рост может стать скомпенсированным для R_D соответствующим ростом μ^* в факторе экстинкции. Для параметра L такая стабилизация, возможно, отсутствует, т.к. по определению $L \sim R_D$ без учета экстинкционного фактора и, следовательно, коэффициента экстинкции μ^* . Аналогично продолжают расти μ_{ds} и μ^* . Когда они станут $\sim \mu_0$, их необходимо заменить экстинкционными факторами.

Чем уже пик диффузного рассеяния, тем раньше с ростом изгиба устанавливается описанный режим одинакового увеличения μ_{ds} и μ^* , что видимо и имеет место в нашем случае узкого диффузного пика. Если дефектов несколько типов, то сначала выравниваются вклады

в μ_{ds} и μ^* для самых крупных дефектов, затем менее крупных и в конце для самых мелких и, следовательно, для суммарных вкладов, т.е. μ_{ds} и μ^* будут сближаться по мере выхода на указанный механизм дефектов различного типа пока не станут равными.

Убедившись в невозможности однозначного подбора независимых коэффициентов деформационных зависимостей для R_D , μ_{ds} , μ^* и L , используем обоснованные выше утверждения о характере изменения L , R_D , коэффициентов эффективного поглощения μ_{ds} и μ^* при деформации, т.е., что при какой-то степени деформации $1/\rho_k$ величины μ_{ds} и μ^* становятся равными, а затем продолжают расти с одинаковой скоростью. R_D при какой-то степени деформации выйдет на режим стабилизации, а затем станет уменьшаться за счет преобладающего влияния фактора экстинкции, а зависимость ПИОС от деформации будет определяться когерентной составляющей и ее кинематическим пределом. Из общих физических соображений, приведенных выше и анализа экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС, приведенного ниже, в работе [23] предложена следующая модель зависимостей параметров динамического рассеяния от деформации. Так, поскольку из рис. 1 и 2 видно, что величины ПИОС слабо зависят от знака деформации, то определяющая зависимость величин поправок для L , R_D и коэффициентов эффективного поглощения μ_{ds} и μ^* от обратного радиуса кривизны деформации квадратична ($\sim 1/\rho^2$, ρ - радиус кривизны упругого изгиба), т.е. является симметричной.

В то же время из рис. 3 видно, что прирост ПИОС за счет присутствия случайно распределенных в объеме микродефектов при отрицательных деформациях значительно больше, чем при положительных (см. рис. 3), что позволяет предположить также наличие существенно более малых поправок к величинам L и R_D , зависимость которых от обратного радиуса кривизны деформации линейна ($\sim 1/\rho$), т.е. асимметрична. Эта незначительная дополнительная асимметрия ПИОС может быть обусловлена эффектом Бормана для диффузной составляющей. Данная модель коррелирует с общими теоретическими результатами работ [20-22].

Тогда искомая модель приобретает вид [23]:

при $|1/\rho| < |1/\rho_k|$

$$L = L_0 + \Delta L_1 + \Delta L_2 = L_0 (1 + \alpha/\rho_2 + \alpha_1/\rho), \quad (4)$$

$$\exp(-\mu_{ds}t) = \exp(-\mu_{ds0}t) + \Delta \exp(-\mu_{ds}t) = \exp(-\mu_{ds0}t) + \beta/\rho_2, \quad (5)$$

$$\exp(-\mu^*t) = \exp(-\mu^*_0t) + \Delta \exp(-\mu^*t) = \exp(-\mu^*_0t) + \delta/\rho_2. \quad (6)$$

при $|1/\rho| > |1/\rho_k|$

$$L = L_0 \alpha_1/\rho, \quad (7)$$

$$\exp(-\mu_{ds}t) = \exp(-\mu^*t) = \exp(-\mu^*_0t) + \delta/\rho_2. \quad (8)$$

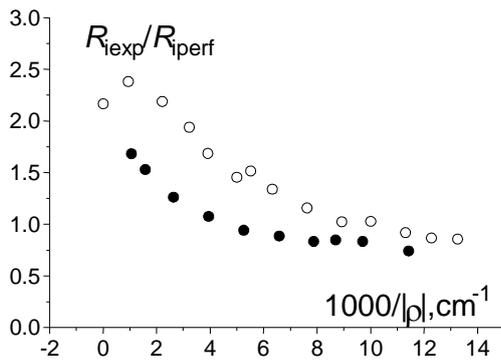


Рис. 3. Зависимости от модуля радиуса кривизны деформации отношений экспериментальных значений ПИОС образца 2 к рассчитанным для деформированного кристалла, не содержащего случайно распределенных в объеме дефектов: (°) - для отрицательной деформации, (●) - для положительной деформации.

Здесь $1/\rho_k$ – изгиб, при котором брэгговский пик уже уширился до ширины диффузного. ρ_k для каждого типа дефектов свое, но здесь введено одно эффективное, на основе анализа экспериментальной зависимости ПИОС от изгиба. Величина ρ_k определяется из условия $\mu_{ds} = \mu^*$.

В результате фитирования для образца 2 получено при $\alpha = -10^{12} \text{ мкм}^2$, $\beta = 3,1 \cdot 10^{10} \text{ мкм}^2$, $\alpha_1 = -2,01 \cdot 10^5 \text{ мкм}$, $\delta = -10^{11} \text{ мкм}^2$, КДФ = 0,9, $\rho_k = 10^6 \text{ мкм}$.

Тогда графически зависимости (4-8) могут быть представлены в виде, изображенном на рис. 4. Соответствующие расчетные зависимости ПИОС и ее составляющих от деформации приведены на рис.5.

Таким образом, в настоящей работе впервые экспериментально доказано наличие зависимостей от деформации интегральной интенсивности диффузного рассеяния, экстинкционных факторов или коэффициентов экстинкции, обусловленных рассеянием на дефектах, как для когерентной (μ_{ds}), так и для диффузной (μ^*) составляющих полной интегральной отражательной способности и эффективного статического фактора Дебая-Валлера. Эмпирически установлены параметры и характерные особенности указанных зависимостей.

3. Установление природы возможных механизмов как аддитивного, так и неаддитивного влияния УД и СРНД на величину ПИОС.

Задача определения количественных характеристик СРНД усложняется вследствие того, что совместное влияние СРНД и УД на ПИОС не всегда аддитивно [17]. Из рис. 1, 2 и 5 видно, что существуют такие значения величины радиуса положительного или отрицательного упругих изгибов, при которых деформационная зависимость ПИОС, полученная экспериментально в работе [17] для содержащего СРНД монокристалла Si, пересекается с рассчитанной деформационной зависимостью для монокристалла Si, не содержащего СРНД, т.е. при таких УД полностью исчезает чувствительность ПИОС к СРНД, а с разных сторон от точек пересечения даже знак влияния СРНД на ПИОС различен.

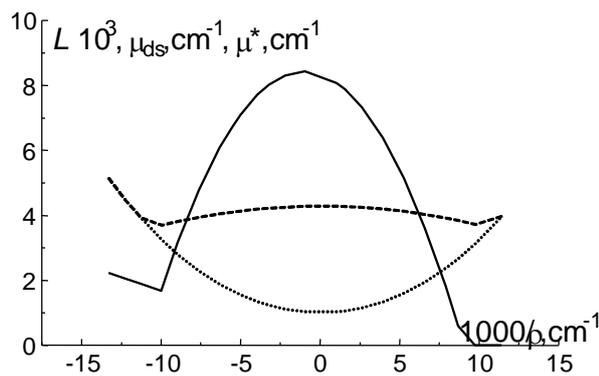


Рис.4. Рассчитанные зависимости величины эффективного статического фактора Дебая-Валлера L (сплошная линия) и величин коэффициентов эффективного поглощения когерентной μ_{ds} (штрих) и диффузной μ^* (пунктир) компонент ПИОС от степени упругой деформации (образец 2).

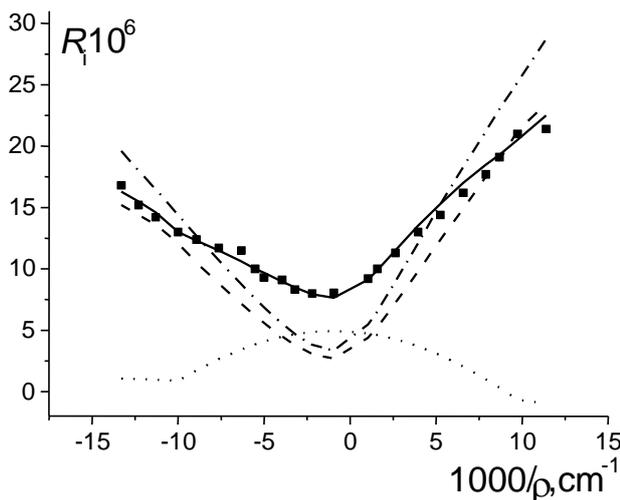


Рис.5. Зависимости ПИОС образца 2 от радиуса кривизны деформации, рассчитанная в рамках модели, предполагающей влияние деформации на коэффициенты экстинкции и на диффузное рассеяние (сплошная линия) и полученная экспериментально (маркеры). Штриховая линия – рассчитанная зависимость когерентной компоненты ПИОС от деформации, пунктирная линия – рассчитанная зависимость диффузной компоненты ПИОС от деформации, штрихпунктир – ПИОС кристалла без СРНД.

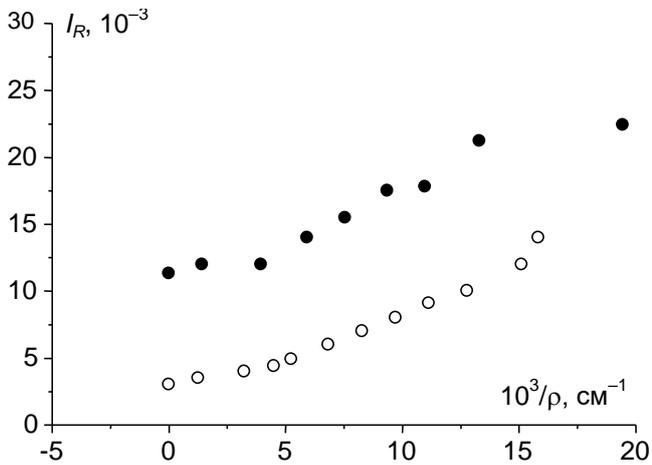


Рис. 6а. Зависимости абсолютных значений интегральных интенсивностей лауэ-дифрагированных пучков от кривизны образцов ($^\circ$) – совершенный кристалл, (\bullet) – образец с дефектами типа кластеров ($\psi = 1,5^\circ$) [6].

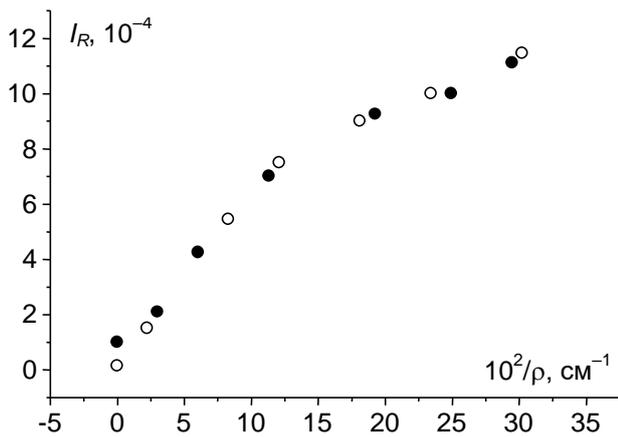


Рис. 6б. Зависимости абсолютных значений интегральных интенсивностей лауэ-дифрагированных пучков от кривизны образцов ($^\circ$) – совершенный кристалл, (\bullet) – образец с дефектами типа кластеров ($\psi = 53,2^\circ$) [6].

С другой стороны, авторы работы [6] наблюдали и возможное аддитивное влияние УД и СРНД на величину интегральной интенсивности (ИИ) (рис. 6а), и исчезновение чувствительности ИИ упруго изогнутого кристалла к СРНД при сильной степени асимметричности используемого Лауэ-рефлекса (рис. 6б). Однако адекватная физическая модель, объясняющая природу такого разнообразия явлений, отсутствовала.

В настоящей работе путем вычислений с использованием формул динамической теории рассеяния РЛ реальными монокристаллами, подвергнутыми контролируемому упругому изгибу, изучен характер влияния СРНД различных размеров и концентраций на ход деформационной зависимости ПИОС при варьировании степени асимметрии используемого Лауэ-рефлекса. Результаты вычислений представлены на рис. 7, 8, 9.

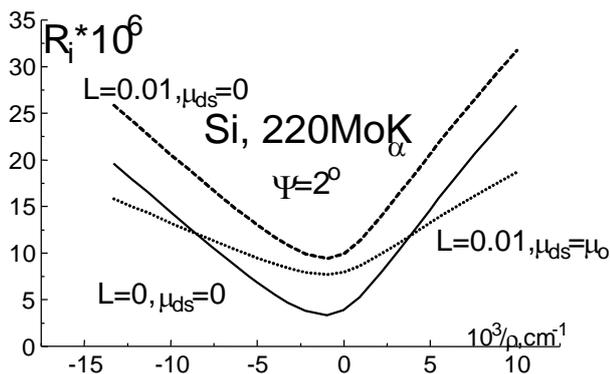


Рис. 7. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам (1)–(2), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД: сплошная линия – деформационная зависимость ПИОС при отсутствии СРНД, штриховая линия – деформационная зависимость при наличии очень мелких СРНД (при $\mu_{ds} \approx 0$), пунктир-деформационная зависимость при наличии крупных дефектов.

Из рис. 7 видно, что рост величины статического фактора Дебая-Валлера приводит к увеличению ПИОС, одинаковому при любых значениях упругого изгиба – наблюдается аддитивное влияние на величину ПИОС дефектов и упругой деформации. В то же время рост величины коэффициента экстинкции, т.е. эффективного поглощения за счет ухода части дифрагированных лучей в диффузный фон из-за рассеяния на СРНД (μ_{ds}) приводит к уменьшению ПИОС, причем разному при разных значениях упругого изгиба. Следовательно, неаддитивность влияния на ПИОС СРНД и упругой деформации, приводящая к снижению чувствительности величины ПИОС к упругой деформации и к появлению вышеупомянутой точки потери чувствительности ПИОС к СРНД является следствием указанной экстинкции (эффективного поглощения) как когерентной, так и диффузной составляющих ПИОС из-за их диффузного рассеяния на СРНД. Из рис. 7 видно, что пока деформации малы для больших СРНД ярко проявляется увеличение ПИОС за счет преобладающего над уменьшением из-за L и μ_{ds} когерентной составляющей ПИОС R_C вклада порожденной их наличием диффузной

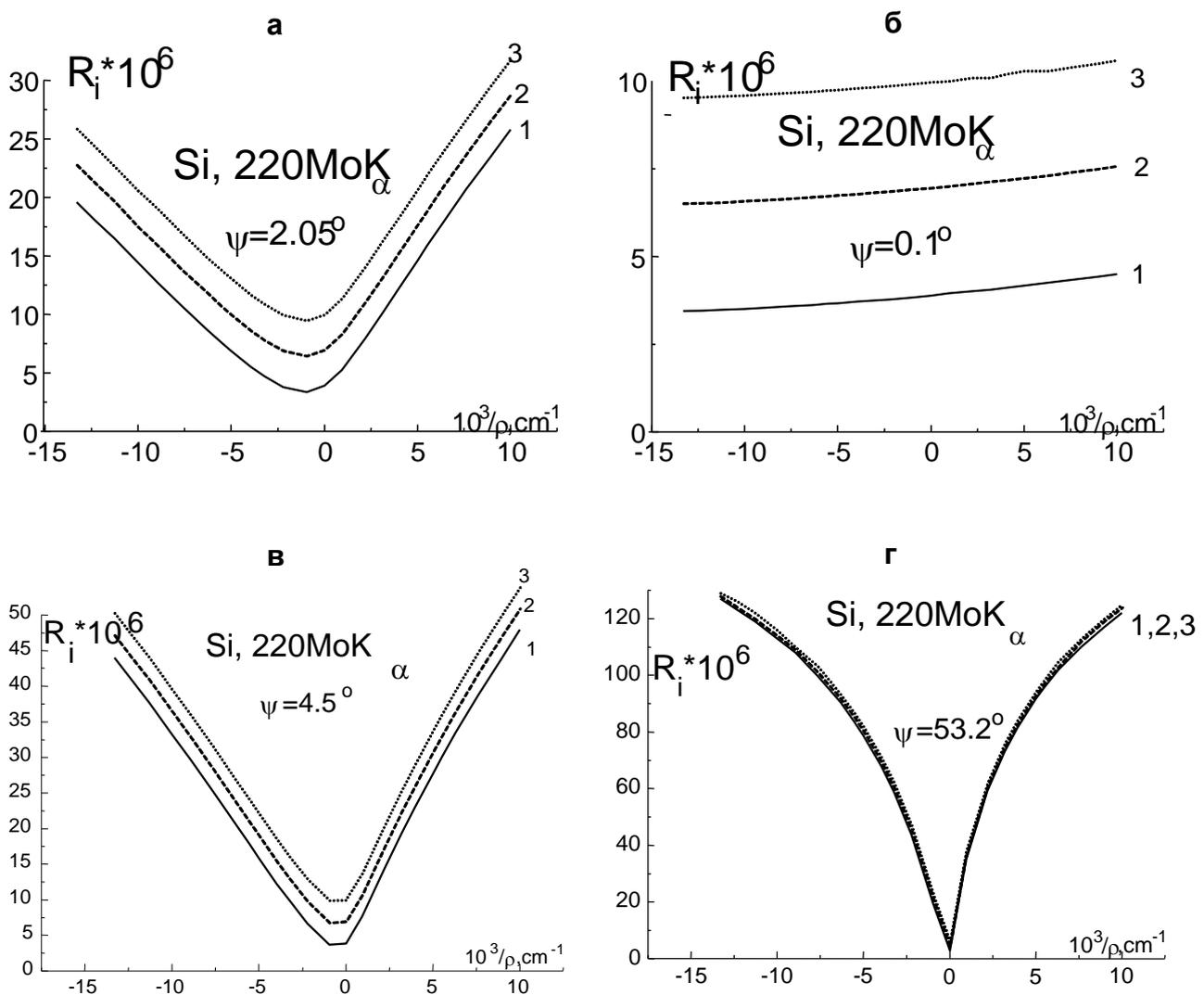


Рис. 8. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам, описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД для разных значений характеризующих СРНД параметров динамического рассеяния рентгеновского излучения: (1) $L = 0, \mu_{ds} = 0, \mu^* = 0$; (2) $L = 0,005, \mu_{ds} = 0, \mu^* = 0$; (3) $L = 0,01, \mu_{ds} = 0, \mu^* = 0$ и при различных углах наклона отражающей плоскости 011 к нормали к поверхности образца: а) $\psi = 0,1^\circ$, б) $\psi = 2,05^\circ$, в) $\psi = 4,5^\circ$, г) $\psi = 53,2^\circ$.

составляющей ПИОС R_D , а при больших деформациях, когда когерентная составляющая резко возрастает, абсолютная величина ее уменьшения за счет коэффициента экстинкции (μ_{ds}) начинает все более преобладать над непосредственным вкладом в ПИОС R_D , что возможно только в случае наличия достаточно крупных СРНД, дающих определяющий вклад в μ_{ds} .

Преобладание воздействия на величину ПИОС УД или СРНД зависит также от степени асимметричности используемого Лауэ-рефлекса, что иллюстрируют результаты расчетов, представленные на рис. 8. На рис. 8 представлены деформационные зависимости, расчи-

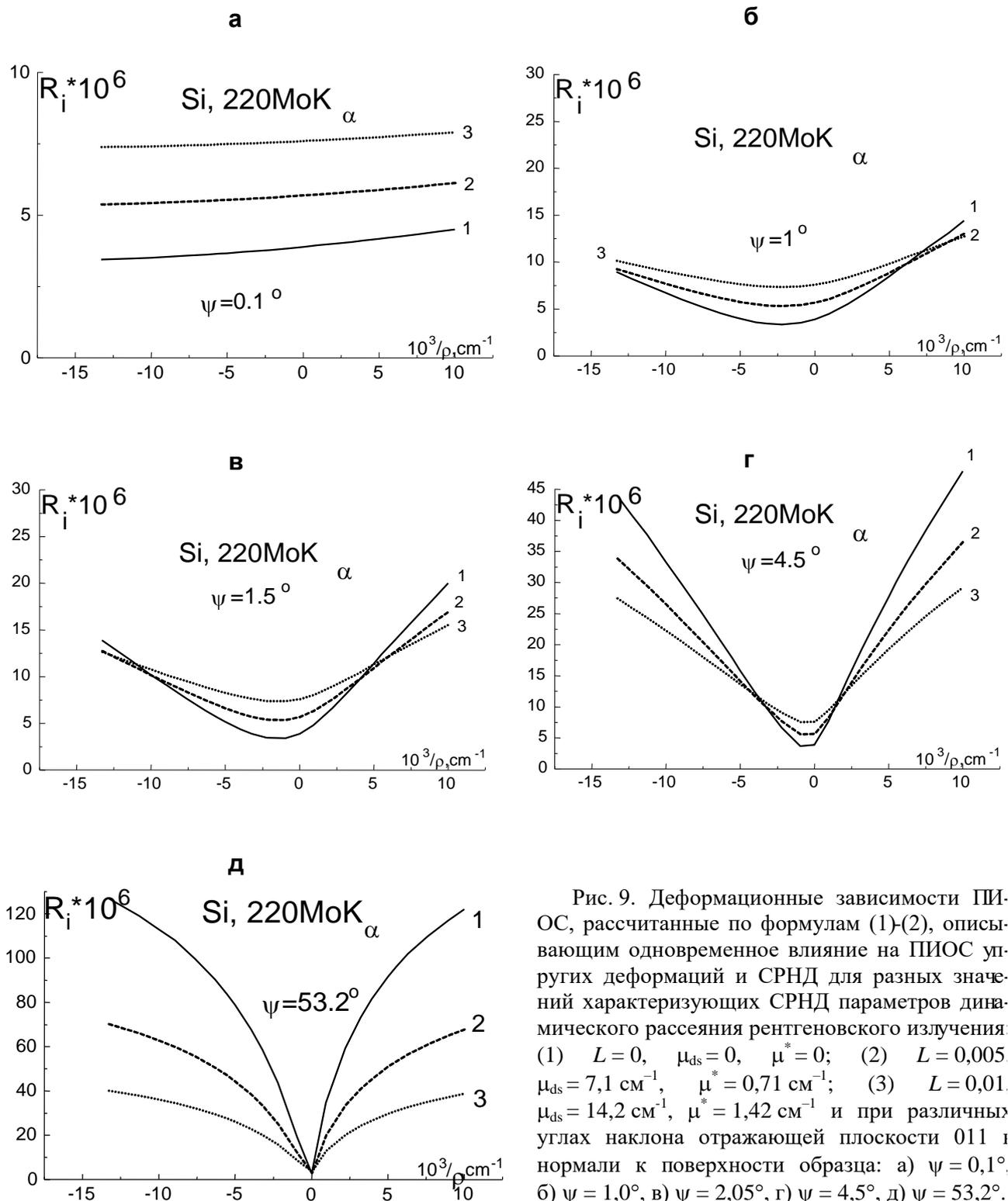


Рис. 9. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам (1)-(2), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД для разных значений характеризующих СРНД параметров динамического рассеяния рентгеновского излучения: (1) $L = 0$, $\mu_{ds} = 0$, $\mu^* = 0$; (2) $L = 0,005$, $\mu_{ds} = 7,1 \text{ см}^{-1}$, $\mu^* = 0,71 \text{ см}^{-1}$; (3) $L = 0,01$, $\mu_{ds} = 14,2 \text{ см}^{-1}$, $\mu^* = 1,42 \text{ см}^{-1}$ и при различных углах наклона отражающей плоскости 011 к нормали к поверхности образца: а) $\psi = 0,1^\circ$; б) $\psi = 1,0^\circ$; в) $\psi = 2,05^\circ$; г) $\psi = 4,5^\circ$; д) $\psi = 53,2^\circ$.

танные для монокристаллов Si, содержащих высокую концентрацию СРНД малых размеров, при использовании Лауэ-рефлексов с различной степенью асимметрии.

Из рис. 8а видно, что при использовании слабо асимметричного рефлекса величина ПИОС практически не зависит от степени деформации. В то же время наличие СРНД в этом случае большой концентрации мелких дефектов увеличивает ее в 2-3 раза, благодаря вкладу диффузной составляющей ПИОС R_D , причем увеличение ПИОС практически не компенсируется уменьшением брэгговской составляющей R_B из-за рассеяния на СРНД.

При умеренной асимметрии используемого рефлекса (рис. 8б и рис. 8в) вследствие резкого возрастания вклада когерентной составляющей преобладает влияние на величину ПИОС упругой деформации. При сильной степени асимметрии используемого рефлекса (рис. 8г) влияние СРНД на величину ПИОС становится практически не заметным по сравнению с влиянием УД.

При неаддитивном совместном влиянии на величину ПИОС упругой деформации и крупных СРНД с увеличением степени асимметрии Лауэ-отражения сужается область, в которой СРНД увеличивают ПИОС, и несколько уменьшается относительная степень их воздействия на ПИОС в этой области. В то же время в области преобладания когерентной составляющей чувствительность к дефектам резко возрастает. На рис. 9 представлены деформационные зависимости, рассчитанные для монокристаллов Si, содержащего низкую концентрацию СРНД больших размеров, при использовании Лауэ-рефлексов с различной степенью асимметрии.

Из рис. 9 видно, что степень деформации, при которой исчезает чувствительность к СРНД, уменьшается с увеличением степени асимметрии используемого Лауэ-отражения. При симметричном отражении (рис. 9а) наблюдается только тот участок деформационной зависимости, на котором СРНД увеличивают ПИОС упруго деформированного кристалла. При значительной степени асимметрии отражения (рис. 9б) практически наблюдается только тот участок деформационной зависимости, на котором преобладает вклад в ПИОС когерентного рассеяния, и наличие СРНД вызывает уменьшение ПИОС упруго деформированного кристалла.

Таким образом, в настоящей работе на основе предложенной модели теоретически и экспериментально изучены особенности дифракции в геометрии Лауэ когерентно и диффузно рассеянного рентгеновского излучения в тонких упруго изогнутых кристаллах кремния, содержащих дефекты кулоновского типа. Установлена природа возможных механизмов как аддитивного, так и неаддитивного влияния УД и СРНД на ПИОС при различной степени асимметрии отражений, которая позволяет существенно усиливать эффект влияния УД на ПИОС.

4. Количественное описание влияния на ПИОС упругого изгиба для монокристаллов с разными характеристиками СРНД

Характер зависимости от деформации факторов экстинкции, природа которого и его основные особенности установлены на основе модели, предложенной в работе [23], экспериментально подтвердившей соответствующие теоретические предсказания [20-22], оказывается, в соответствии с [20-23], существенно зависящим от степени нарушенности структуры этого образца вследствие наличия в нем СРНД, и, следовательно, очень чувствительным к характеристикам СРНД. Однако для определения характеристик СРНД путем фитирования теоретических и экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС при использовании разработанной в [23] теоретической модели необходимо разделить в этой модели влияние на ПИОС УД и наноразмерных дефектов. Целью работы [27] являлось доказательство возможности разделения влияния на ПИОС СРНД и УД путем факторизации выражений для ПИОС. Это сводилось к необходимости факторизации деформационных поправок к факторам экстинкции брэгговской и диффузной составляющих ПИОС упруго изогнутых монокристаллов с микродефектами на множители, зависящие только от СРНД и только от УД. Так,

для выяснения характера влияния нарушений, вызванных СРНД, и исключения путем выделения факторов собственно деформационных зависимостей общих для всех случаев дефектов, в работе [27] проанализированы деформационные зависимости факторов экстинкции, полученные для трех образцов с разными дефектными структурами. Образцы 1, 2 и 3, уже описанные выше, были вырезаны по плоскости (111) из слитка, выращенного по методу Чохральского в направлении [111] и имеющего концентрацию кислорода $1,1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и концентрацию углерода $< 1,0 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Образцы были отожжены при температуре 1080°C . Средний размер и концентрация микродефектов трех типов, присутствующих в указанных образцах, определены комбинированным методом ПИОС, описанным в работе [17]. Толщины образцов, длительность их термообработки и характеристики микродефектов трех типов, присутствующих в образцах, приведены в табл. 2.

Таблица 2

Толщины образцов (t_0 , мкм), длительность (t , час.), средние размеры и концентрации: кластеров SiO_2 в форме дисков R_{cl} , мкм; h_{cl} , мкм; c_{cl} ; больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} – вектор Бюргера, a – параметр решетки), R_{bl} , мкм; c_{bl} ; и мелких дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$, $R_{sm.l}$, мкм;

 $c_{sm.l}$.

| № обр. | t_0 , мкм | t , час | R_{cl} , мкм | h_{cl} , мкм | c_{cl} | R_{bl} , мкм | c_{bl} | $R_{sm.l}$, мкм | $c_{sm.l}$ |
|--------|-------------|-----------|----------------|----------------|-----------------------|----------------|-----------------------|------------------|-----------------------|
| 1 | 470 | 4 | 0,354 | 0,0104 | $2,24 \cdot 10^{-14}$ | 0,345 | $4,67 \cdot 10^{-15}$ | 0,019 | $2,11 \cdot 10^{-10}$ |
| 2 | 488 | 6 | 0,45 | 0,0116 | $2,24 \cdot 10^{-14}$ | 0,45 | $5,2 \cdot 10^{-15}$ | 0,031 | $1,43 \cdot 10^{-10}$ |
| 3 | 675 | 10 | 0,667 | 0,0138 | $2,24 \cdot 10^{-14}$ | 0,667 | $6,2 \cdot 10^{-15}$ | 0,0057 | $1,11 \cdot 10^{-8}$ |

Деформационные зависимости ПИОС для этих образцов измерены в работе [6] с использованием 220-отражения MoK_α -излучения от плоскостей, составляющих с нормалью к поверхности кристалла угол $\psi = 2,13^\circ$ (для образца 1); $\psi = 2,05^\circ$ (для образца 2); $\psi = 0,38^\circ$ (для образца 3).

Согласно модели, предложенной в работе [23], деформационная зависимость интегральной интенсивности диффузного рассеяния или эффективного статического фактора Дебая-Валлера L описывается выражениями (4) и (7).

Согласно той же модели, деформационные зависимости факторов эффективного поглощения из-за квазидиффузного рассеяния и диффузного рассеяния на микродефектах описываются выражениями (5) для $\exp(-\mu_{ds}t)$ и выражением (6) для $\exp(-\mu^*t)$ и выражением (8).

Путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей при использовании для упруго изогнутого монокристалла разработанной в [23] модели и формул динамической теории для монокристалла с микродефектами [17] подбираются такие значения величин поправок к L_0 , $\exp(-\mu_{ds}t)$ и $\exp(-\mu^*t)$, при которых значение коэффициента добротности фитирования минимально.

Таким способом для образцов 1, 2 и 3 были определены значения критического радиуса кривизны деформации (ρ_k), при которых $\exp(-\mu_{ds}t) = \exp(-\mu^*t)$. Полученные значения величин ρ_k , а также величины отношений μ_{ds}/μ^* и значения величин радиусов упругого изгиба (УИ), при которых исчезает чувствительность ПИОС к микродефектам (ρ_0), приведены в табл. 3. Затем для участков деформационных зависимостей ПИОС, соответствующих интервалам $|\rho| < \rho_k$ при $\exp(-\mu_{ds}t) = \exp(-\mu^*t)$ подбирались значения величин поправок $(\alpha_1 L_0)/\rho$ и δ/ρ^2 . Полученные значения $\alpha_1 L_0$ и δ также представлены в табл. 3.

Анализ данных табл. 3 позволил феноменологически установить формулу

$$\rho_k \approx 0,4 \rho_0^{(+)} \quad (9)$$

Таблица 3

Значения критического радиуса кривизны УИ (ρ_k), радиуса кривизны УИ, при котором исчезает чувствительность ПИОС к СРНД (ρ_0), и коэффициентов $\alpha_1 L_0$ и δ , полученные при фитировании деформационных зависимостей ПИОС, для образцов 1, 2 и 3, и значения отношений коэффициентов эффективного поглощения μ_{ds0}/μ^*_0 в отсутствие УИ.

| № обр. | $\rho_0^{(-)}$, мкм | $\rho_0^{(+)}$, мкм | ρ_k , мкм | $\alpha_1 L_0$, мкм | δ , мкм ² | μ_{ds0}/μ^*_0 |
|--------|----------------------|----------------------|-------------------|-----------------------------|------------------------------|---------------------|
| 1 | $-1,46 \cdot 10^6$ | $2,68 \cdot 10^6$ | $1,5 \cdot 10^6$ | $-(1,4 \pm 0,4) \cdot 10^3$ | $-(8 \pm 2) \cdot 10^{10}$ | 7,01 |
| 2 | $-1,12 \cdot 10^6$ | $2,22 \cdot 10^6$ | 10^6 | $-(1,7 \pm 0,4) \cdot 10^3$ | $-(1 \pm 0,2) \cdot 10^{11}$ | 4,18 |
| 3 | | $7,25 \cdot 10^5$ | $2,45 \cdot 10^5$ | $-(1,5 \pm 0,4) \cdot 10^3$ | $-(1 \pm 0,2) \cdot 10^{11}$ | 6,70 |

Таблица 4

Коэффициенты зависящих от радиуса кривизны УИ ρ поправок к L_0 и к фактору экстинкции: α/ρ и β/ρ^2

| № обр. | α , мкм ² | β , мкм ² |
|--------|--------------------------------|-----------------------------|
| 1 | $-(1,5 \pm 0,4) \cdot 10^{12}$ | $(2,5 \pm 0,2) \cdot 10^9$ |
| 2 | $-(1 \pm 0,4) \cdot 10^{12}$ | $(3 \pm 0,2) \cdot 10^{10}$ |
| 3 | $-(6 \pm 0,3) \cdot 10^{10}$ | $(9 \pm 1) \cdot 10^{10}$ |

На втором этапе для интервала $|\rho| > \rho_k$ подбирались значения величин поправок к ΔL_1 и $\exp(-\mu_{ds0}t)$. Подобранные значения коэффициентов поправок к L_0 и к фактору экстинкции приведены в табл. 4.

Из табл. 4 видно, что значения коэффициентов α для образцов 1 ($\eta = 0,08$) и 2 ($\eta = 0,077$) одного порядка, а для образца 3 ($\eta = 0,014$) значение указанного коэффициента на порядок меньше. Здесь $\eta = \sin\psi [1 + \cos(\theta + \psi) \cos(\theta - \psi)(1 + \nu)]$ – множитель, учитывающий изменение степени асимметрии используемого отражения в теории Петрашеня-Чуховского [2, 6]. Видно, что коэффициенты α сильно зависят от степени асимметрии используемого отражения. Для коэффициентов β наблюдается зависимость от характеристик СРНД.

На рис. 10 представлены деформационные зависимости поправок к факторам экстинкции для образцов 1, 2 и 3 в интервале деформаций $|\rho| > \rho_k$.

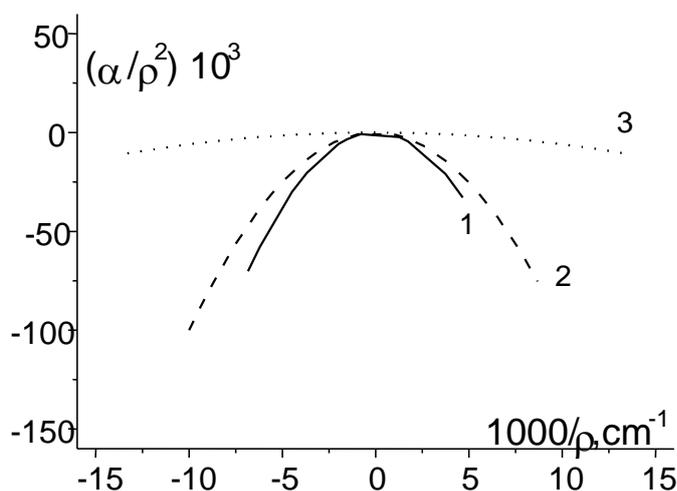


Рис. 10а. Деформационные зависимости поправок α/ρ^2 к эффективному статическому фактору Дебая-Валлера для образцов 1 (сплошная линия), 2 (штриховая линия) и 3 (пунктирная линия), полученные путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС и рассчитанных по формуле из [6] при $|\rho| > \rho_k$ с учетом (1)-(3).

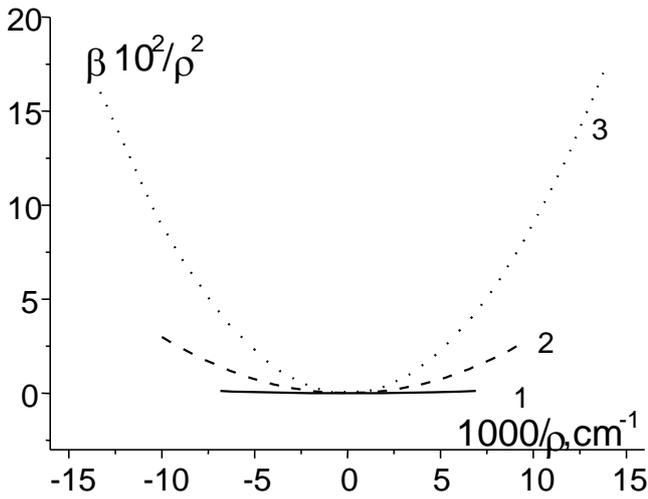


Рис. 10б. Деформационные зависимости поправок β/ρ^2 к фактору эффективного поглощения $\exp(-\mu_{ds}t)$ для образцов 1 (сплошная линия) и 2 (штриховая линия), полученные путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС и рассчитанных по формуле из [6] при $|\rho| > \rho_k$ с учетом (1)-(3).

Из рис. 10а и 10б видно, что деформационные зависимости поправок к факторам экстинкции чрезвычайно чувствительны к изменению от образца к образцу характеристик СРНД и степени асимметрии используемого отражения. Авторами работы [27] феноменологически подобраны нормирующие множители к поправкам к факторам экстинкции. На рис. 11 представлены деформационные зависимости нормированных на эти множители поправок к факторам экстинкции для образцов 1, 2 и 3 в интервале деформаций $|\rho| > \rho_k$.

Из рис. 11 видно, что нормированные значения величин поправок к факторам экстинкции одинаковы для всех образцов, т.е. не зависят от характеристик СРНД и от степени асимметрии используемого отражения.

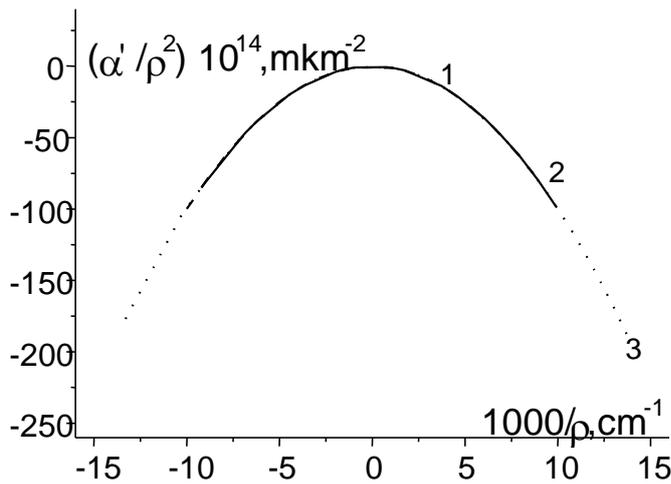


Рис. 11а. Деформационные зависимости поправок α/ρ^2 к эффективному статическому фактору Дебая-Валлера для образцов 1 (сплошная линия), 2 (штриховая линия) и 3 (пунктирная линия), полученные путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС и рассчитанных по формуле из [6] с учетом (1-3) при $|\rho| > \rho_k$, нормированные на ρ_k^2 .

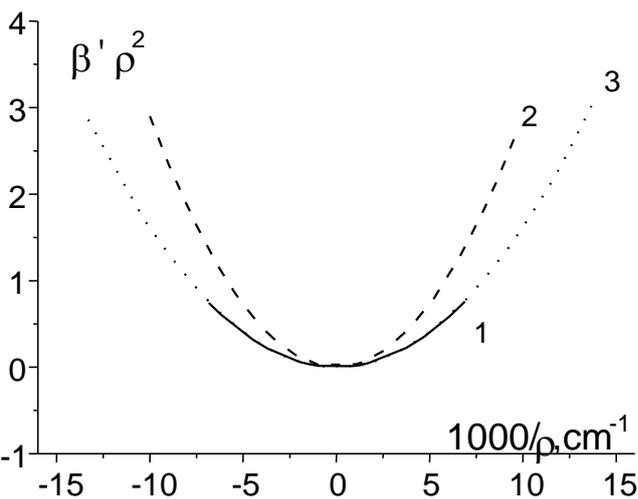


Рис. 11б. Деформационные зависимости поправок β/ρ^2 к фактору эффективного поглощения $\exp(-\mu_{ds}t)$ для образцов 1 (сплошная линия), 2 (штриховая линия) и 3 (пунктирная линия), полученные путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС и рассчитанных по формуле из [6] с учетом (1-3) при $|\rho| > \rho_k$, нормированные на $L_0/\exp(-\mu_{ds}t)$.

Анализ результатов расчетов, представленных на рис. 10 и 11, при использовании соотношения (7) показывает, что для любого упруго изогнутого образца, со-

держашего СРНД, значения величин поправок к факторам экстинкции можно определить из следующих выражений:

$$\alpha = \alpha'(\rho_k)^2 = \alpha'(0,4\rho_0)^2, \quad \alpha_1 = \alpha_1'; \quad (10)$$

$$\beta = \beta' L_0/\exp(-\mu_{ds0}t); \quad (11)$$

$$\delta = \delta'. \quad (12)$$

Рассмотрение деформационных зависимостей ПИОС для образцов 2 и 3, полученных при использовании 220-Лауэ-рефлексов $MoK_{\alpha 1}$ -излучения от плоскостей, составляющих угол ψ с нормалью к поверхности кристалла (величины углов для образцов 2 и 3 составляли соответственно $\psi = 2,05^\circ$ и $\psi = 0,38^\circ$) позволило получить зависимость величины ρ_0 от степени асимметрии используемого отражения:

$$\rho_0(2) t_0(2) / \sqrt{\eta(2)} \approx \rho_0(3) t_0(3) / \sqrt{\eta(3)}, \quad (13)$$

где t_0 – толщина образца. Из выражения (13) следует, что с увеличением степени асимметрии используемого отражения должны расти величины ρ_0 .

Таким образом, поправка к фактору эффективного поглощения $\exp(-\mu_{ds0}t)$ разложена на множители, один из которых (β'/ρ^2) зависит только от деформации, а второй $[L_0/\exp(-\mu_{ds0}t)]$ представляет собой отношение структурно-чувствительных дифракционных параметров, выражения для которых через характеристики дефектов получены авторами настоящей работы ранее [18]. В табл. 5 приведены не зависящие от характеристик СРНД и степени асимметрии универсальные коэффициенты деформационных поправок к L_0 и к факторам экстинкции $\exp(-\mu_{ds0}t)$ и $\exp(-\mu_{0}^*t)$ для деформационных зависимостей ПИОС упруго изогнутых монокристаллов Si, полученных при использовании 220 симметричных Лауэ-отражений MoK_{α} -излучения.

Таблица 5

Нормированные (независящие от СРНД) коэффициенты поправок α'/ρ^2 , α_1'/ρ , β'/ρ^2 и δ'/ρ^2 к L_0 и к факторам экстинкции $\exp(-\mu_{ds0}t)$ и $\exp(-\mu_{0}^*t)$ для деформационных зависимостей ПИОС упруго изогнутых монокристаллов Si, полученные при использовании 220 симметричных Лауэ-отражений MoK_{α} -излучения.

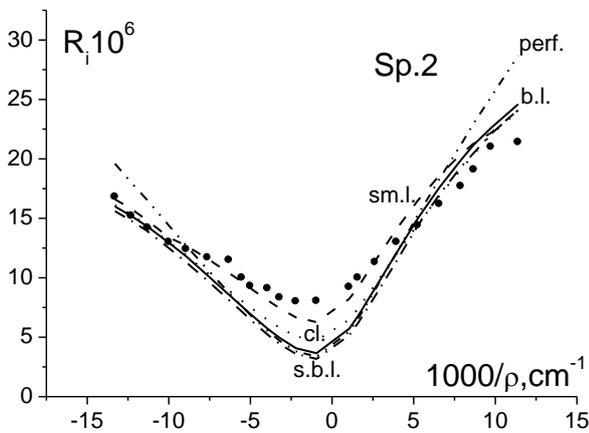
| α' | α_1' , мкм | β' , мкм ³ | δ' , мкм ² |
|-----------|-------------------|-------------------------------|------------------------------|
| -1 | $-1,4 \cdot 10^3$ | $(1,8 \pm 0,7) \cdot 10^{12}$ | $-(1 \pm 0,1) \cdot 10^{11}$ |

Таким образом, доказана возможность разделения влияния на ПИОС СРНД и УД и получены не зависящие от характеристик СРНД универсальные коэффициенты деформационных поправок к L_0 и к факторам экстинкции $\exp(-\mu_{ds0}t)$ и $\exp(-\mu_{0}^*t)$ для деформационных зависимостей ПИОС упруго изогнутых монокристаллов Si, при использовании 220 Лауэ-отражений MoK_{α} -излучения. Следует отметить, что в работе [27] эмпирически установлен вид зависимостей множителей к универсальным поправкам от факторов динамического рассеяния в неизогнутом монокристалле с СРНД L_0 , $\exp(-\mu_{ds0}t)$ и $\exp(-\mu_{0}^*t)$, которые, в свою очередь, зависят от типа, размера и концентрации СРНД. Однако, как известно [18], L_0 , μ_{ds0} и μ_{0}^* в образцах с несколькими определяющими типами СРНД представляют собой суммы соответствующих факторов дефектов всех определяющих типов. Поэтому полученные в настоящем разделе количественные характеристики совместного влияния изгиба и СРНД являются суммарными для различных содержащихся в монокристаллах СРНД. Исследованию зависимости указанных характеристик от типа, размера и концентрации СРНД посвящен следующий раздел.

5. Изучение совместного влияния изгиба и СРНД различных типов и размеров на величину ПИОС

На рис. 12 и 13 для образцов 2 и 3 представлены деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные отдельно для каждого из трех определяющих типов СРНД при использовании выражений (1) – (12). Из рис. 12 и 13 видно, что для обоих образцов влияние на величину ПИОС больших и сверхбольших дислокационных петель относительно невелико. При этом для образца 2 ближе всего к экспериментальной деформационной зависимости ПИОС проходит рассчитанная деформационная зависимость для наноразмерных в трех измерениях петель, а для образца 3 – рассчитанная деформационная зависимость для дискообразных кластеров с наноразмерной толщиной h .

Как указано выше, процедура фитирования экспериментально полученных деформационных зависимостей ПИОС включает в себя поиск значения радиуса кривизны критического изгиба ρ_k , среднего для всех СРНД определяющих типов в образце. В этом случае справедливо выражение (9). Однако используя выражения (11) и (12) для вычисления коэффициентов деформационных поправок к факторам экстинкции отдельно для СРНД каждого из трех оп-



двойной пунктир) и экспериментальная деформационная зависимость ПИОС (маркеры).

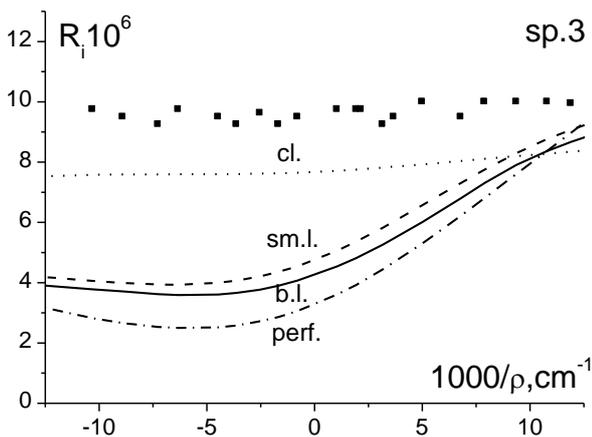


Рис. 12. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам (1)-(12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, для больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} – вектор Бюргера, a – параметр решетки) $R_{b.l.} = 0,45$ мкм, $c_{b.l.} = 5,2 \cdot 10^{-15}$ (сплошная линия); мелких дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ $R_{sm.l.} = 0,031$ мкм, $c_{sm.l.} = 1,43 \cdot 10^{-10}$ (штриховая линия); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{cl.} = 0,45$ мкм, $h_{cl.} = 0,0116$ мкм, $c_{cl.} = 2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир) и сверхбольших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ $R_{s.b.l.} = 10$ мкм, $c_{s.b.l.} = 2,4 \cdot 10^{-19}$ (штрих-пунктир); деформационная зависимость ИОС кристалла без СРНД (штрих-двойной пунктир) и экспериментальная деформационная зависимость ПИОС (маркеры).

Рис. 13. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам (1)-(12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, для больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} – вектор Бюргера, a – параметр решетки), $R_{b.l.} = 0,667$ мкм; $c_{b.l.} = 6,2 \cdot 10^{-15}$ (сплошная линия); мелких дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$, $R_{sm.l.} = 0,0057$ мкм, $c_{sm.l.} = 1,11 \cdot 10^{-8}$ (штриховая линия); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{cl.} = 0,667$ мкм, $h_{cl.} = 0,0138$ мкм, $c_{cl.} = 2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир); деформационная зависимость ИОС кристалла без СРНД (штрих-пунктир) и экспериментальная деформационная зависимость ПИОС (маркеры).

ределяющих типов авторы настоящей работы получили три разных значения ρ_k . При этом расчеты показали, что, несмотря на то, что для мелких петель ρ_k намного больше, чем для

кластеров, хорошего совпадения с экспериментальными деформационными зависимостями удается добиться, только полагая для всех дефектов $\rho_k = 0,4\rho_0$.

Рис. 14 и 15 иллюстрируют природу описанной выше неаддитивности. Присутствие СРНД влияет как на когерентную, так и на диффузную компоненты ПИОС. При этом знак влияния различен. Кроме того, абсолютная величина этого влияния для когерентной составляющей растет, а для диффузной уменьшается с увеличением степени упругого изгиба. Наи-

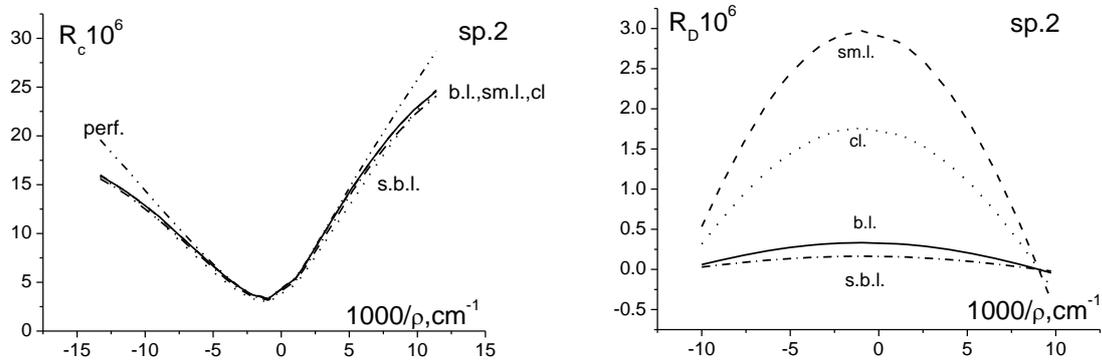


Рис. 14. Деформационные зависимости когерентной (R_C) и диффузной (R_D) составляющих ПИОС, рассчитанные по формулам (1)-(12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, для больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} – вектор Бюргерса, a – параметр решетки), $R_{bl} = 0,45$ мкм, $c_{bl} = 5,2 \cdot 10^{-15}$ (сплошная линия); мелких дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ $R_{sm.l.} = 0,031$ мкм, $c_{sm.l.} = 1,43 \cdot 10^{-10}$ (штриховая линия); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{cl} = 0,45$ мкм, $h_{cl} = 0,0116$ мкм, $c_{cl} = 2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир) и сверхбольших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$, $R_{s.b.l.} = 10$ мкм, $c_{s.b.l.} = 2,4 \cdot 10^{-19}$ (штрих-пунктир); деформационная зависимость ИОС кристалла без СРНД (штрих-двойной пунктир).

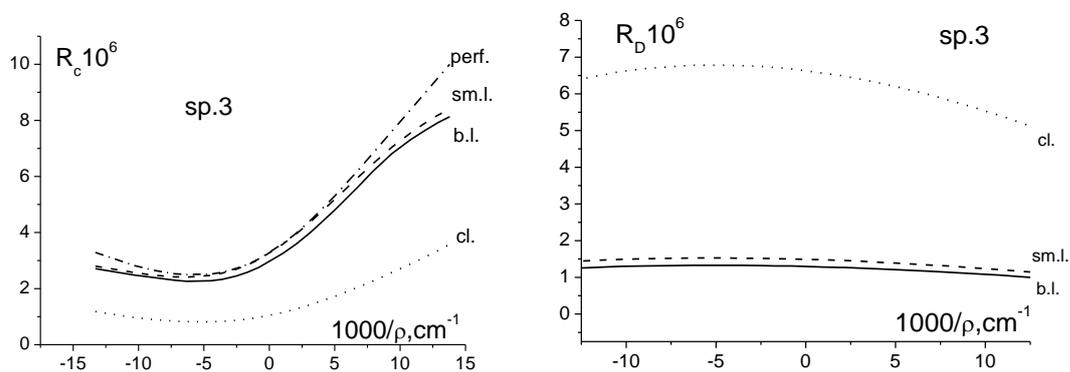


Рис. 15. Деформационные зависимости когерентной (R_C) и диффузной (R_D) составляющих ПИОС, рассчитанные по формулам (1)-(12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, для больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} – вектор Бюргерса, a – параметр решетки), $R_{bl} = 0,667$ мкм; $c_{bl} = 6,2 \cdot 10^{-15}$ (сплошная линия); мелких дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$, $R_{sm.l.} = 0,0057$ мкм, $c_{sm.l.} = 1,11 \cdot 10^{-8}$ (штриховая линия); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{cl} = 0,667$ мкм, $h_{cl} = 0,0138$ мкм, $c_{cl} = 2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир); деформационная зависимость ИОС кристалла без СРНД (штрих-пунктир).

более ярко влияние СРНД иллюстрируют рис. 13 и 15, из которых видно, что экспериментально наблюдаемые и рассчитанные для кластеров значения величин ПИОС вследствие

влияния СРНД перестают зависеть от деформации из-за отмеченного разного характера этой зависимости для составляющих ПИОС.

Сравнение деформационных зависимостей ПИОС, рассчитанных отдельно для СРНД разных размеров, с деформационной зависимостью ИОС, рассчитанной для монокристалла без СРНД, показывает, что чем крупнее СРНД, тем ярче проявляется неаддитивность влияния СРНД и УД на ПИОС. Видно, что точка исчезновения чувствительности к дефектам зависит от радиуса дефектов: чувствительность ПИОС к кластерам и дислокационным петлям, радиусы которых одинаковы, исчезает при одной и той же степени упругого изгиба (см. рис. 12 и 13), несмотря на то, что степень их влияния на ПИОС резко различна. Из рис. 12 видно, что при относительно слабом влиянии малых дислокационных петель на ПИОС в отсутствие изгиба, их присутствие в образце заметно сдвигает точку исчезновения чувствительности ПИОС к дефектам в сторону большей степени деформации.

На рис. 16-18 показаны деформационные зависимости отношения ПИОС изогнутого реального монокристалла к ПИОС изогнутого монокристалла без СРНД.

Из рис. 16 видно, что максимальные отклонения кривой от единицы в сторону увеличения наблюдаются в центральной части кривых и демонстрируют существенное нарушение кинематического закона сохранения ПИОС за счет преобладания диффузной составляющей ПИОС над уменьшением из-за СРНД ее когерентной составляющей, а с ростом изгиба это преобладание уменьшается до нуля в точке потери чувствительности к СРНД (ρ_0) и далее изменяется знак и растет величина влияния СРНД на ПИОС из-за увеличивающегося преобладания уменьшения за счет СРНД когерентной составляющей ПИОС над диффузной составляющей.

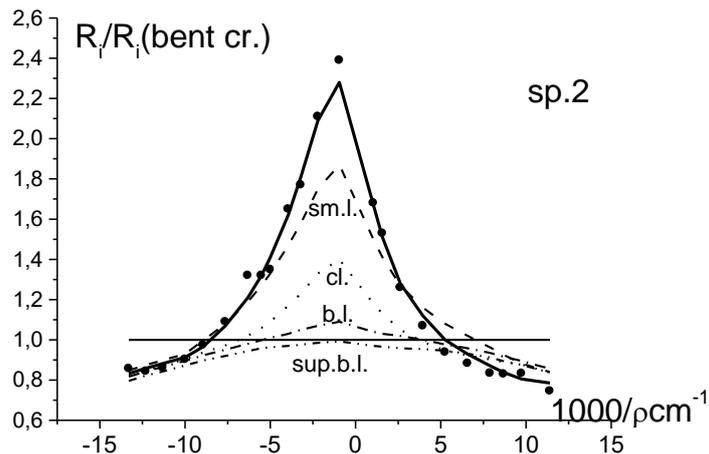


Рис. 16. Деформационные зависимости отношений ПИОС, рассчитанных по формулам (1)-(12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, к рассчитанным ИОС кристалла без СРНД (R_i/R_{perf}): для больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} – вектор Бюргерса, a – параметр решетки), $R_{\text{bl}} = 0,45$ мкм, $c_{\text{bl}} = 5,2 \cdot 10^{-15}$ (штрих-пунктир); мелких дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$, $R_{\text{sm.l.}} = 0,031$ мкм, $c_{\text{sm.l.}} = 1,43 \cdot 10^{-10}$ (штриховая линия); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{\text{cl}} = 0,45$ мкм, $h_{\text{cl}} = 0,0116$ мкм, $c_{\text{cl}} = 2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир), сверхбольших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$, $R_{\text{s.b.l.}} = 10$ мкм, $c_{\text{s.b.l.}} = 2,4 \cdot 10^{-19}$ (штрих-двойной пунктир); для кристалла без СРНД (сплошная линия) и экспериментальная деформационная зависимость отношений ПИОС к рассчитанным ИОС кристалла без СРНД (маркеры).

Из рис. 16 видно, что при слабом упругом изгибе, при $|\rho| > \rho_0$ преобладает влияние на величину ПИОС мелких дефектов, а при сильном упругом изгибе, при $|\rho| < \rho_0$ преобладает вли-

яние на величину ПИОС крупных дефектов. Поэтому для получения характеристик крупных дефектов необходимо исследование хода деформационных зависимостей образцов при упругих изгибах, соответствующих $|\rho| < \rho_0$.

Анализ выражения (13) показывает, что для выполнения указанного условия можно не увеличивая степени изгиба использовать рефлекс с большей степенью асимметрии. Ниже будет показано, что анализ деформационных зависимостей ПИОС, полученных для одного и того же образца при использовании двух 220 Лауэ-рефлексов $MoK_{\alpha 1}$ -излучения от плоскостей, составляющих резко различные углы ψ с нормалью к поверхности кристалла, позволяет получить величины характеристик мелких и крупных СРНД. Такую же неразрушающую количественную диагностику дефектной структуры динамически рассеивающего реального монокристалла можно осуществить комбинированным методом толщинных и азимутальных зависимостей ПИОС [18]. Но метод деформационных зависимостей ПИОС, как будет показано ниже, более чувствителен к типу СРНД. Причина повышенной чувствительности к типу дефектов обусловлена описанным выше влиянием упругой деформации на коэффициенты экстинкции.

Из рис. 17 и 18 видно, что изменение знака влияния больших петель и кластеров, имеющих одинаковый радиус, на величину ПИОС происходит при одинаково сильном положительном изгибе. Кроме того, видно, что для двух данных образцов, независимо от степени асимметрии используемого отражения, наблюдается намного большее относительное увеличение ПИОС за счет присутствия кластеров по сравнению с большими дислокационными петлями. Однако при сильном изгибе, вызвавшем изменение знака влияния СРНД (при

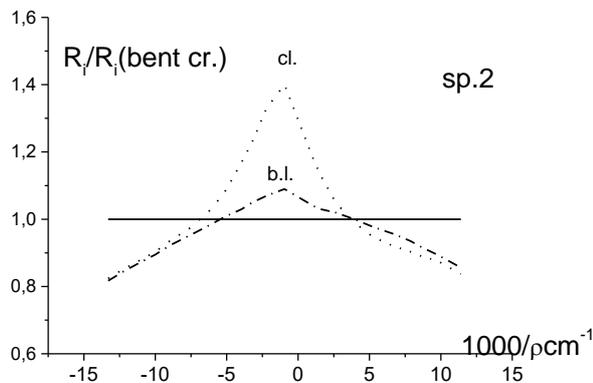


Рис. 17. Деформационные зависимости отношений ПИОС, рассчитанных по формулам (1)-(12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, к рассчитанным ИОС кристалла без СРНД ($R_i/R_{perf.}$): для больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} – вектор Бюргерса, a – параметр решетки), $R_{bl} = 0,45$ мкм, $c_{bl} = 5,2 \cdot 10^{-15}$ (штрих-пунктир); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{cl} = 0,45$ мкм, $h_{cl} = 0,0116$ мкм, $c_{cl} = 2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир) и для кристалла без СРНД (сплошная линия).

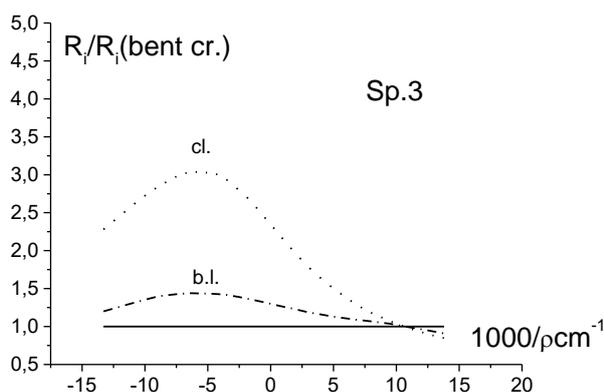


Рис. 18. Деформационные зависимости отношений ПИОС, рассчитанных по формулам (1)-(12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, к рассчитанным ИОС кристалла без СРНД ($R_i/R_{perf.}$): для больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} – вектор Бюргерса, a – параметр решетки), $R_{bl} = 0,667$ мкм, $c_{bl} = 6,2 \cdot 10^{-15}$ (штрих-пунктир); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{cl} = 0,667$ мкм, $h_{cl} = 0,0138$ мкм, $c_{cl} = 2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир) и для кристалла без СРНД (сплошная линия).

Таблица 6

Значения критического радиуса кривизны УИ (ρ_k), радиуса кривизны УИ, при котором исчезает чувствительность ПИОС к СРНД (ρ_0), полученные при фитировании деформационных зависимостей ПИОС для образца 4

| $\psi, ^\circ$ | $\rho_0^{(+)}, \text{мкм}$ | $\rho_k, \text{мкм}$ |
|----------------|----------------------------|----------------------|
| 1,5 | $2,193 \cdot 10^5$ | $8,77 \cdot 10^4$ |
| 53,2 | $4,89 \cdot 10^6$ | $1,96 \cdot 10^6$ |

$|\rho| < \rho_0$), уменьшение величины ПИОС за счет наличия кластеров и дислокационных петель становится практически одинаковым. Это позволяет путем анализа двух деформационных зависимостей с резко различными значениями ψ однозначно определить тип и величины характеристик СРНД.

6. Использование деформационных зависимостей ПИОС для диагностики СРНД в монокристалле

Образец 4, толщиной 500 мкм, был вырезан из монокристалла Si, выращенного по Чохральскому с начальным содержанием кислорода $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$. В результате отжига в образце произошел распад твердого раствора кислорода с образованием кластеров, концентрация которых, согласно данным избирательного травления, составила $n = 10^6 \text{ см}^{-2}$ [6]. О дефектной структуре образца в отсутствие УИ известно, что она должна соответствовать одной из двух моделей, предложенных автором работы [24]. Первая модель предполагает наличие случайно распределенных в объеме образца дискообразных кластеров SiO_2 , радиус и толщина которых увеличиваются с увеличением времени отжига по установленному в работе [24] закону, а также дислокационных петель, образованных в результате конденсации собственных междоузельных атомов избыточного кремния в образце. Вторая модель предполагала наличие случайно распределенных в объеме образца сферических кластеров SiO_2 и дислокационных петель, образованных в результате конденсации собственных междоузельных атомов избыточного кремния в образце.

Авторами работы [6] для образца 4 были получены деформационные зависимости ПИОС при использовании 220 Лауэ-отражений MoK_α -излучения от двух плоскостей, образующих разные углы с нормалью к поверхности кристалла: $\psi_1 = 1,5^\circ$ и $\psi_2 = 53,2^\circ$.

Путем сравнения указанных экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС с рассчитанными деформационными зависимостями для упруго изогнутого кристалла, не содержащего СРНД, авторами настоящей работы для образца 4 получены значения ρ_0 , а затем из выражений (8)-(10) вычислены значения ρ_k , представленные в табл. 6.

Из данных табл. 6 видно, что значения величин критического радиуса кривизны изгиба ρ_k для использованных рефлексов различаются больше, чем на порядок. При слабой степени асимметрии используемого отражения ($\psi = 1,5^\circ$) вся экспериментальная деформационная зависимость ПИОС соответствует интервалу $|\rho| > \rho_k$, а при сильной степени асимметрии используемого отражения ($\psi = 53,2^\circ$) вся экспериментальная деформационная зависимость ПИОС соответствует интервалу $|\rho| < \rho_k$. В работе [25] расчеты деформационных зависимостей без учета влияния УИ на диффузное рассеяние показали, что при сильной асимметрии используемого отражения чувствительность ПИОС к микродефектам растет при усилении упругого изгиба и проявляется в заметном уменьшении когерентной составляющей ПИОС пропорционально $\exp(-\mu_{ds} \rho t)$.

Однако экспериментальная деформационная зависимость ПИОС, полученная авторами работы [6] при $\psi_2 = 53,2^\circ$, практически совпадает с рассчитанной для идеального кристалла. Это объясняется тем, что, при учете влияния УД согласно модели, предложенной авторами настоящей работы в работе [23], при $|\rho| < \rho_k$ фактор эффективного поглощения для когерентной составляющей ПИОС становится равным фактору эффективного поглощения для диффузной составляющей ПИОС: $\exp(-\mu_{ds}t) = \exp(-\mu^*t)$. Сравнительно малое максимальное при $\delta = -1,3 \cdot 10^{10}$ значение величины поправки $(1 - \delta/\rho^2) = (1 - 0,036) = 0,964$ указывает на то, что реальное уменьшение ПИОС по сравнению с идеальным кристаллом должно быть на самом деле гораздо менее заметным, т.е. предполагаемое в [25] повышение чувствительности к СР микродефектам и к СРНД нивелируется.

Однако, фитирование теоретической и экспериментальной деформационных зависимостей ПИОС для образца 4, полученных при $\psi_1 = 1,5^\circ$, было осуществлено при использовании взятых из табл. 5 значений коэффициентов поправок к факторам экстинкции (α_1/ρ и δ/ρ^2) и значений нормированных коэффициентов поправок α'/ρ^2 и β'/ρ^2 . На рис. 19 сплошной линией изображены деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные в рамках первой и второй моделей дефектной структуры с учетом влияния деформации на диффузное рассеяние.

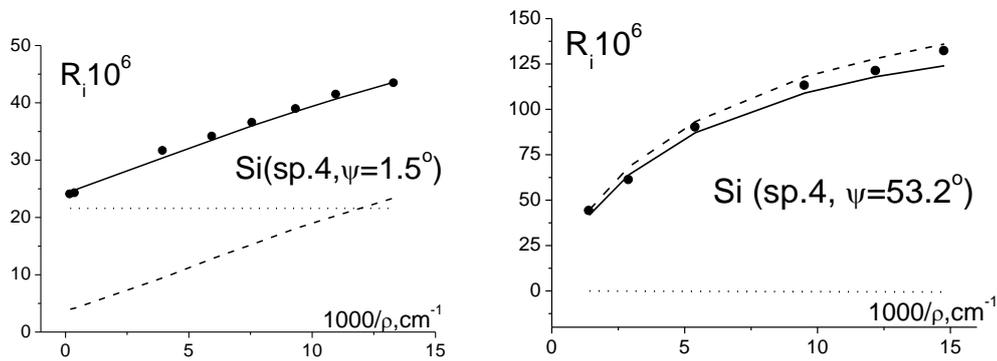


Рис. 19а. Экспериментальные зависимости ПИОС (маркеры) и теоретические зависимости ИОС бездефектного изогнутого монокристалла (штрих), рассчитанные с учетом влияния УИ на диффузное рассеяние в рамках модели 1, предполагающей наличие в исследуемом образце дискообразных кластеров ($R_{cl} = 0,22$ мкм, $h_{cl} = 8,4$ нм, $c_{cl} = 8 \cdot 10^{-13}$) и наноразмерных петель ($R_{sl} = 32$ нм, $c_{sl} = 8,5 \cdot 10^{-10}$) (при $\mu_{ds0}/\mu_0^* = 6,26$) зависимости ПИОС (сплошные линии) и диффузной составляющей ПИОС R_D (пунктир).

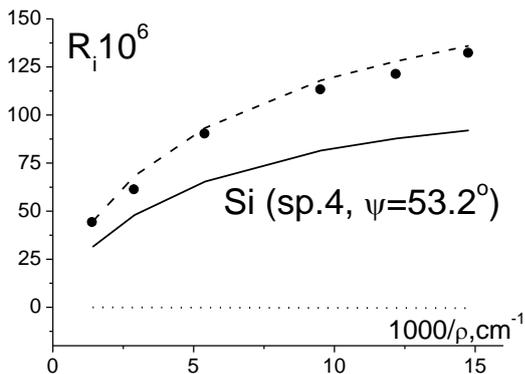


Рис. 19б. Экспериментальные зависимости ПИОС (маркеры) и теоретические зависимости ИОС бездефектного изогнутого монокристалла (штрих), рассчитанные с учетом влияния УИ на диффузное рассеяние в рамках модели 2, предполагающей наличие в исследуемом образце сферических кластеров ($R_{cl} = 72$ нм) и призматических дислокационных петель ($R_l = 0,22$ мкм, $c_l = 1,5 \cdot 10^{-13}$) (при $\mu_{ds0}/\mu_0^* = 3,43$) зависимости ПИОС (сплошные линии) и диффузной составляющей ПИОС R_D (пунктир).

Из рис. 19 видно, что фитирование деформационных зависимостей ПИОС, полученных при использовании только отражения со слабой

степенью асимметрии ($\psi_1 = 1,5^\circ$), не позволяет установить тип СРНД, присутствующих в исследуемом образце. Однако совместное фитирование деформационных зависимостей, полученных при использовании рефлексов с различной степенью асимметрии, позволило однозначно определить, что наноразмерными являются дислокационные петли.

Из рис. 19 видно, что экспериментальные деформационные зависимости ПИОС совпадают с рассчитанными с учетом зависимости диффузного рассеяния от деформации только для первой модели при $\mu_{\text{dso}}/\mu^*_0 = 6,26$ (рис. 19а). В этом случае в рамках модели 1 для образца 4 определены следующие значения средних радиусов и концентраций дискообразных кластеров, больших петель и наноразмерных петель:

$$R_{cL} = 0,22 \text{ мкм}, h_{cL} = 8,4 \text{ нм}, c_{cL} = 8 \cdot 10^{-13}, R_{sL} = 32 \text{ нм}, c_{sL} = 8,5 \cdot 10^{-10}.$$

Полученное значение величины концентрации кластеров согласно выводам работы [26] соответствует температуре отжига 896°C . Известно, что при температуре отжига ниже 900°C не происходит образование больших дислокационных петель, радиус которых превышает радиус выдавливающих их кластеров. Таким образом, полученные в рамках модели 1 размеры кластеров согласуются с тем фактом, что они наблюдались в данном образце методом избирательного травления авторами работы [6]. Наличие в исследуемом образце наноразмерных петель, размеры и концентрация которых определены в настоящей работе, не могло быть зафиксировано методом избирательного травления. При отсутствии влияния УД на диффузное рассеяние наличие в образце кластеров с указанными характеристиками должно было бы приводить к заметному уменьшению ПИОС по сравнению с идеальным кристаллом при использовании резко асимметричного отражения.

На рис 20 сплошной линией изображены деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные в рамках первой модели дефектной структуры без учета влияния деформации на диффузное рассеяние при следующих значениях средних радиусов и концентраций дискообразных кластеров, и малых петель:

$$R_{cL} = 0,22 \text{ мкм}, R_{cL}/h_{cL} = 26,05, c_{cL} = 8,7 \cdot 10^{-13}, R_{sL} = 0,032 \text{ мкм}, c_{sL} = 9,24 \cdot 10^{-10}.$$

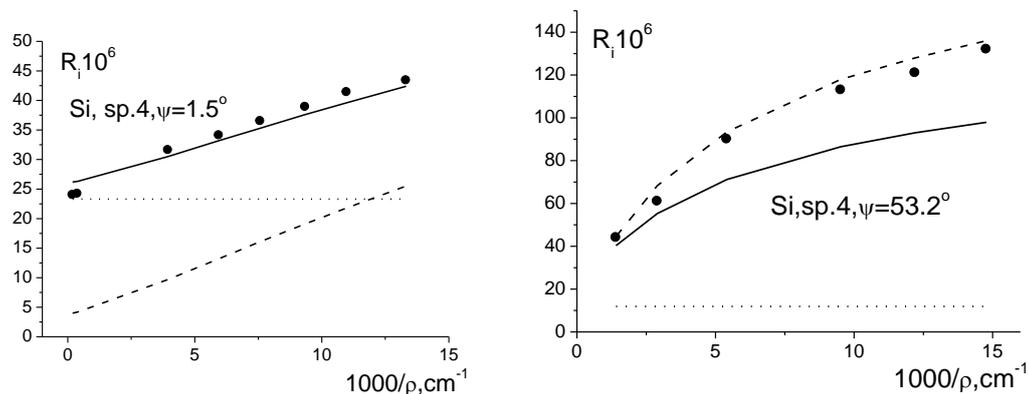


Рис. 20. Экспериментальные зависимости ПИОС (маркеры) и теоретические зависимости ИОС бездефектного изогнутого монокристалла (штрих), рассчитанные без учета влияния УИ на диффузное рассеяние в рамках модели 1, предполагающей наличие в исследуемом образце дискообразных кластеров ($R_{cl} = 0,22 \text{ мкм}$, $h_{cl} = 8,4 \text{ нм}$, $c_{cl} = 8,7 \cdot 10^{-13}$) и наноразмерных петель ($R_{sl} = 32 \text{ нм}$, $c_{sl} = 9,2 \cdot 10^{-10}$) зависимости ПИОС (сплошные линии) и диффузной составляющей ПИОС R_D (пунктир).

Следует отметить, что расхождение расчета с экспериментом, показанное на рис. 20, наблюдается для деформационных зависимостей, рассчитанных без учета зависимости диффузного рассеяния от деформации в рамках обеих моделей дефектной структуры, что экспе-

риментально подтверждает необходимость учета деформационных поправок, найденных в настоящей работе.

Определены тип и характеристики СРНД, не наблюдаемых методами избирательного травления и рентгеновской топографии.

Литература

1. Kato N. J. Phys. Soc. Jap., **19**, № 6: 971 (1964).
2. Chukhovskii F.N., Petrashen P.V. Acta crystallogr. A., **33**, № 2: 311 (1977).
3. Kato N. X-ray diffraction (Ed. By L.V. Azaroff, R. KarLow, N.Kato et al. – New York: John Wiley 1974).
4. Kalman Z.N., Weissmann S. J. Appl. Crystallogr., **12**, № 2: 209 (1979).
5. Хрупа В.И., Кисловский Е.Н., Даценко Л.И., Металлофизика, **2**, № 4: 55 (1980).
6. Хрупа В.И., Даценко Л.И., Кисловский Е.Н., Васильковский А.С., Металлофизика, **6**, № 6: 70 (1984).
7. Khrupa V.I., Kislovskii E.N., Datsenko L.I., Phys. Status solidi, **63**, № 1: 439 (1981).
8. Matsushita Y., Kishino S., Kanamori M., Jap. J. Appl. Phys., **19**, № 2: L101 (1980).
9. Даценко Л.И., Молодкин В.Б., Осиновский М.Е., Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами (Киев: Наук. Думка, 1988).
10. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Osinovskii M.E. et al., Phys. Status solidi A, **87**, № 2: 597 (1985).
11. Кушнир В.И., Суворов Э.В., Мухин К.Ю., ФТТ, **22**, № 7: 2435 (1980).
12. Datsenko L.I., Kislovskii E.N., Phys. Status solidi, **25**, № 2: 551 (1974).
13. Петрашень П.В., Металлофизика, **8**, № 1: 35 (1986).
14. Петрашень П.В., Чуховский Ф.Н., Металлофизика, **8**, № 3: 45 (1986).
15. Николаев В.В., Олиховский С.И., Осиновский М.Е., Хрупа В.И., Металлофизика, **11**, № 2: 52 (1989).
16. Гринь Г.В., Кисловский Е.Н., Петрашень П.В., Разумовский А.Ю., Металлофизика, **12**, № 5: 113 (1990).
17. Кисловский Е.Н., Даценко Л.И., Молодкин В.Б. и др., Металлофизика, **12**, № 6: 37 (1990).
18. Молодкин В.Б., Немошкаленко В.В., Низкова А.И. и др., Металлофизика и новейшие технологии, **22**, № 3: 3 (2000).
19. Borghesi A., Pivac B., Sassela A., and Stella A., J. Appl. Phys., **77**, № 9: 4169 (1995).
20. Kostyuk A.N., Molodkin V.B., and Olikhovskii S.I., Phys. Status Solidi B, **178**, No.1: 45 (1993).
21. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., and Kostyuk A.N., Phys. Status Solidi B, **183**, No.1: 59 (1993).
22. Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Костюк А.Н., Ткачук Л.Г., Металлофизика и новейшие технологии, **23**, №7: 861 (2001).
23. Молодкин В.Б., Низкова А.И., Олиховский С.И. и др., Металлофиз. Новейшие технол. **25**, №1: 107 (2003).
24. Hu S.M., Appl. Phys. Lett., **48**, №2: 115 (1986).
25. Молодкин В.Б., Низкова А.И., Олиховский С.И. и др., Металлофиз. Новейшие технол. **24**, №11: 1483 (2002).
26. Livingston F.M., Messoloras S., Newman R.C., Pike B.C., Stewart R.J., Binns W.J., Brown W.P., and Wilkes J.G., J. Phys. **17**, p.6253 (1984).
27. Молодкин В.Б., Низкова А.И., Рудницкая И.И. и др., Металлофиз. Новейшие технол. **25**, №11: (2003).

The influence of nanodimensional defects and elastic curving on X-ray dynamic scattering on crystals

V.B. Molodkin, A.I. Nizkova

Institute of Metallophysic, Ukraine National Academy of Science, Kiev

Abstract. With the aim of development of the new high-informative diagnostics methods of the randomly distributed nanodimensional defects (RDND), which are invisible by common nondestructive methods, as the X-ray topography, for which such small or in one dimension or in three dimensions defects are appeared outside the method sensitivity Limits, physical basics of method of the total integrated reflective power (TIRP) deformation dependences, which appear unique sensitive to RDND, are developed.

The deformation dependence presence is for the first time theoretically and experimentally proved for the diffuse scattering integral intensity, for the extinction coefficients, caused by scattering on microdefects, of both coherent (μ_s) and diffuse (μ^*) components of TIRP and of the effective static Debye-Waller factor, which index is considered to be proportional to the integrated intensity of diffuse scattering.

The nature of possible mechanisms of both additive and unadditive influence of the elastic deformations (ED) and of RDND on TIRP at the various degrees of the reflection asymmetry was established, which give the possibility of the essential strengthening of the ED influence on the TIRP. It is shown, that the unadditiveness of the mutual influence of the RDND and ED on the TIRP value of the Laue-reflections exhibits the Large in two dimensions RDND presence. The Large in two dimensions RDND influence on the TIRP value becomes comparable with the elastic deformation influence at the any bend strength and at the any asymmetry degree of the used Laue-reflections due to the essential role of extinction effects caused by the scattering at those RDND and due to the relative growth of their influence on the TIRP with the ED growth. Small in three dimensions defects at the any degree of the reflections asymmetry cause the additive influence of the RDND and ED on the TIRP value due to the weak exhibition of the pointed extinction effects for them.

It is proved the possibility of separation of influence on TIRP from the RDND and only from elastic deformation (ED). Influences are separated by division of the expressions for TIRP on factors, which are dependent only on the RDND characteristics and only on ED. In addition for the first time empirically the amendments to the deformation dependences of the Bragg and diffuse TIRP contributions have been separated on factors, which are dependent only on the RDND characteristics and only on ED. In this case the pointed amendments dependence on the RDND characteristics have been found in an explicit form. This for the first time gives the possibility for the adequate quantitative determination of the RDND characteristics by fitting of the TIRP theoretical and experimental deformation dependences.

УДК 539.26:621.382

Качество монокристаллического кремния и некоторые проблемы рентгеновской интерферометрии

К.Б. Фрицлер, Е.М. Труханов, В.В. Калинин, А.Т. Дрофа, А.П. Василенко,
А.В. Колесников, А.А. Федоров

Институт физики полупроводников СО РАН

Во взаимной связи рассмотрены некоторые вопросы технологии получения высокосовершенного монокристаллического кремния и рентгеновской интерферометрии – прецизионного и перспективного метода исследования структурного состояния низкодефектных кристаллов. Представлены результаты рентгеновских топографических и металлографических исследований дефектов, возникающих при росте кремния методом бестигельной зонной плавки. Сформулирована задача поиска возможностей *in situ* контроля структурного состояния монокристалла и задача *ex situ* исследований природы кластеров – потенциальных источников дислокаций в растущем кристалле. Дан краткий обзор работ по интерференционной топографии эпитаксиальных систем, содержащих недифрагирующий разделительный слой. Проблема интерпретации муаровых картин, наблюдаемых на топограммах от эпитаксиальных систем – интерферометров, обсуждаются в рамках двух известных в литературе моделей описания контраста.

1. Объемная рентгеновская интерферометрия и контроль качества монокристаллического кремния

Полупроводниковый кремний является наиболее совершенным из выращиваемых массивных монокристаллов. Уже в 60-е годы XX века технология получения монокристаллического кремния достигла такого уровня, что оказалось возможным изготовление рентгеновских интерферометров. Дальнейшее развитие рентгеновской интерферометрии и совершенствование технологии выращивания кремния оказались тесно взаимосвязанными. Первые рентгеновские интерферометры, работающие в режимах на прохождение (т.е. по Лауэ, как показано на рис. 1а и рис. 2а), и на отражение (т.е. по Брэггу), были получены и исследованы Бонзе и Хартом [1, 2]. В простейшем случае для получения интерферометра используется

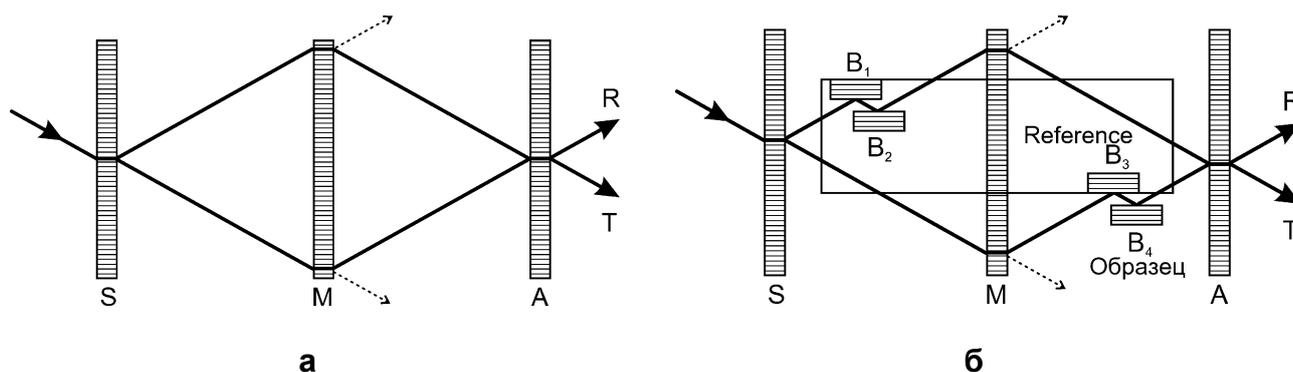


Рис. 1. Схематическое изображение рентгеновского интерферометра; а) интерферометр Бонзе – Харта на прохождение; б) усовершенствованная схема (а), реализующая возможности интерферометра Майкельсона.

единый кристалл кремния, из которого с помощью пропилов и последующего химического травления приготавливаются три жестко связанные пластины (расщепитель S, зеркало M и анализатор A), как схематично показано на рис. 1а. К одному из наиболее ярких результатов, полученных уже в первые годы применения рентгеновских интерферометров, следует отнести регистрацию явления трансляционного муара. Если пластину-анализатор двигать в направлении, указанном стрелкой (рис. 2а), то интенсивности прошедшего (Т) и отраженного (R) пучков будут изменяться в противофазе с периодом, равным межплоскостному расстоянию (рис. 2б). Максимумам и минимумам пучков соответствуют когерентные и наиболее рассогласованные положения атомных плоскостей анализатора и зеркала, как показано на

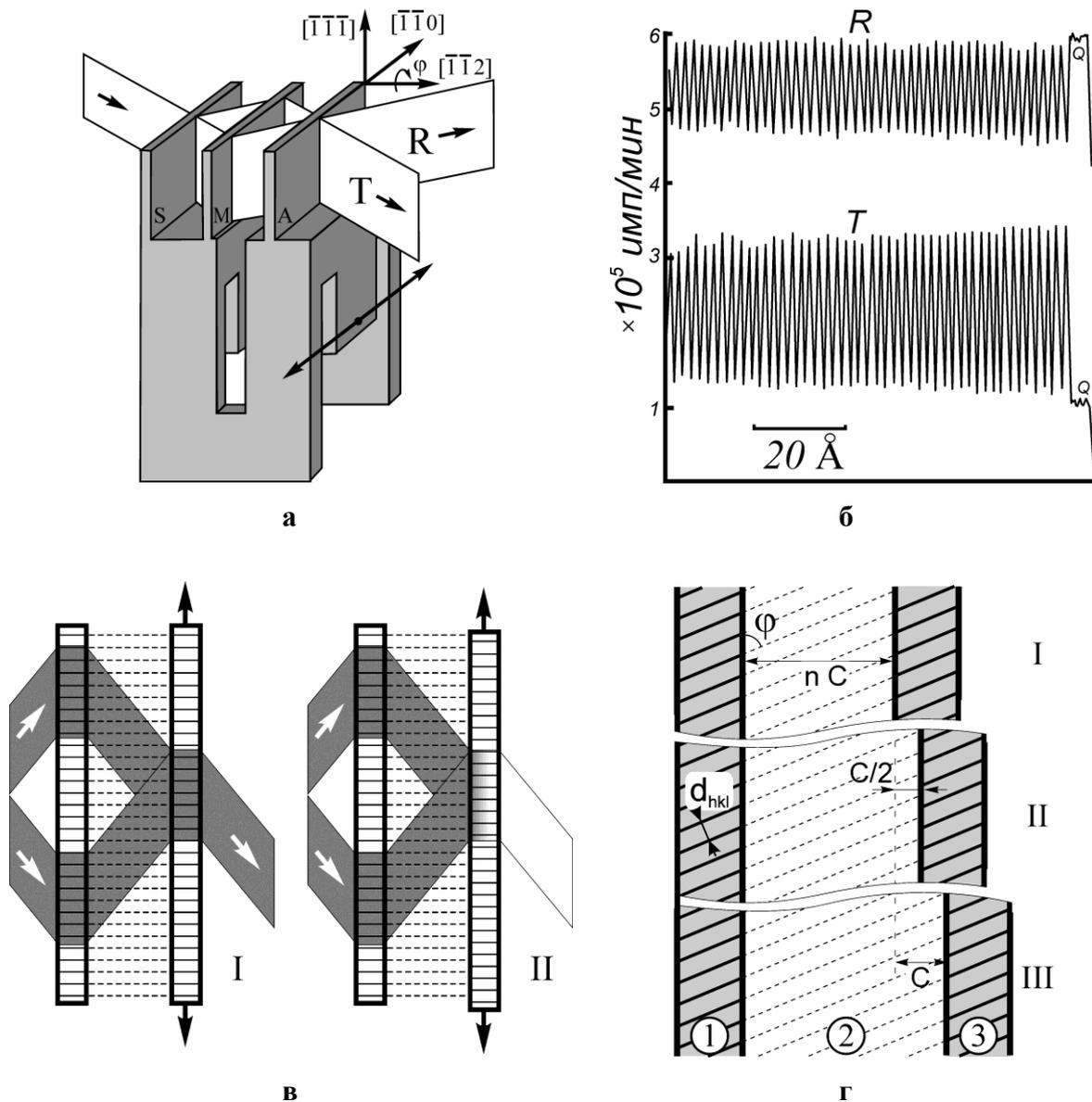


Рис. 2. Регистрация трансляционного муара с помощью рентгеновского интерферометра на прохождении; а) схема интерферометра; б) осцилляции интенсивности отраженного (R) и прошедшего (Т) рентгеновских пучков; в) взаимные положения атомных плоскостей анализатора и зеркала, соответствующие максимумам и минимумам интенсивности рентгеновских пучков (I – случай когерентного положения атомных плоскостей анализатора и зеркала, II – случай наиболее рассогласованного их положения); г) влияние расстояния между зеркалом и анализатором на трансляционный муар при дифракции от наклонных плоскостей.

схемах рис. 2в. Если изменять расстояние между зеркалом и анализатором, то величина трансляционной ошибки будет сохраняться постоянной, поскольку на рис. 2в представлен случай, когда отражающие плоскости зеркала и анализатора перпендикулярны поверхности пластины. В случае же дифракции от наклоненных плоскостей (рис. 2г) при изменении указанного расстояния будет меняться и ошибка, причем с периодом $C = d_{hkl} / \cos\varphi$, где φ – угол наклона рассматриваемых (hkl) плоскостей, имеющих межплоскостное расстояние d_{hkl} . На последнем рисунке через 1 и 3 обозначены, соответственно, зеркало и анализатор, а через 2 – недифрагирующий (вакуумный или воздушный) зазор.

Используя рассмотренные на рис. 2 возможности регистрации трансляционного муара Дислет [3] разработал устройство, состоящее из трехкристального рентгеновского и дополнительного оптического интерферометров, смонтированных на общей основе. Работа такого комбинированного прибора с одновременной записью по оптическому и рентгеновскому каналам позволила производить абсолютные определения линейных размеров до 50 мкм с ошибкой на уровне одного ангстрема.

К числу важных достижений интерферометрии за последние годы можно отнести разработку метода исследования неоднородного распределения примеси в сегрегационных слоях кремния, выполненную Бартчером и Бонзе [4]. Авторы данной работы использовали вариант интерферометра Майкельсона, установив между кристаллами М и А, а также между М и S (рис. 1а) по паре пластин, дифрагирующих на отражение (т.е. по Брэггу), как показано на рис. 1б. Пластины V_1 и V_2 первой пары могут быть приготовлены из единого куска кремниевого слитка и быть жестко связанными. Во второй паре пластин в качестве верхнего кристалла V_3 используется высокооднородный эталонный образец, а однородность нижнего кристалла V_4 в плоскости пластины является предметом исследования. Анализ интерференционного изображения на топограмме, записанного в пучке T или R, позволяет установить распределение примеси в сегрегационных полосах кремния. По данным [4], в рамках указанной методики можно выявлять неоднородности, обусловленные изменением концентрации примеси на уровне 10^{13} см^{-3} , что, несомненно, является уникальным результатом, способствующим развитию технологии получения высокосовершенного монокристаллического кремния.

2. Рентгеновские топографические и металлографические исследования дефектов, возникающих при росте монокристаллического кремния

Наиболее высокое структурное качество имеет кремний, выращенный на установках бестигельной зонной плавки (БЗП). Современное оборудование позволяет выращивать слитки диаметром до 200 мм и весом более 100 кг, не содержащие ни одной дислокации. На структурное состояние слитка заметное влияние оказывают такие факторы, как качество сырья (поликремний), степень легирования, состав газовой среды, скорости подачи и вращения растущего слитка, форма индуктора и состояние экранов, а также характеристики генератора, в первую очередь, выдаваемая им мощность. Хотя данные параметры сравнительно легко и надежно регистрируются, их значительное число влечет за собой необходимость четкого контроля структурного состояния монокристалла в процессе его роста. Однако, из-за высокой температуры плавления кремния (около 1420°C) возможности *in situ* измерений чрезвычайно ограничены. Фактически единственным способом контроля состояния растущей кристаллической фазы является наблюдение за морфологией боковой поверхности слитка.

Под действием сил поверхностного натяжения боковая поверхность расплава стремится стать строго цилиндрической, но форма поперечного сечения растущего слитка обычно отличается от окружности. На некоторых участках боковой поверхности слитка размер кристалла в направлениях, перпендикулярных оси роста, может как увеличиваться, так и уменьшаться. Основная причина этого – анизотропия скоростей роста. Кристаллы с решеткой алмаза медленнее всего растут в направлениях $\langle 111 \rangle$, поэтому в условиях, приближающихся

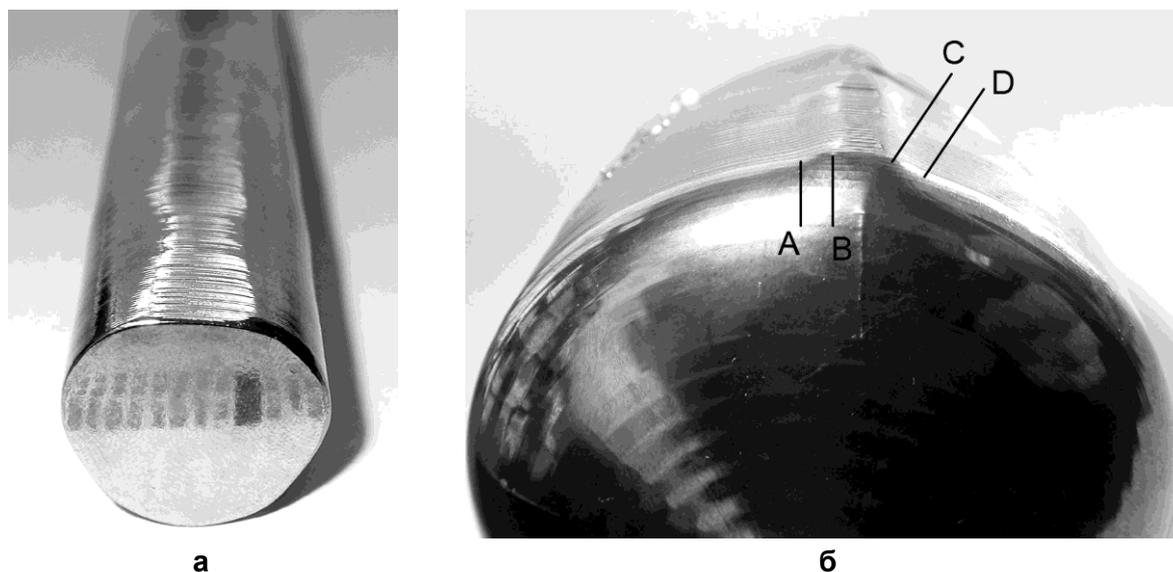


Рис. 3 Образование террас на боковой поверхности слитка в результате выхода плоскостей $\{111\}$, наклоненных к оси роста; а) террасы на поверхности слитка германия, выращенного по методу Чохральского; б) образование террас на ребре слитка кремния, выращенного по методу БЗП.

к равновесным, ограничиваются плоскостями $\{111\}$, приобретая форму октаэдра. В случае слитка, выращиваемого в направлении $[111]$, на его боковую поверхность выходят три семейства наклонных плоскостей $\{111\}$, которые образуют террасы. В результате медленного роста этих террас форма поперечного сечения слитка становится треугольником со скругленными вершинами, а боковая поверхность приобретает частичную огранку. Это явление выражено ярче, если фронт кристаллизации выгнут в сторону расплава, как при тигельном росте. У вытягиваемого из расплава слитка огранение проявляется тем сильнее, чем меньше поверхностное натяжение расплава. У германия огранка проявляется сильнее, чем у кремния. На рис. 3а представлена фотография монокристалла германия $[111]$, выращенного методом Чохральского. Террасы из плоскостей $\{111\}$ просматриваются на той части боковой поверхности, которая обращена кверху.

При выращивании кремния бестигельной зонной плавкой фронт кристаллизации имеет выпуклость в сторону растущей твердой фазы и огранка слитка почти исчезает. Однако ее место занимают ребра, представляющие собой выступы на боковой поверхности цилиндрического слитка. Они обусловлены ускоренным ростом слитка в определенных направлениях и вытянуты параллельно оси роста. Расположение и количество ребер определяется ориентацией выращиваемого кристалла и находятся следующим образом. Если провести через ось слитка нормали к наклонным плоскостям $\{111\}$, то те из нормалей, которые образуют острый угол с направлением роста, укажут положение ребра на боковой поверхности. Таким образом, на слитке с ориентацией $[111]$ присутствуют три ребра, расположенные через 120° по его окружности. Векторы, проведенные в плоскости поперечного сечения от оси роста к каждому из ребер, укажут кристаллографические направления $[11\bar{2}]$, $[\bar{2}11]$ и $[1\bar{2}1]$. Отметим, что эти же направления указывают грани на поверхности кристалла, когда фронт кристаллизации выгнут в сторону расплава. Последнее обстоятельство может объяснить встречающиеся на БЗП слитках комбинации морфологических особенностей, описанных в двух последних абзацах. Если предположить, что в окрестности ребра граница раздела жидкая – твердая фаза изменит направление выпуклости, то на ребре должны сформироваться террасы, как это показано на рис. 3б. Участки АВ и CD демонстрируют увеличение размера слитка в направлении, перпендикулярном оси роста в результате возникновения ребра. Однако уча-

сток ВС демонстрирует уменьшение указанного размера из-за образования террас в условиях, приближающихся к равновесным.

Исследования, представленные в данном разделе статьи, выполнены, в основном, на кристаллах БЗП кремния, полученных в ИФП СО РАН на установках FZ-20 (фирма Haldor Topse).

При росте БЗП кремния *in situ* контроль структурного качества кристалла заключается в выявлении состояния ребер на боковой поверхности слитка и периодичности их расположения. На морфологические особенности ребер сильно влияет присутствие в растущей твердой фазе таких дефектов структуры как дислокации или двойники. Если дислокации или двойники возникают в области оси слитка, то их влияние на форму ребер проявляется по мере приближения дефектной области к периферии кристалла. На рис. 4а представлено схематичное изображение слитка. Области цилиндрической затравки (ее диаметр обычно составляет около 7 мм) и цилиндрической части растущего слитка разделены шейкой и конусом. Из части конуса, выделенной на рис. 4а, была вырезана пластина толщиной 10 мм, перпендикулярная

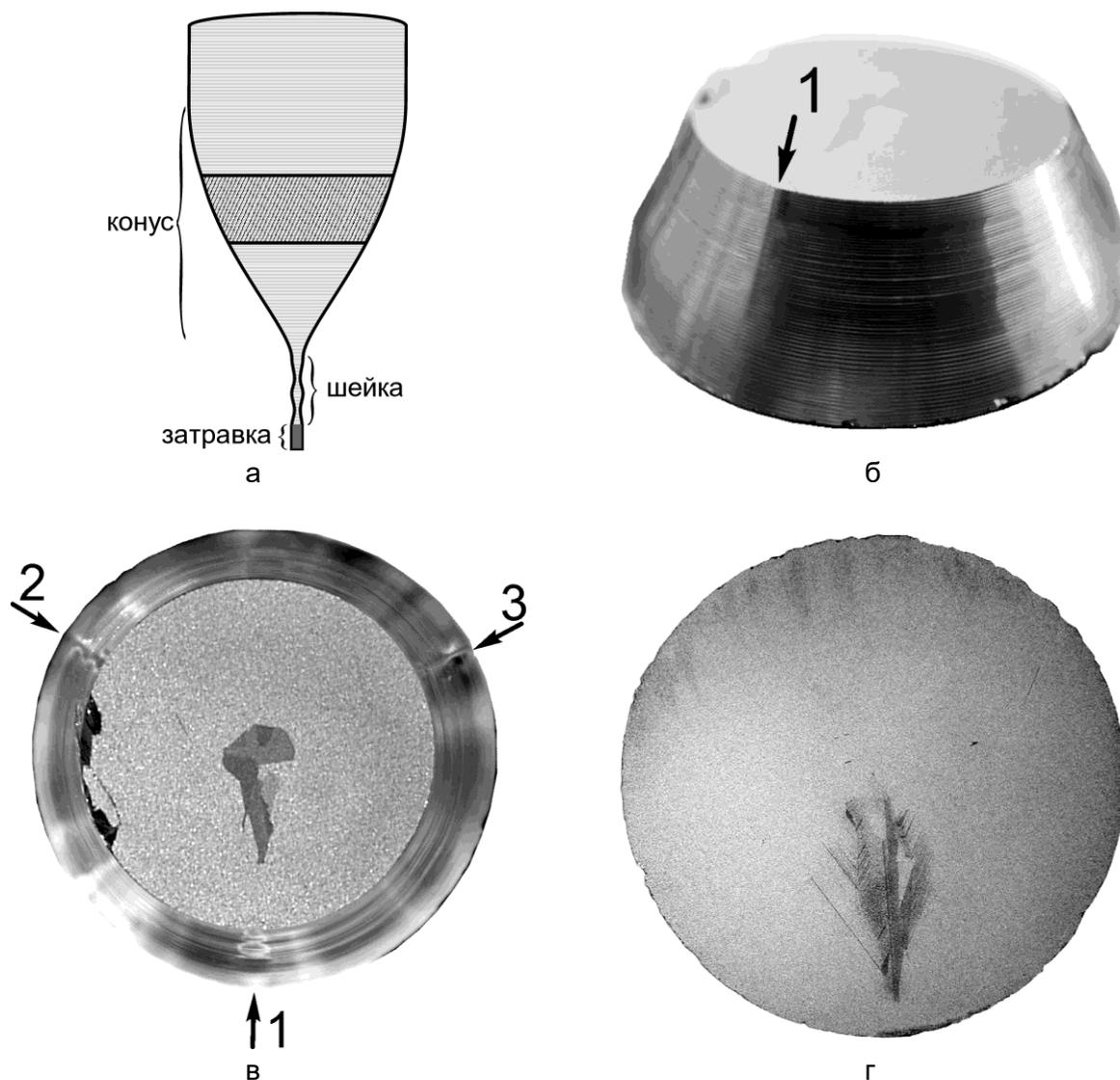


Рис. 4. Возникновение дефектной области вблизи оси роста слитка; а) схематическое изображение различных частей слитка (затравка, шейка, коническая и цилиндрическая части); б) шайба, вырезанная из конической части слитка и содержащая пропадающее ребро; в) и з) снимки поверхностей шайбы, обращенных к затравке (в) и к цилиндрической части слитка (з).

оси роста (рис. 4б). Оптический снимок (рис. 4в) получен от верхнего среза (111) усеченного конуса (рис. 4б), а снимок (рис. 4г) – от нижнего среза. На поверхностях срезов наблюдается дефектный участок. Как показали измерения, выполненные с помощью Лауэ съемок, он состоит из нескольких разориентированных монокристаллических блоков, разделенных двойниковыми и угловыми границами. Оценки показали, что максимальный уровень плотности дислокаций на отдельных участках достигает 10^8 см^{-2} . Данная дефектная область возникла в непосредственной близости от оси слитка и в ходе дальнейшего роста увеличилась в размерах и приблизилась к боковой поверхности. На рис. 4в стрелками указаны 3 ребра. Видно, что ребро 1 в области верхнего среза наблюдается, а в области нижнего среза, когда дефектный участок приблизился к боковой поверхности слитка, - отсутствует. Эволюция формы данного пропадающего ребра 1 более детально представлена на рис. 4б.

Возможны различные варианты двойникования кристаллов. На этапе выращивания шейки слитка (рис. 4а) может происходить двойникование по всему сечению кристалла без введения дислокаций (рис. 5а). Эта часть кристалла характерна тем, что имеет наименьший диаметр и максимальный градиент температур. Если двойникование проходит по плоскости (111), перпендикулярной оси роста, то тип кристаллографической ориентации сохраняется, и выращивание слитка можно продолжить. В случае двойникования по наклонной плоскости $\{111\}$ направление роста $[111]$ меняется на $\langle 115 \rangle$. Визуально это легко контролируется по изменению расположения ребер, поскольку у слитка появляются 4 несимметрично расположенных ребра (рис. 5б).

Уровень упругих термических напряжений в растущем кристалле находится в прямой зависимости от диаметра слитка. Так, при увеличении диаметра от 104 до 200 мм в аналогичных условиях роста величина максимальных напряжений увеличивается от 99 до 260 МПа [5, 6]. Увеличение уровня сдвиговых напряжений, действующих в плоскости скольжения дислокаций, приводит к тому, что все более мелкие скопления точечных дефектов (кластеры) могут становиться источниками новых дислокаций (источниками Франка-Рида с двумя закрепленными концами) [7]. Размер дислокационного источника D и уровень напряжений связаны зависимостью $D = 2W/(b\tau_b)$, где W – энергия дислокации единичной длины, b – величина вектора Бюргерса и τ_b – проекция на вектор Бюргерса сдвиговых напряжений, действующих в плоскости скольжения. При увеличении диаметра от 104 до 200 мм величина D уменьшается от 0.26 до 0.1 мкм.

По данным [7], формируемые такими источниками дислокационные петли могут скользить в направлении границы раздела жидкая - твердая фаза, интенсивно размножаться на данной границе и отражаться в кристалл. В результате материал превращается в сильно дислоцированный.

Для регистрации кластеров используют декорирование искажений кристаллической решетки легко осаждаемыми примесями (обычно медью) и последующую рентгеновскую топографию (рис. 6а) [7]. Нами получены их изображения в кристаллах, не подвергнутых декорированию, в рамках бездисперсионного варианта двухкристалльной рентгеновской топографии на отражение. На топограммах кластеры регистрируются в виде штрихов, вытянутых в направлении, перпендикулярном вектору дифракции g (рис. 6б).

С увеличением диаметра слитка все большую опасность представляет присутствие рельефа на боковой поверхности слитка. Границы макро или микрослоев роста, которые обусловлены как вращением слитка, так и квазипериодическими процессами при росте кристалла, вызывает появление на боковой поверхности выступов и канавок, перпендикулярных оси слитка. Поскольку при увеличении диаметра слитка возрастает и уровень упругих термических напряжений [5, 6], то данные неровности становятся эффективными концентраторами напряжений и, как следствие, способствуют возникновению дислокаций. На рис. 7 приведено несколько полос скольжения (1-3), образование которых связано с наличием канавки, указанной стрелкой. В качестве еще одного фактора, влияющего на введение дисло-

каций, укажем примеси газовой среды (аргона). Если присутствие азота или водорода в ряде случаев может иметь положительное влияние (препятствует генерации дислокаций [7, 8]), то углерод оказывает однозначно отрицательное влияние. На боковой поверхности слитка возможно возник-

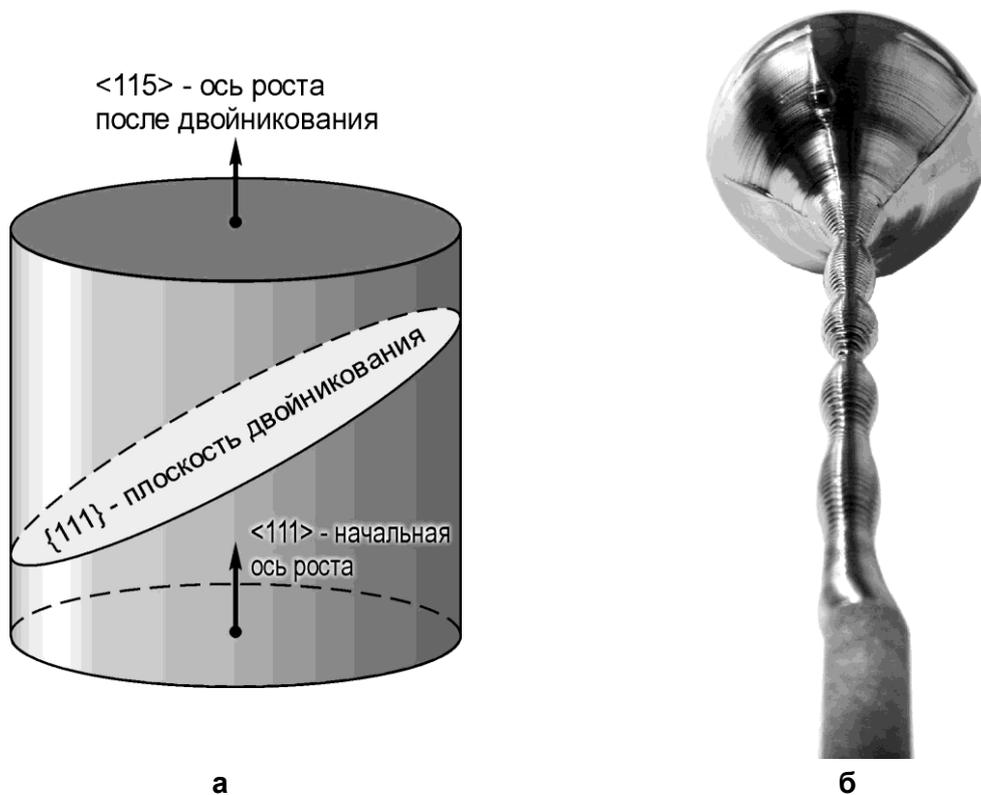


Рис. 5. Двойникование кристалла при выращивании шейки слитка; а) схема двойникования, приводящая к образованию слитка, имеющего ось роста $\langle 115 \rangle$; б) изображение ребер на боковой поверхности слитка с осью роста $\langle 115 \rangle$.

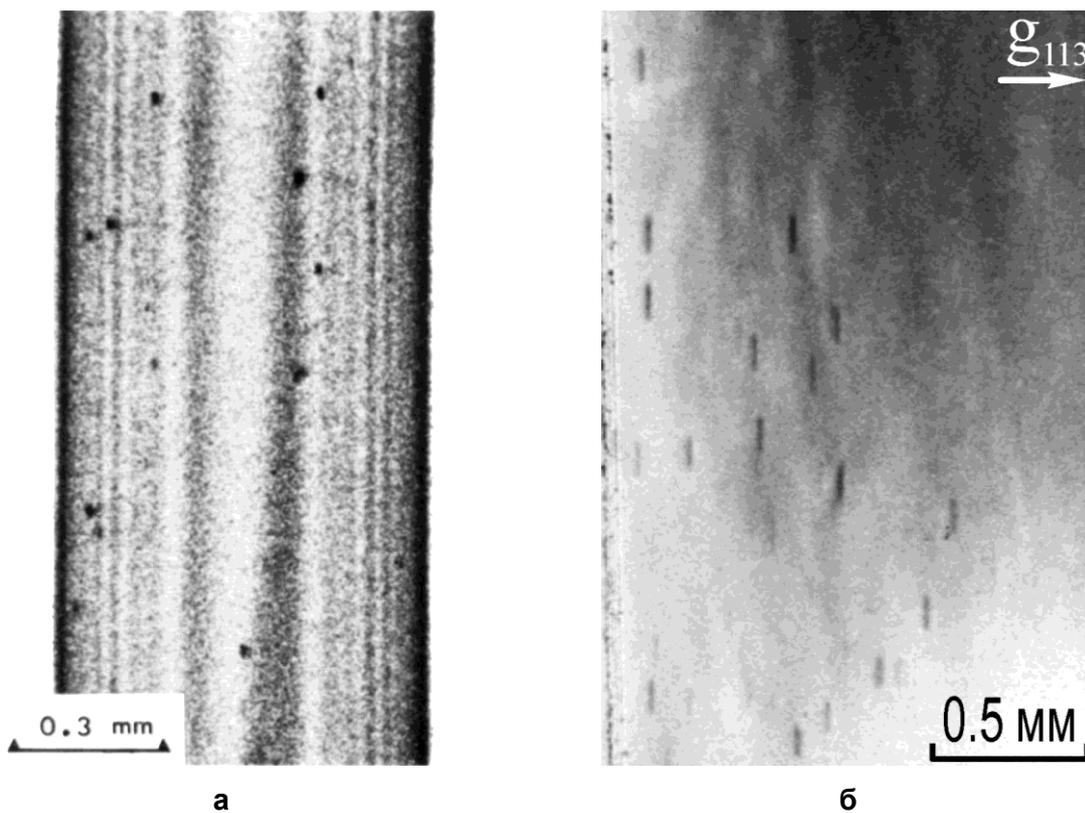


Рис. 6. Регистрация в БЗП кремнии скоплений точечных дефектов (кластеров) с помощью секционной топографии [7] (а) и наблюдение кластеров с помощью двухкристалльной рентгеновской топографии на отражение (б).

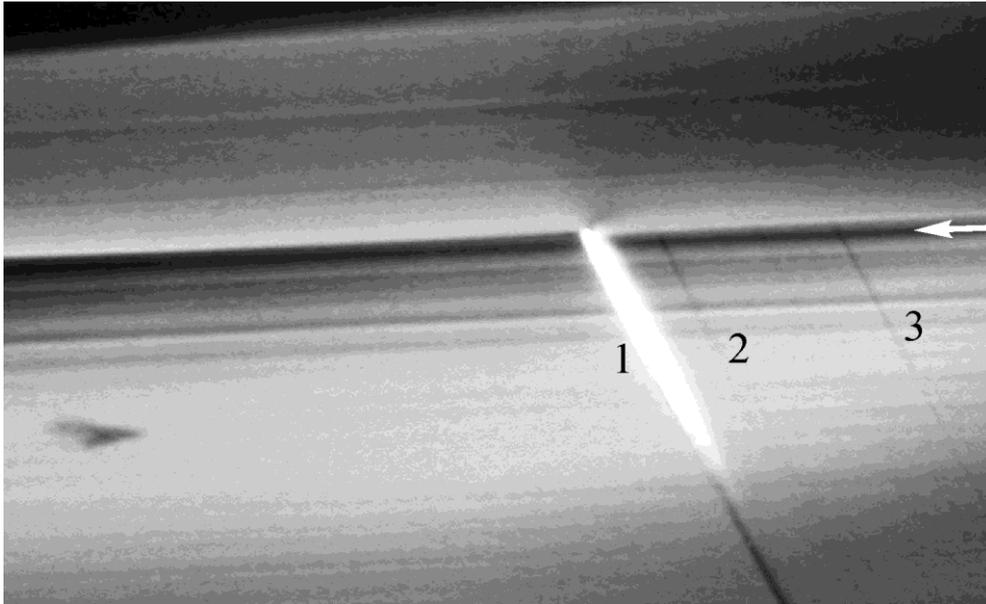


Рис. 7. Введение дислокаций, обусловленное особенностями рельефа боковой поверхности слитка, формируемой при выращивании (оптическая микроскопия).

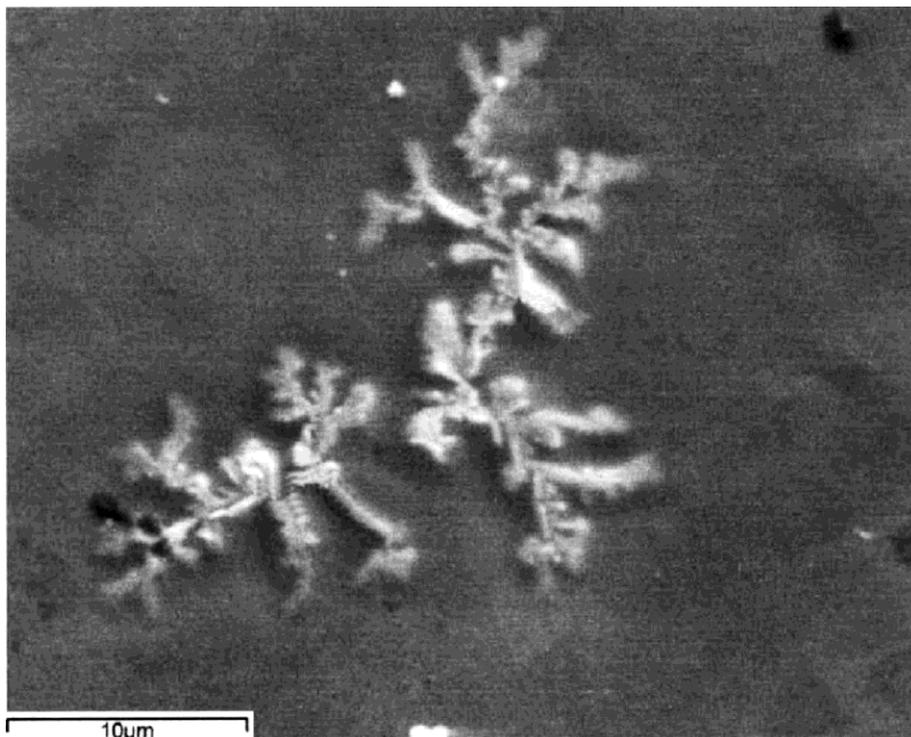


Рис. 8. Сканирующая электронная микроскопия углеродсодержащих образований на поверхности кристалла, способствующих введению дислокаций.

новение углеродосодержащих образований (рис. 8), способствующих введению дислокаций. Введение дислокаций возможно также при возникновении таких факторов, как неоптимальное распределение теплового поля или несбалансированная подача жидкой фазы.

Повышенная вероятность образования дислокаций имеет место на завершающей стадии роста слитка из-за изменения условий роста. Типичная картина распределения дислокаций приведена на рис. 9а, где изображен продольный срез слитка. Буквами АВС обозначена форма сечения границы раздела твердая - жидкая фаза. От этой границы вниз отходят прямолинейные полосы скольжения. Структура одной из полос приведена на рентгеновской топограмме, полученной на прохождении (рис. 9б). Стрелкой обозначена группа дислокаций, расположенных на краю полосы скольжения.

В заключение настоящего раздела обсудим две проблемы, которые, по нашему мнению, являются наиболее актуальными в связи с перманентно существующей тенденцией БЗП технологии увеличивать диаметр кремниевых слитков. Первой является развитие возможностей *in situ* контроля структурного состояния монокристалла. Существующее в настоящее время визуальное наблюдение за состоянием ребер в процессе роста низкоинформативно. Так, представленные на рис. 3б морфологические особенности ребра визуальное *in situ* не регистрируются.

Вторая проблема – *ex situ* исследование природы кластеров – потенциальных источников дислокаций в растущем кристалле. На заре развития полупроводниковой технологии, когда рентгеновская топография и электронная микроскопия находились в почти зародышевом состоянии, для регистрации таких дефектов, как мелкие включения и дислокации использовалось декорирование искажений кристаллической решетки легко осаждаемыми примесями [9]. В середине 70-х годов де Кокк использовал этот прием в сочетании с рентгеновской топографией [7]. Данная методика применяется и в настоящее время [10]. Очевидно, что ее можно использовать только для регистрации плотности дефектов, но не для изучения их природы. Более того, в процессе термообработок, требуемых для осаждения примеси, возможно, как исчезновение имеющихся кластеров, так и возникновение новых. Поскольку с увеличением диаметра слитка все более мелкие кластеры могут становиться источниками Франка-Рида, то наиболее перспективным методом их исследования представляется рентгеновская интерференционная топография. В следующем разделе, где некоторые актуальные проблемы рентгеновской интерференционной топографии рассмотрены на примере пленочной интерферометрии, продемонстрированы возможности регистрации искажения кристаллической решетки на уровне 1 ангстрема и менее. Существенным преимуществом данного



Рис. 9. Типичная картина распределения дислокаций в БЗП кремнии; (а) продольное сечение слитка после селективного травления в травителе Шиммеля; (б) изображение полосы скольжения на рентгеновской топограмме на прохождении.

метода перед другими, например электронной микроскопией, обладающими сравнимой разрешающей способностью, является значительно большее (несколько квадратных сантиметров и более) поле изображения. Данное преимущество является принципиальным, поскольку мало количество кластеров – потенциальных дислокационных источников в слитках, полученных при оптимальных условиях выращивания. Срабатывание даже одного источника может вызвать введение дислокаций, вынуждающее завершить рост слитка.

3. Топографические исследования пленочных рентгеновских интерферометров

Развитие современных электронных и оптических устройств в значительной мере базируется на применении многослойных гетеросистем. При этом как к кристаллической структуре гетеросистемы, так и к составу и толщинам отдельных слоев предъявляются очень жесткие требования. Широко применяемыми методами исследования реальной структуры кристаллов и гетеросистем являются рентгеновская дифрактометрия и топография. Одним из приемов, развитых с целью наблюдения дефектов в тонких слоях, является топография в скользящей геометрии Брэгга-Лауэ [11]. Такая геометрия при малой толщине пленки обеспечивает путь рентгеновского излучения в кристалле, сравнимый с экстинкционной длиной. Вследствие этого удается получить интенсивность отраженного пучка, достаточную для регистрации изображения. Однако в сложных гетероструктурах при толщинах слоев, составляющих десятки нанометров, реальное состояние атомных плоскостей таково, что они представляют собой скорее систему атомных поверхностей. В настоящее время пленочная рентгеновская интерферометрия – наиболее прецизионный метод, позволяющий изучать форму слабо искривленных атомных плоскостей. Однако в мировой практике потенциальные возможности этого метода реализованы слабее, чем возможности объемной рентгеновской интерферометрии. В особенности это относится к топографическому варианту метода. Пленочный интерферометр представляет собой слоистую систему типа А/В/А, в которой параметры кристаллических решеток подложки и верхней пленки А совпадают (терминология А/В/А введена Холловой [12]). Разделительный слой В при исследовании интерференционных явлений в А-кристаллах ведет себя как недифрагирующий промежуток. Материал разделительного слоя может находиться как в неупорядоченном состоянии (например, аморфном), так и в кристаллическом. В последнем случае необходимо, чтобы на кривой качания угловое расстояние между пиком разделительного слоя и общим пиком А – слоев было значительно больше ширины максимума отражения.

После первой экспериментальной работы, посвященной топографическим исследованиям гетеросистем со свойствами рентгеновских интерферометров [13], практически во всех последующих публикациях [14-16] в качестве верхнего кристалла используется поверхностный слой пластины кремния, подвергнутый ионной имплантации. При этом функцию разделительного слоя выполняет аморфный кремний, сформированный в результате указанной имплантации. Обычно толщина эпитаксиальных слоев не превышает долей микрона, что существенно меньше экстинкционной длины для большинства используемых материалов и не позволяет получить достаточную интенсивность отраженного пучка. Ярким примером является работа [15], где продемонстрировано усиление интерференционного контраста по мере увеличения толщины пленки. Реальным способом усиления вклада пленки в формируемую интерференционную картину является развитие метода рентгеновской интерференционной топографии на отражение [17-22], когда излучение падает под скользящим углом. Это сочетает возможность исследования пленок малой толщины (десятые доли микрона и менее) с высокой структурной чувствительностью. В цитированных работах в качестве разделительного слоя (В-слой интерферометра) использовался пористый кремний [17-20] или твердый раствор GeSi [21, 22], а А-слоями являлись подложка и эпитаксиальная пленка кремния. Схема съемки приведена на рис. 10. Под скользящим углом излучение приходит как на моно-

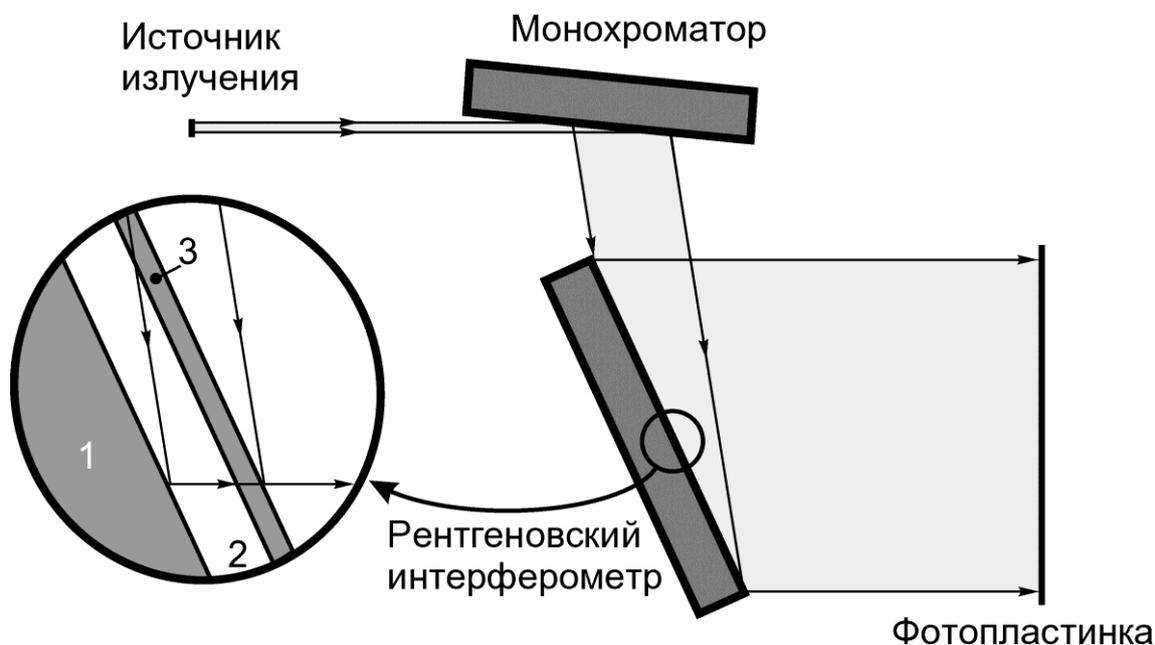


Рис. 10. Схема получения топограммы от гетеросистемы со свойствами рентгеновского пленочного интерферометра; 1, 2 и 3 – подложка, разделительный слой и эпитаксиальная пленка, соответственно.

хроматор, так и исследуемый объект со свойствами интерферометра. Цифрами 1, 2 и 3 обозначены, соответственно, подложка, разделительный слой и эпитаксиальная пленка.

Методические условия, необходимые для регистрации топограмм с интерференционным контрастом в геометрии Брэгга, демонстрируются с помощью данных, приведенных на рис. 11 и 12. При повороте образца вблизи кинематического угла Брэгга на топограммах от гетеросистемы Si/GeSi/Si(001) с клинообразной формой слоя GeSi обнаружено смещение интерференционных полос (рис. 11). Толщина разделительного слоя изменяется с примерно постоянным градиентом от нулевой величины до 90 нм, в результате чего угол клина составляет 2.6 угл. сек. Из сравнения рисунков *a* и *б* видно, что при повороте кристалла на 12 угл. сек. происходит заметный сдвиг рентгеновских интерференционных полос. Важным условием его регистрации является использование высокосовершенных гетеросистем-интерферометров, когда верхняя пленка не подвергается существенным воздействиям. Так, авторами [23] было указано, что они не наблюдали влияния углового положения образцов на смещения полос муара при использовании гетеросистемы, в которой разделительный слой был получен с помощью ионной имплантации. Продемонстрированный на рис. 11 эффект играет принципиальную роль при формировании контрастных муаровых картин. На рис. 12*a* и рис. 12*б* приведены две топограммы от одного участка гетеросистемы эпитаксиальный Si/пористый Si/подложка Si(001), выполненные в условиях дисперсионной и бездисперсионной схемы установки кристаллов, соответственно. Поскольку для получения топограмм использовалось (113) отражение от кремниевого монохроматора, то рис. 12*a* получен в геометрии (n,-m), когда величина дисперсии для линии $\text{CuK}\alpha_1$ излучения составляет около 50 угл. сек, а рис. 12*б* – в бездисперсионной геометрии (n,-n). В результате в случае рис. 12*a* происходит наложение интерференционных картин в пределах обусловленного дисперсией угла, как это следует из данных рис. 11. Данное наложение приводит к размытию интерференционного контраста при сохранении дифракционного. Это видно, например, из сравнения изображений дефектов 1 - 4. На рис. 12*б* одному периоду интерференционной полосы соответствует изменение прогиба пакета атомных плоскостей эпитаксиальной пленки на величине

ну 1,8 ангстрем. Столь высокое разрешение относится только к направлению, перпендикулярному

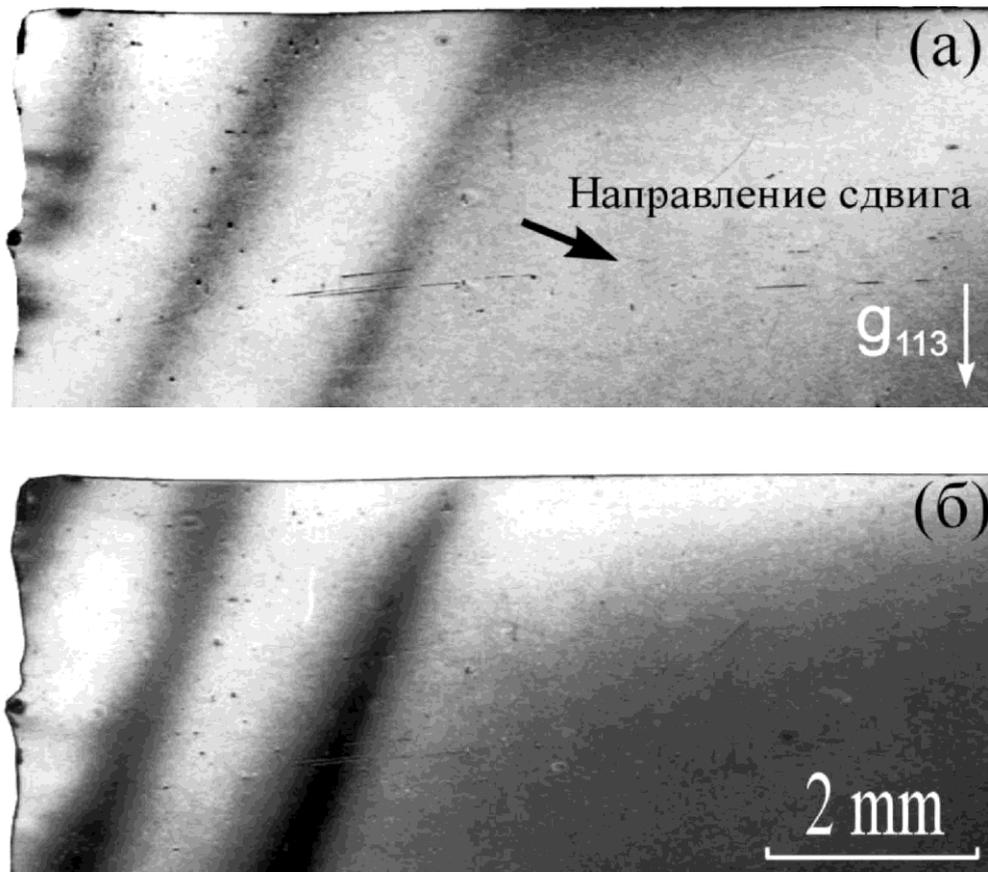


Рис. 11. Сдвиг рентгеновских интерференционных полос на топограммах от гетеросистемы Si/GeSi/Si(001) с клинообразной формой слоя GeSi при повороте кристалла на 12 угл. сек.

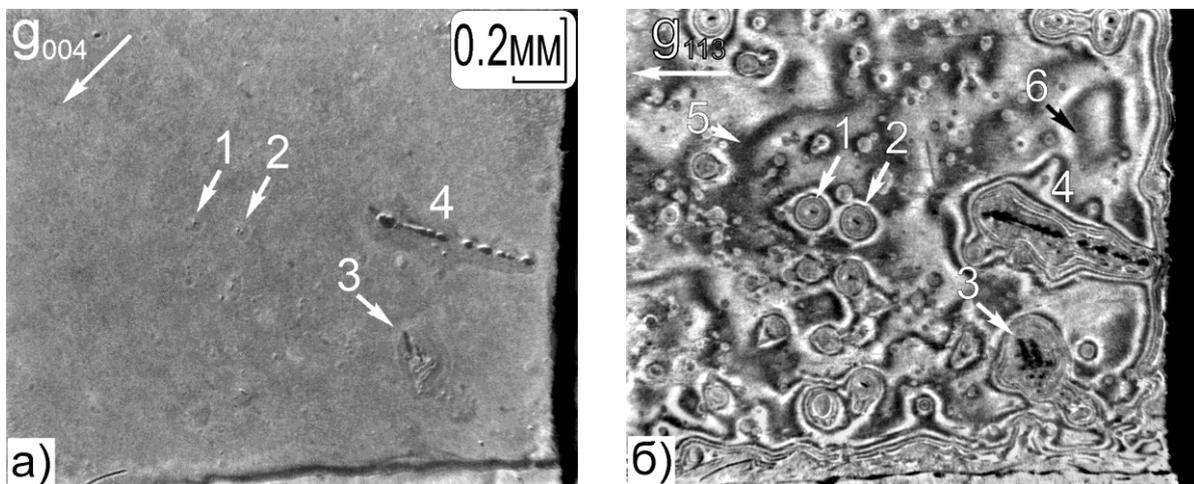


Рис. 12. Топограммы от одного участка гетеросистемы эпитаксиальный Si/пористый Si/подложка Si(001), полученные в условиях дисперсионной (а) и бездисперсионной (б) схемы установки кристаллов.

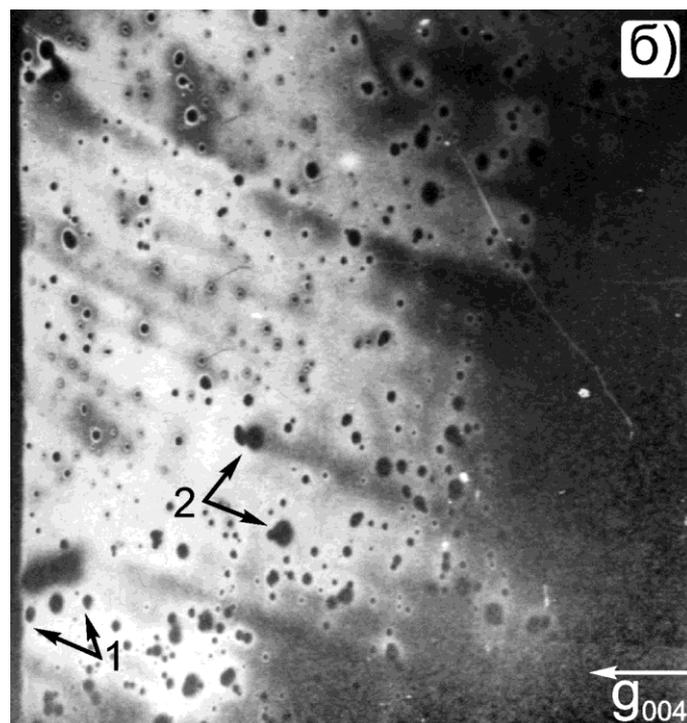
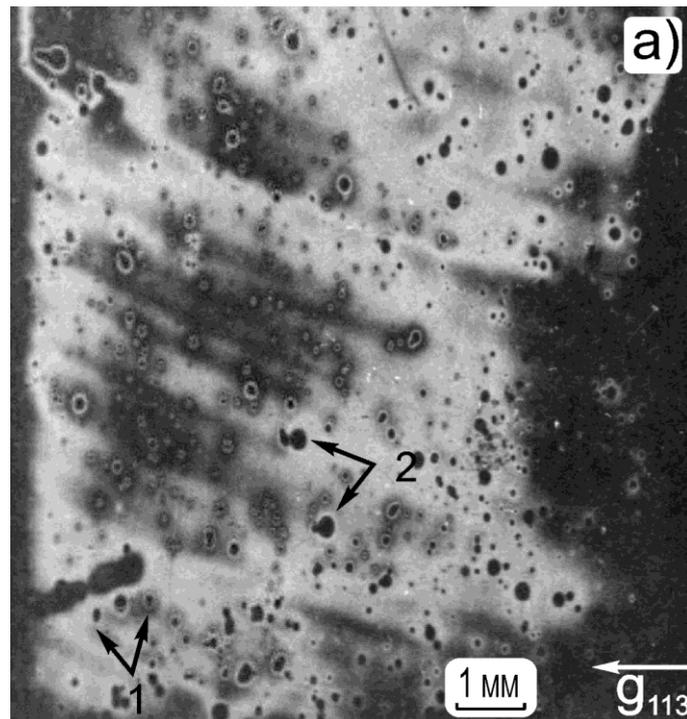


Рис. 13. Топограммы от одного участка гетеросистемы Si/пористый Si/ Si(001), полученные в реф-лексах пористого кремния g_{113} (a) и g_{004} (б) при использовании (113) Si монохроматора.

границе раздела. В плоскости данной границы на один период интерференционной полосы приходится от нескольких десятков микрометров до миллиметра. Минимальный период concentрических колец наблюдается вблизи дефектов 1 и 2, а максимальный – у широких размытых интерференционных полос, например, 5 и 6. Видно, что максимальная величина регистрируемого интерференционного периода определяется размерами топограммы, а минимальная величина – возможностями регистрирующей техники (фотоматериалы и различные мишени). Поэтому в рамках данной методики можно определять непараллельность одноименных атомных плоскостей пленки и подложки в пределах от $2 \cdot 10^{-3}$ до 2 угловых секунд [17].

На рис. 13а и б приведены топограммы от одного участка гетеросистемы Si/пористый Si/Si(001), полученные в рефлексах пористого кремния g_{113} и g_{004} . Как и в случае рис. 12, использовалось (113) отражение от кремниевого монокристалла, поэтому топограмма рис. 13а получена в условиях бездисперсионной геометрии, а топограмма рис. 13б – в условиях дисперсионной. Из сравнения данных изображений следует, что при регистрации дифракционных топограмм требование условия бездисперсионной съемки является гораздо более мягким, чем при регистрации интерференционных топограмм. Например, дефекты, обозначенные 1 и 2, имеют вполне сравнимые изображения на обеих топограммах.

Методом интерференционной топографии зарегистрировано неконтролируемое другими способами влияние технологических процедур на процесс формирования слоя пористого кремния (неоднородности слоя, возникшие вдоль заполированных царапин, а также осаждение микропримесей из капель воды на стадии финишной промывки) [17-20].

Обратим внимание, что в мировой литературе топографические интерференционные исследования эпитаксиальных систем с разделительным слоем почти полностью представлены работами авторского коллектива статьи [17-22]. По-видимому, единственным исключением является работа Чу и Таннера [24], в которой приведена интерференционная топограмма от двух слоев AlGaAs с совпадающими параметрами кристаллической решетки, разделенных слоем с отличным параметром. Исследования указанных систем с помощью высокоразрешающей дифрактометрии в литературе представлены гораздо шире (см., например, работы [12, 25]).

В заключение отметим две актуальные проблемы пленочной рентгеновской интерферометрии. Первая проблема – интерпретация контраста, наблюдаемого на топограммах, которые получены от А/В/А систем. Авторы [16] связывают данный контраст с муаром, который возникает вследствие незначительных искажений одного из кристаллов. Бонзе и Харт [26] описали указанный контраст как трансляционный муар, возникающий в случае неискаженных кристаллов А (подложка и верхний тонкий кристалл) с идентичными параметрами кристаллической решетки. Экспериментальную проверку своей модели авторы [26] выполнили на образцах [13], в которых верхняя пленка была подвергнута ионной имплантации и потому представляла слегка искаженный кристалл. Распределение искажений в верхнем кристалле установлено в работе [14]. Таким образом, в настоящее время в мировой литературе отсутствуют четкие данные о природе наблюдающегося на топограммах муара. Обратим внимание, что на основе представленных на рис. 12б данных выявить различие между подходами [16] и [26] невозможно, поскольку использовалась геометрия съемки, при которой количество интерференционных контуров на единицу изменения толщины недифрагирующего слоя практически одинаково в рамках обеих моделей. Для того чтобы установить, какой из подходов [16] или [26] является более адекватным, необходимо приготовление интерферометра специальной геометрии.

Поясним это с помощью схемы рис. 2г. Теперь при рассмотрении данной схемы необходимо принять, что кристалл 3 является тонким, разделительный зазор 2 – твердотельным, и имеет место дифракция на отражение. Излучение приходит на кристалл 3 (эпитаксиальную пленку) сверху под скользящим углом и после рассеяния в этой пленке и в подложке (1) вы-

ходит из 3 наружу. Схематически ход лучей аналогичен показанному на вставке к рис. 10. В рамках модели трансляционного муара [13, 26] принимается, что на участках I, II и III (рис. 2г) отражающие атомные плоскости пленки 3 строго параллельны соответствующим атомным плоскостям подложки 1, а в рамках модели поворотного муара [16] – что одноименные атомные плоскости (hkl) в слоях 1 и 3 пересекаются под малым углом. Это – угол клина недифрагирующей прослойки 2. На рис. 2г представлен случай, когда отражающие плоскости (hkl) перпендикулярны плоскости рисунка, а градиент толщины прослойки лежит в ней. Если граница слоев 1 и 2 параллельна (001), то в кристаллах 1 и 3 возможно также отражение от плоскостей ($-k h l$), которые образуют угол φ как с границей (001), так и с линией пересечения плоскостей (hkl) с (001). Анализ показывает, что при отражении от плоскостей (hkl) периоды интерференционных полос одинаковы для обеих моделей [13, 26] и [16], а при отражении от плоскостей ($-k h l$) они отличаются на множитель $\cos\varphi$. Для экспериментальной проверки приемлемости рассматриваемых моделей к исследуемым объектам необходимо приготовление специального пленочного интерферометра, что представляется реальным в рамках современных эпитаксиальных методов.

Вторая проблема пленочной интерферометрии – развитие возможностей рентгеновской топографии для изучения искажений в гетеросистемах типа A/B/A₁, когда параметры кристаллических решеток подложки и верхней пленки различны. Поскольку кремний является наиболее совершенным из искусственно изготавливаемых объемных кристаллов, то эпитаксиальное выращивание на Si подложках бездефектных слоев соединений с различными параметрами решеток могло бы решить проблему получения высокосовершенного подложечного материала для широкого класса полупроводников. Для этого необходимо уменьшить плотность таких нежелательных дефектов структуры пленки, как пронизывающие дислокации [27, 28]. Они соединяют концы дислокаций несоответствия с поверхностью растущей пленки. В идеализированном случае все пронизывающие дислокации выведены на боковую поверхность подложки, и средний размер дислокаций несоответствия сравним с диаметром границы раздела. В такой гетеросистеме после полного снятия напряжений несоответствия пленка и подложка имеют одинаковую плотность дефектов структуры. В реальных гетеросистемах средний размер дислокаций несоответствия на порядки величины меньше диаметра границы раздела из-за присутствия пронизывающих дислокаций. В настоящее время только в случае тонких псевдоморфных слоев (когда энергетически невыгодно введение дислокаций несоответствия) и в случае гомоэпитаксиальных слоев удастся получать пленки, имеющие сравнимую с подложкой плотность дефектов структуры.

4. Заключение

Объемная и пленочная рентгеновская интерферометрия возникли практически одновременно в середине 1960-х годов. Заметный прогресс первого метода способствовал как развитию технологии получения объемных кристаллов кремния, так и возникновению новых прецизионных вариантов измерительной техники. В статье развитие второго метода представлено в рамках возможностей рентгеновской интерференционной топографии гетеросистем с разделительным недифрагирующим слоем.

На топограммах, полученных от эпитаксиальных структур со свойствами пленочного рентгеновского интерферометра, регистрируются картины, из анализа которых представляется возможным измерение угла наклона отражающих атомных плоскостей до 0.002 угл. сек. [17]. Строго говоря, само понятие атомной плоскости является математической идеализацией, поскольку в реальном мире ничего плоского не существует. Для кристаллических решеток интерпретация набора атомов как поверхность или как плоскость зависит от чувствительности существующих на данный момент методик измерения. В настоящее время она определяется возможностями рентгеновской интерферометрии. Ими же определяется пре-

дельная чувствительность измерения отклонений параметра кристаллической решетки, обусловленных присутствием точечной примеси [4].

Возможности контроля структурного состояния кристаллов кремния в процессе их роста фактически ограничены регистрацией присутствия ребер на боковой поверхности слитка. Затруднено даже *in situ* выявление тех морфологических особенностей ребер, которые не типичны для оптимальных условий роста кремниевого слитка. При поиске оптимальных условий во многих случаях приходится ориентироваться на опыт, интуицию и зрение оператора. Поскольку методик, позволяющих регистрировать строение кристаллической решетки кремния при температуре, близкой к температуре плавления, в ближайшее время не ожидается, то целесообразно развитие возможностей *in situ* выявления тонких элементов морфологической структуры ребер, формируемых на боковой поверхности слитка.

Авторы выражают благодарность операторам ростовых установок Смирнову П.Л. и Борисову А.А. за кремниевые слитки, предоставленные для исследований, а также оператору электронного микроскопа М. Wilde за снимки углеродосодержащих выделений на поверхности выращенных слитков.

Литература

1. Bonse U., Hart M. // Appl. Phys. Lett. 1965. V.6, N4, – p.155.
2. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика. // М.: Наука, 1982. – с.392.
3. Deslattes R.D. // Appl. Phys. Lett. 1969. V.15, N11, – p.386.
4. Bartscher M., Bonse U. // Cryst. Res. Technol. 1998. V.33, N4, – p.535.
5. Ludge A. // 186th Meeting of Electrochemical Society, Inc.: High Purity Silicon III. 1994.
6. Riemann H., Ludge A., Bottcher K., Rost H. J., Hallmann B., Schroder W., Hensel W., Schleusener B. // J. Electrochem. Soc. 1995. V.142, N3, – p.1007.
7. De Kock A.J.R., Poksnoer P.J., Boonen P.G.T. // J. of Cryst. Growth. 1975. V.30, N 3, – p.279.
8. Von Ammon W., Holzl R., Virbulis J., Dornberger E., Schmolke R., Graf D. // J. Crystal Growth. 2001. V.226, – p.19.
9. Несовершенства в кристаллах полупроводников. Сборник статей п/р П.А. Петрова. М. // Металлургия. 1964.
10. Ciszek T. F., Wang T.H. // J. Crystal Growth. 2002. V.237-239, – p.1685.
11. Афанасьев А.М., Александров П.А., Имамов Р.М. "Рентгеновская структурная диагностика в исследовании приповерхностных слоев монокристаллов". // М. Наука. 1986.
12. Holloway H. // J. Appl. Phys. 1990. V.67, – p.6229.
13. Bonse U., Hart M. and Schwuttke G.H. // Phys. Status Sol. 1969. V.33, – p. 361.
14. Wieteska K. and Wierzchowski W.K. // Phys. Stat. Sol. (a). 1995. V.147, – p.55.
15. Jiang B.L., Shimura F., Rozgonyi G.A. // Appl. Phys. Lett. 1990. V.54, N4, – p.352.
16. Ohler M., Hartwig J. and Prieur E. // Acta Cryst. 1997. V.A53, – p.199.
17. Федоров А.А., Колесников А.В., Василенко А.П., Пчеляков О.П., Романов С.И., Соколов Л.В., Труханов Е.М. // Приборы и техника эксперимента. 2000. N2, – с.135.
18. Федоров А.А., Ревенко М.А., Труханов Е.М., Романов С.И., Каранович А.А., Кириенко В.В., Ламин М.А., Пчеляков О.П., Соколов Л.В., Гутаковский А.К. // Поверхность. 2000. N4, – с.19.
19. Kolesnikov A.V., Vasilenko A.P., Trukhanov E.M., Sokolov L.V., Fedorov A.A., Pchelyakov O.P., Romanov S.I. // Appl. Surf. Science. 2000. V.166, N1-4, – p.82.
20. Василенко А.П., Федоров А.А., Колесников А.В., Труханов Е.М., Пчеляков О.П., Соколов Л.В. // Заводская Лаборатория. 2002. Т.68, N4, – с.25.
21. Федоров А.А., Колесников А.В., Василенко А.П., Ревенко М.А., Никифоров А.И., Соколов Л.В., Труханов Е.М. // Поверхность. 2002. N9, – с.53.
22. Fedorov A.A., Trukhanov E.M., Vasilenko A.P., Kolesnikov A.V., Revenko M.A. // J. of Physics D: Applied Physics. 2003. V.36, – p.A44.
23. Ohler M., Kohler S. and Hartwig J. // Acta Cryst. 1999. V.A55, – p.423.
24. Chu X. and Tanner B.K. // Materials Letters. 1987. V.5, N4, – p.153.

25. Tanner B.K. // J. Phys. D: Appl. Phys. 1993. V.26, – p.A151.
26. Bonse U. and Hart M. // Phys. Status Sol. 1969. V.33, – p.351.
27. Kolesnikov A.V., Vasilenko A.P., Trukhanov E.M., Gutakovsky A.K. // Appl. Surf. Science. 2000. V.166, N1-4, – p.57.
28. Труханов Е.М., Колесников А.В., Василенко А.П., Гутаковский А.К. // ФТП. 2002. Т.36, вып.3, – с.309.

Quality of single crystal silicon and some problems of X-ray interferometry

*K.B. Fritzler, E.M. Trukhanov, V.V. Kalinin, A.T. Drofa, A.P. Vasilenko,
A.V. Kolesnikov, A.A. Fedorov*

Institute Of Semiconductor Physics SB RAS

Abstract. The problems associated with silicon float zone technology as well as with development of X-ray interferometry are discussed in framework of their interrelation. The method of X-ray interference topography shows promise for investigation of clusters, which are the most likely potential dislocation sources for monocrystals grown in conditions, when a compromise has to be reached between various parameters. The tasks of in situ structure examination during the silicon crystal growth are phrased. The brief review of interference topography investigations of epitaxial systems with nondiffracted separated layer is presented. Two interpretation models for Moirè pictures observed in topographs from epitaxial systems – interferometers are compared.

УДК 539.126:539.166.06:539.2

Селективные по глубине исследования периодических многослойных магнитных пленок методом ядерно-резонансной брэгговской рефлектометрии

М.А. Андреева

Физический факультет Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова

Б. Кальска

Физический факультет Уппсальского университета, Уппсала, Швеция

Институт экспериментальной физики, Свободный университет, Берлин, Германия

Б. Линдгрен, Л. Хэггстром, Р. Вэпплинг

Физический факультет Уппсальского университета, Уппсала, Швеция

В.Г. Семенов

Научно-исследовательский институт химии Санкт-Петербургского государственного университета

Н.Н. Салащенко, К.А. Прохоров

Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород

А.И. Чумаков, О. Леопольд, Р. Рюффер

Европейский источник синхротронного излучения (ESRF), Гренобль, Франция

Сверхтонкие взаимодействия в тонких магнитных пленках сложно интерпретировать (особенно вблизи границ раздела). Обычная мессбауэровская спектроскопия дает набор сверхтонких магнитных полей \mathbf{V}_{hf} в пленке ^{57}Fe , а мессбауэровская рефлектометрия позволяет определять - как распределены эти сверхтонкие поля \mathbf{V}_{hf} по глубине пленки. Новый метод исследования был опробован на образцах $[\text{Cr}(1,7 \text{ nm})/^{57}\text{Fe}(1,6 \text{ nm})]_{26}$, $[^{57}\text{Fe}(6\text{ML})/\text{Co}(3\text{ML})]_{35}$, $[^{57}\text{Fe}(5\text{ML})/\text{Co}(5\text{ML})]_{25}$, $[^{57}\text{Fe}(7\text{ML})/\text{V}(10\text{ML})]_{29}$, и $[^{57}\text{Fe}(10\text{ML})/\text{V}(5\text{ML})]_{20}$ (ML – атомные монослои). Обработка временных спектров ядерно-резонансного брэгговского отражения позволила определить профили распределения сверхтонких полей \mathbf{V}_{hf} по глубине бислоя.

Введение

Синхротронное излучение (СИ) позволяет проводить «мессбауэровские» (ядерно-резонансные) эксперименты на качественно новом уровне. Переход от привычной энергетической шкалы исследования к временной (по времени задержки от момента возбуждения образца импульсом СИ) не является главным преимуществом синхротронных исследований. Скорее это обстоятельство усложняет интерпретацию спектров (об особенностях проведения ядерно-резонансных исследований на синхротронах см., например, [1]). Зато остронаправленность СИ (расходимость пучка СИ, например, на ESRF составляет всего $\sim 0,03$ мрад $\div 0,05$ мрад) делает возможной реализацию мессбауэровских экспериментов, в

которых требуется хорошее угловое разрешение. Такими экспериментами являются эксперименты по ядерно-резонансной дифракции, малоугловому рассеянию и зеркальному отражению (рефлектометрии).

Интерес к рефлектометрии (рентгеновской, резонансной рентгеновской, нейтронной, мессбауэровской) резко возрос в последние годы в связи с актуальностью исследований поверхности и ультратонких пленок, для которых этот метод дает уникальную информацию. Когерентное взаимодействие излучения при скользких углах падения резко ограничивает глубину проникновения излучения до нескольких нанометров, создавая условия для селективного исследования приповерхностных слоев. В условиях брэгговского отражения от периодических многослойных пленок возникает селективность по глубине на шкале отдельного периода, что открывает возможность выявлять структуру напыленных слоев и, что более важно во многих приложениях, интерфейсов. Ядерно-резонансный канал рассеяния, как известно, дает картину магнитного упорядочения в многослойных пленках через сверхтонкие взаимодействия, расщепляющие резонансный спектр рассеяния в энергетическом представлении или дающие квантовые биения во временном представлении.

В данной работе рассмотрены некоторые особенности ядерно-резонансных спектров брэгговского отражения и приведены результаты экспериментального исследования на станции ядерно-резонансного рассеяния (ID18) Европейского источника синхротронного излучения (ESRF) в Гренобле (подробное описание устройства станции и методики проведения эксперимента содержится в [2]) микро- и монокристаллических многослойных пленок, изготовленных на основе резонансного изотопа ^{57}Fe .

Особенности спектров ядерно-резонансного брэгговского отражения

Сверхтонкие взаимодействия в ультратонких магнитных пленках, где влияние границ раздела превалирует, сложно интерпретировать. Мессбауэровские спектры таких образцов обычно сильно уширены, и мы получаем целый набор сверхтонких магнитных полей $\mathbf{V}_{\text{hf},i}$, характеризующих резонансную пленку в целом, при этом можно только предполагать о связи величины (или ориентации) \mathbf{V}_{hf} со смещением ^{57}Fe относительно интерфейса. Мессбауэровская рефлектометрия позволяет определять, как распределены отдельные сверхтонкие поля $\mathbf{V}_{\text{hf},i}$ по глубине пленки.

Существует два основных механизма селективности по глубине в рефлектометрии. Во-первых, это изменение по глубине амплитуды поля излучения, возбуждающего ядерный гамма-резонанс. В условиях когерентного взаимодействия излучения с плоскостистой средой амплитуда поля в образце отличается от поля падающей волны: в области полного внешнего отражения – амплитуда поля аномально быстро затухает (взаимодействие происходит только с поверхностным слоем образца [3-4]); в пленках – формируется стоячая волна как результат интерференции волн, отраженных границами раздела (таким образом можно усилить взаимодействие с выделенным резонансным монослоем в средней части пленки, см., например, [5]); в условиях брэгговской дифракции на периодической многослойной пленке – период стоячих волн в структуре соответствует ее периоду, что приводит к усилению или ослаблению вкладов в регистрируемый сигнал от разных подслоев в периоде. Хотя здесь речь идет не о вторичных процессах, возбуждаемых стоячей волной, а об отдельных вкладах в сам сигнал зеркального отражения, идеология метода стоячих волн (возможность варьирования отдельных вкладов при очень малых изменениях угла скольжения θ) работает и здесь, и даже более эффективно. Амплитуда отражения от отдельного слоя пропорциональна не амплитуде поля на этом слое (как это имеет место для вторичных процессов), а квадрату амплитуды поля [6].

Во-вторых, когерентное сложение волн, рассеянных отдельными слоями в периоде, существенно зависит от пространственного сдвига фаз между этими волнами. В условиях брэгговской дифракции этот механизм проявляется наиболее сильно.

Для иллюстрации рассмотрим модельный пример – рис. 1. Предположим, что в области интерфейса имеет место квадрупольное расщепление резонансного спектра, а в самой пленке – магнитное. В спектре поглощения оба вклада присутствуют с одинаковой вероятностью (предполагаем площади дублета и секстета одинаковыми). В спектре брэгговского отражения первого порядка вклад интерфейса существенно ослаблен, так как рассеянные волны складываются в противофазе, если расстояние между интерфейсами составляет приблизительно полпериода. В спектре брэгговского отражения второго порядка этот вклад наоборот усилен, так как волны рассеяния на интерфейсах складываются в фазе. Подобные исследования спектров магнитного отражения рентгеновского излучения вблизи $L_{2,3}$ краев поглощения La и Ce в 8 порядках брэгговского отражения позволили восстановить вариации магнитного момента вблизи границы раздела La/Fe или Ce/Fe [7]. В ядерно-резонансной (мессбауэровской) рефлектометрии подобная структурная селективность временных спектров брэгговского отражения впервые обнаружена в работе [8], а затем в [9-10], где для объяснения особенностей спектров отражения была привлечена идея стоячих волн.

При более детальном рассмотрении оказалось, что интерференционный механизм селективности по глубине брэгговского отражения существенно ярче, чем влияние стоячих волн, последнее может оказаться существенным только для достаточно сильных брэгговских отражений. Но если таковое влияние имеет место, то в этом случае возникает дополнительная возможность для получения информации о структуре - за счет вариации угла скольжения в окрестности брэгговского отражения, поскольку такие вариации смещают узлы и пучности стоячих волн [11]. В последующем изложении мы проиллюстрируем использование обоих механизмов структурной селективности.

Исследование мультислоев $^{57}\text{Fe}/\text{Co}$

Мультислои $[^{57}\text{Fe}/\text{Co}]_n$ с достаточно большой площадью поверхности ($\sim 2 \times 2 \text{ см}^2$), необходимой для рефлектометрических измерений, выращивались (направление роста $\langle 001 \rangle$) в лаборатории физики вещества в университете г. Уппсалы (Швеция) с помощью магнетронного распыления в ультравысоком вакууме при 250°C на монокристаллической подложке MgO. Для предотвращения окисления на поверхность напылялось несколько монослоев V. Толщины, качество и монокристалличность слоев тестировались рефлектометрическим ($1.5^\circ < 2\theta < 15^\circ$) и рентгенодифракционным ($50^\circ < 2\theta < 80^\circ$) методами. В данной статье мы приводим результаты исследования образца $[^{57}\text{Fe}(6\text{MC})/\text{Co}(3\text{MC})]_{35}$ (MC – атомные монослой) с периодом 1,55 нм.

Конверсионные мессбауэровские спектры (КЭМС) измерялись при комнатной температуре и при 10 К. Кроме нормальной геометрии, измерения проводились и в наклонной геометрии при разных азимутальных углах для определения направления сверхтонкого магнитного поля \mathbf{V}_{hf} . Ориентация \mathbf{V}_{hf} оказалась вдоль направления [110]. КЭМС нормального падения при комнатной температуре был разложен на три секстета (рис. 2а): 37,0 Т (55%), 35,7 Т (35%), 33,9 Т (10%). Отметим, что максимальная величина сверхтонкого магнитного поля в наших пленках ^{57}Fe оказалась больше, чем в чистом α -железе, что объяснялось наличием атомов Co в ближайшем окружении Fe. При этом можно было ожидать, что большее поле соответствует атомам Fe в интерфейсной Fe/Co области. Однако ядерно-резонансные спектры брэгговского отражения не подтвердили этого предположения.

Периодическая структура Fe/Co дает слабое брэгговское отражение, поскольку электронные плотности Fe и Co близки. Поэтому влияние стоячих волн и соответственно вариация временных спектров при изменении угла скольжения в окрестности первого брэгговского максимума оказались незначительными. Однако интерференционная природа брэгговского отражения позволила различить пространственное распределение $\mathbf{V}_{\text{hf},i}$ в слоях железа – см. рис. 2б. Сравнение модельных расчетов с экспериментальным спектром включает

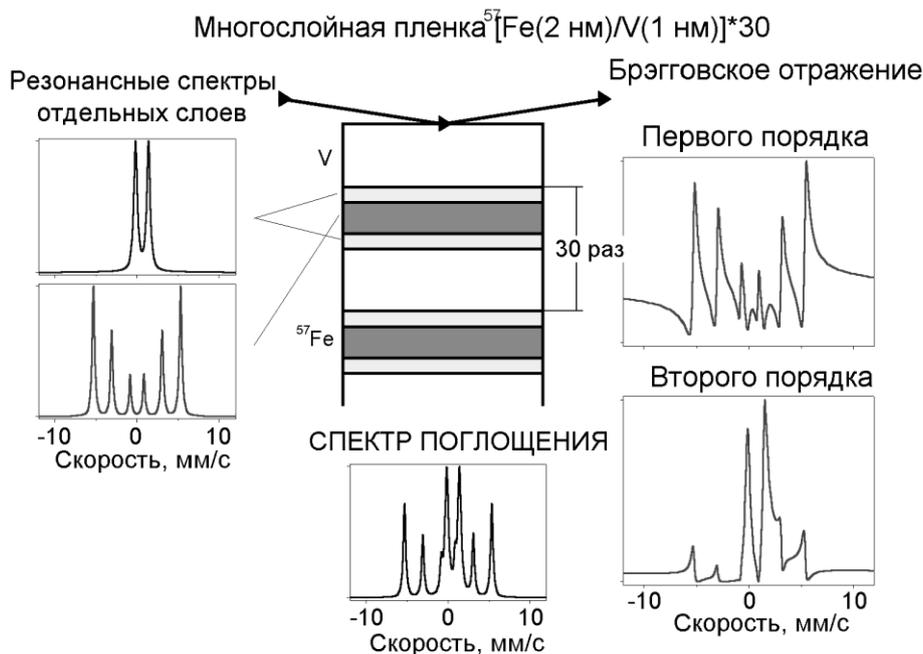


Рис. 1. Рассчитанные мессбауэровские спектры брэгговского отражения первого и второго порядка (справа) для модельной многослойной структуры $^{57}\text{Fe}(2 \text{ нм})/\text{V}(1 \text{ нм}) \cdot 30$. Слева приведены принятые в расчете резонансные спектры интерфейсной области (дублет) и центральной части (секстет) резонансных слоев ^{57}Fe . Все спектры нормированы. Несмотря на искажение формы линий в спектрах отражения, обусловленное дисперсией, хорошо виден эффект подавления вклада от интерфейсов в брэгговском отражении первого порядка и усиление этого вклада в брэгговском отражении второго порядка.

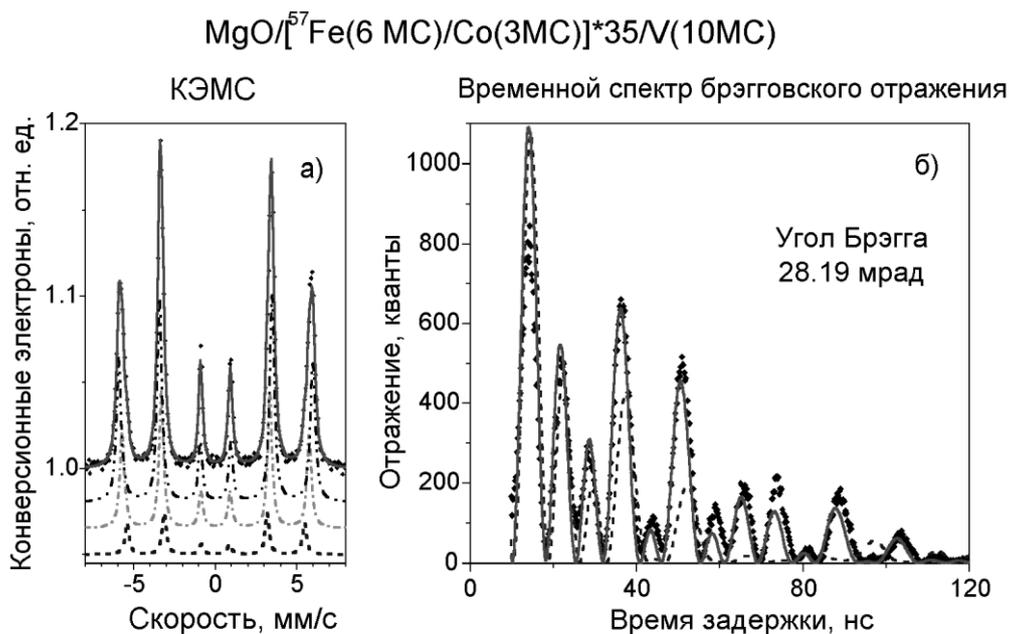


Рис. 2. Мессбауэровский спектр конверсионных электронов (а) и временной спектр брэгговского отражения (б) образца $\text{MgO}/[^{57}\text{Fe}(6 \text{ МС})/\text{Co}(3 \text{ МС})] \cdot 35/\text{V}(10 \text{ МС})$. Точки – эксперимент, сплошные линии – теория. Парциальные секстеты, полученные при обработке КЭМС, смещены вниз для ясности рисунка. Сплошная линия на рис. 2б соответствует модельному расчету, в котором предполагается, что меньшее сверхтонкое поле 33,9 Т находится в области Fe/Co интерфейсов, пунктирная линия – расчет для модели, в которой это поле находится в центральной части резонансных слоев.

присутствие сверхтонкого поля 33,9 (меньшее поле, близкое по величине к полю в чистом α -железе) в центральной части слоя, то есть это сверхтонкое поле должно располагаться в интерфейсе. Аналогичный результат был получен и для другого образца [$^{57}\text{Fe}(5\text{MC})/\text{Co}(5\text{MC})$]*25 [12]. Если исходить из пропорциональности величины сверхтонкого поля на ядре и величины магнитного момента атома, то этот экспериментальный результат находится в противоречии с другими исследованиями системы Fe/Co, в которых наблюдалось увеличение величины магнитных моментов атомов Fe в интерфейсной области [13-14]. Можно предположить, что подобная пропорциональность может нарушаться для границ раздела. Другим объяснением полученного результата может быть неидеальность границы раздела. В пользу этого обстоятельства говорит малая относительная доля этого меньшего поля в КЭМС. Если часть атомов Fe проникает в слои Co, число ближайших соседей Co может быть больше половины, и для этих атомов возможно уменьшение величины магнитного момента и сверхтонкого поля (в сплавах FeCo величина сверхтонкого поля на ядрах Fe увеличивается с увеличением концентрации Co только до ~ 40 ат.%, при дальнейшем увеличении этой концентрации величина сверхтонкого поля на ядрах Fe уменьшается [15]).

Исследование мультислоев $^{57}\text{Fe}/\text{V}$

Мультислои Fe/V проявляют большое разнообразие магнитных свойств (в том числе межслойное магнитное обменное взаимодействие, а также гигантское магнитосопротивление) в зависимости от технологии их выращивания и толщин слоев Fe и V, что определяет большой интерес к исследованию особенностей их структуры.

Эпитаксиальный рост всех многослойных структур $^{57}\text{Fe}/\text{V}$ осуществлялся по технологии, аналогичной изложенной в предыдущем пункте. В данной статье мы приведем результаты исследования образца [$^{57}\text{Fe}(7\text{MC})/\text{V}(10\text{MC})$]*29 с периодом 2,42 нм на MgO подложке с Pd покрытием. Мессбауэровский спектр конверсионных электронов для этого образца приведен на рис. 3б. Он свидетельствует, что магнитные моменты атомов Fe лежат в плоскости пленки и что в образце существует много неэквивалентных положений атомов Fe – спектр был разложен на 6 секстетов.

Брэгговское отражение от периодической многослойной пленки оказалось достаточно сильным (см. рис. 3а), поэтому имело смысл «просканировать» по глубине резонансной пленки при измерении временных спектров ядерно-резонансного отражения с помощью вариации угла скольжения в окрестности брэгговского пика. Подгонка всех трех измеренных временных спектров ядерно-резонансного отражения (рис. 3в) осуществлялась одновременно. При моделировании были использованы результаты обработки кривой зеркального отражения (толщины и электронные плотности слоев), а также параметры и относительные веса парциальных секстетов, полученных при обработке КЭМС (см. рис. 3а и 3б). Варьируемыми параметрами были вероятности нахождения данного типа $\mathbf{V}_{\text{hf},i}$ на заданной глубине в пленке железа, при этом вся пленка разбивалась на 13 подслоев. Учитывалась также возможная диффузия атомов Fe в слои V. Поскольку квантовые биения на измеренных временных спектрах выглядели как одночастотные, было сделано предположение, что образец однодоменный (или, по крайней мере, что размер доменов существенно больше поперечной длины когерентности синхротронного пучка). Азимутальный угол, определяющий направление вектора намагниченности в плоскости образца также варьировался; этот вектор оказался направленным вдоль диагонали квадратной поверхности образца (направление $\langle 100 \rangle$), что соответствовало известным данным об осях легкого намагничивания в Fe/V пленках. Полученные профили распределения $\mathbf{V}_{\text{hf},i}$ ($i=1, \dots, 6$) по глубине бислоя изображены на рис. 3г. Обращает на себя внимание асимметрия распределения резонансных ядер в различных сверхтонких полях, а также тяготение большего поля к интерфейсу V-на-Fe. Аналогичные результаты получены при исследовании пленки [$^{57}\text{Fe}(10\text{MC})/\text{V}(5\text{MC})$]*29 [16]. Полученные картины распределения сверхтонких полей по глубине периода свидетельствует, что реальная

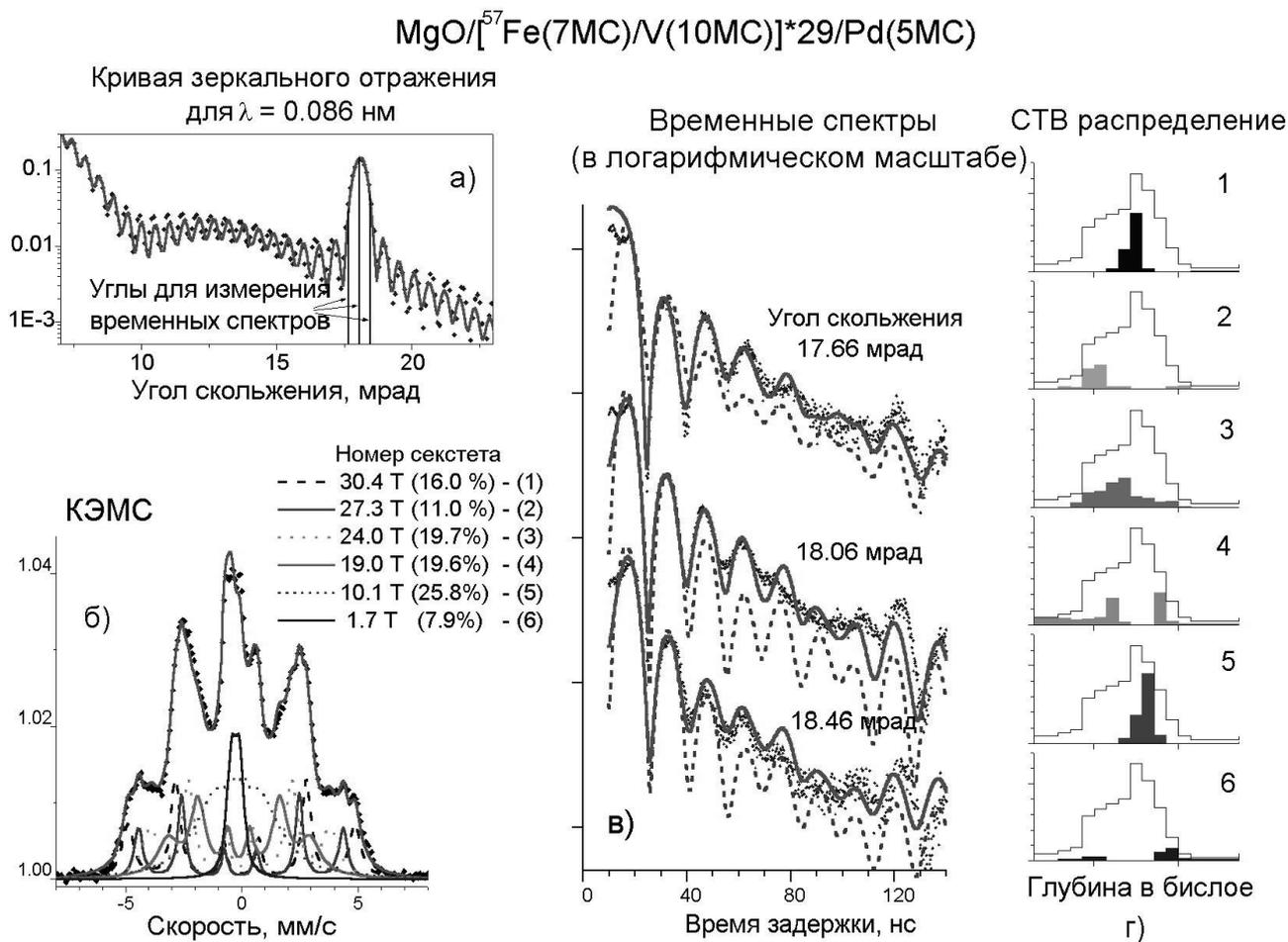


Рис. 3. Экспериментальные результаты для образца $MgO/[^{57}Fe(7MC)/V(10MC)]*29/Pd(5MC)$: а) - кривая зеркального отражения, б) - КЭМС и его разложение на 6 парциальных секстетов, в) – временные спектры ядерно-резонансного отражения для трех углов скольжения (отмеченных на Рис.3а вертикальными линиями) в окрестности брэгговского отражения первого порядка. На всех спектрах точки - экспериментальные данные, сплошные линии – теоретическая обработка. Сплошная линия на рис. 3в соответствует расчету для модели распределения сверхтонких полей, представленной на рис. 3г; пунктирная линия изображает расчетные спектры для идеальной симметричной модели, в которой меньшие по величине сверхтонкие поля расположены в интерфейсной области.

структура исследованных мультислойных пленок Fe/V существенно отличается от теоретических моделей, в которых величина сверхтонкого поля в каждом атомном монослое рассчитывается по наличию ближайших соседей в предположении идеальной границы раздела.

Исследование микрокристаллической многослойной структуры $^{57}Fe/Cr$

Микрокристаллическое многослойное зеркало стекло/ $[^{57}Fe (1,6 \text{ нм})/Cr (1,7 \text{ нм})]*26/Zr (10 \text{ нм})$ с периодом 3,29 нм было изготовлено с помощью магнетронного напыления в Институте физики микроструктур (Нижний Новгород). Мессбауэровский спектр образца представлял собой слегка уширенный секстет с расщеплением, соответствовавшим почти чистому α -железу [9]. Большой коэффициент отражения в первом брэгговском максимуме ($\vartheta_B = 13,6$ мрад) обусловил существенное проявление влияния стоячих волн на временные спектры ядерно-резонансного отражения – рис. 4. Наиболее примечательной особенностью

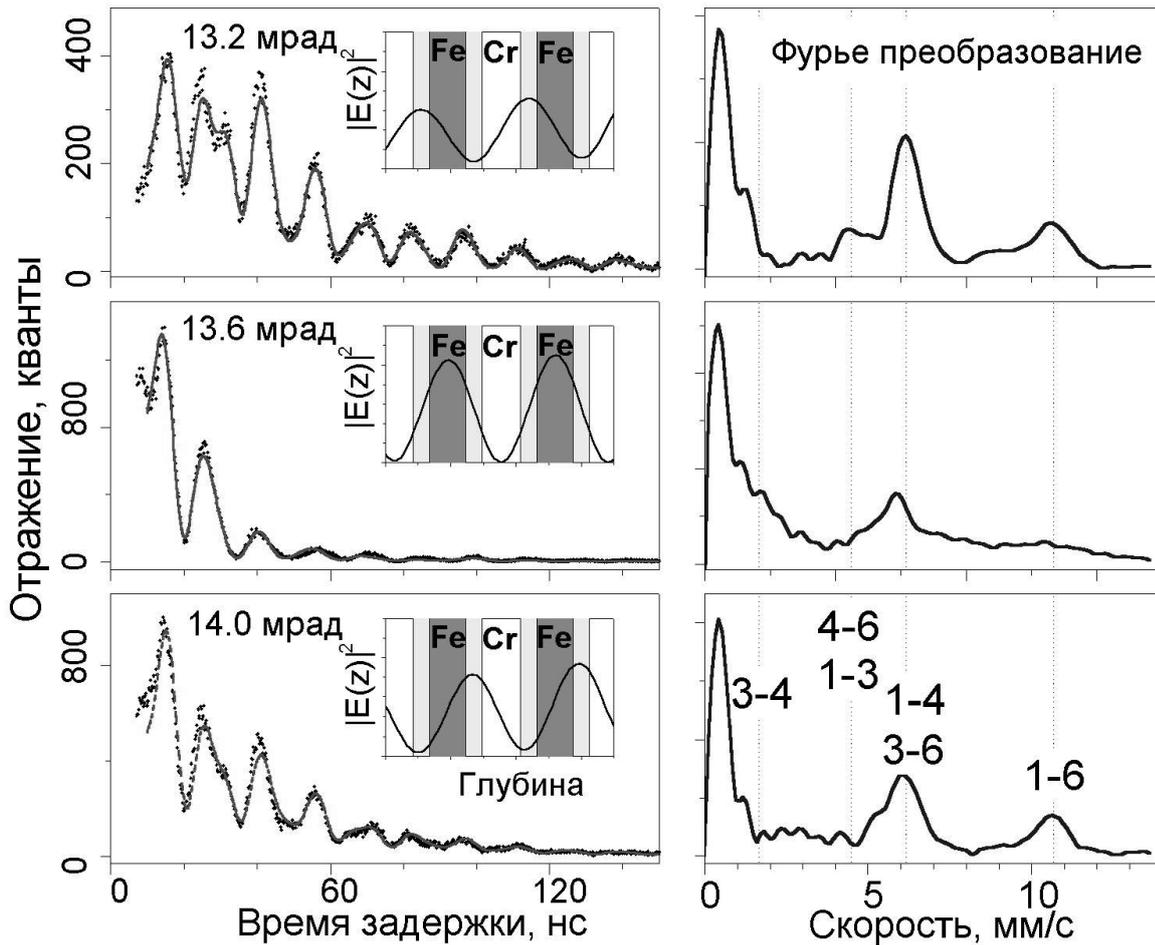


Рис. 4. Экспериментальные временные спектры ядерно-резонансного отражения для многослойного образца стекло/ $^{57}\text{Fe}(1,6 \text{ нм})/\text{Cr}(1,7 \text{ нм})^*26/\text{Zr}(10 \text{ нм})$, измеренные для трех углов скольжения в окрестности брэгговского максимума, (слева) и Фурье преобразование этих спектров (справа). Вертикальные пунктирные линии справа обозначают частоты квантовых биений между сверхтонкими переходами в магнитном спектре рассеяния (номера соответствующих линий в секстете обозначены на нижнем рисунке). Вставки на спектрах слева представляют картину стоячих волн в периодической структуре для начальных времен задержки, когда динамические эффекты еще не сдвигают фазу рассеяния.

изменения формы временных спектров с изменением угла скольжения явилось возникновение новых частот квантовых биений при отклонении от точного угла Брэгга, что хорошо видно из Фурье анализа временных спектров. Исходя из положения пучностей стоячих волн, это обстоятельство можно считать свидетельством, что ориентация сверхтонкого магнитного поля в области интерфейсов носит менее упорядоченный характер, чем в средней части пленок ^{57}Fe , где ориентация \mathbf{V}_{hf} близка к направлению распространения пучка (в этом случае четыре разрешенных мессбауэровских перехода с $\Delta m = \pm 1$ имеют круговую поляризацию, но квантовые биения дают только переходы с одинаковой поляризацией, так что частота биений одна). Количественная обработка спектров подтвердила эти предположения [17,18]. Таким образом, можно считать этот эксперимент первым экспериментальным наблюдением особенностей магнитного упорядочения в слоях Fe, расположенных глубоко внутри структуры (проблема «buried layers»).

Заключение

Ядерно-резонансная рефлектометрия, возникновение и развитие которой в значительной степени обусловлено прогрессом в использовании синхротронного излучения, существенно расширяет возможности мессбауэровской спектроскопии в исследовании ультратонких магнитных слоев, объединяя спектроскопическую и структурную информацию.

Работа поддержана РФФИ (грант № 01-02-17541), Шведской Академии наук и INTAS (№ 01-0822).

Литература

1. Smirnov G. V. // *Hyperfine Interactions*. 1999. V.123/124. P. 31.
2. Ruffer R., Chumakov A.I. // *Hyperfine Interactions*. 1996. V.97/98. P. 589.
3. Bernstein S., Campbell E.C. // *Phys. Rev.* 1963. V.132. P.1625.
4. Irkaev S.M., Andreeva M.A., Semenov V.G. et al. // *Nucl. Instr. and Meth.* 1993. V.B74. P. 545; P. 554; *Nucl. Instr. and Meth.* 1995. V.B103. P. 351.
5. Röhlberger R., Thomas H., Schlage K. et al. // *Phys. Rev. Lett.* 2002. V.89. P.237201.
6. Андреева М.А., Линдгрэн В. // *Письма в ЖЭТФ*. 2002. Т.76. С.833.
7. Séve L., Jaouen N., Tonnerre J.M. et al. // *Phys.Rev.* 1999. V. B 60. P. 9662.
8. Toellner T.S., Sturhahn W., Röhlberger R. et al. // *Phys. Rev. Lett.* 1995. V.74. P. 3475.
9. Andreeva M.A., Irkaev S.M., Semenov V.G. et al. // *J. Alloys & Compounds*. 1999. V.286. P. 322.
10. Andreeva M.A., Irkaev S.M., Semenov V.G. et al. // *Hyperfine Interactions*. 2000. V.126. P. 343.
11. Andreeva M.A. // *JETP Lett.* 1999. V.69. P.863; *Surface Investigations*. 2001. V.16, P.9.
12. Lindgren B., Andreeva M. A., Häggström L. et al. // *Hyperfine interactions*. 2001. V.136/137. P. 439.
13. Swinnen B., Meersschant J., Dekoster J. et al. // *Phys. Rev. Lett.* .1977. V.78. P.362.
14. Dekoster J., Bemelmans H., Degroote S. et al. // *Hyperfine Interactions*. 1995. V.95 P.191.
15. Johnson C.E., Ridout M.S., Cranshaw T.E. // *Proc. Phys. Soc.* 1963. V.81. P.1079.
16. Kalska B., Häggström L., Lindgren B. et al. // *Hyperfine Interactions*. 2001. V.136/137. P. 295.
17. Andreeva M.A., Semenov V.G., Häggström L. et al. // *The Physics of Metals and Metallography*. 2001. V. 91. suppl.1. P.22.
18. Andreeva M.A., Semenov V.G., Lindgren B. et al. // *Hyperfine interactions*. 2001. V.136/137. P.687.

Depth-selective investigations of periodical multilayer magnetic structures by nuclear resonance Bragg reflectivity

M.A. Andreeva

Department of Physics, Moscow State University, 119992 Moscow, Russia

B. Kalska

Uppsala University, Department of Physics, Box 530, 751 21 Uppsala, Sweden

Institute Für Experimentalphysik, Freie Universität, Arnimallee 14, 14195, Berlin, Germany

B. Lindgren, L. Häggström, R. Wäppling

Uppsala University, Department of Physics, Box 530, 751 21 Uppsala, Sweden

V.G. Semenov

Institute of Chemistry, St.Petersburg State University, 199164 St. Petersburg, Russia

N.N. Salashchenko, K.A. Prokhorov

Institute for Physics of Microstructures RAS, 603600, Nizhny Novgorod, Russia

A.I. Chumakov, O. Leupold, R. Rüffer

European Synchrotron Radiation Facility, BP 220, F-38043 Grenoble, France

Abstract. Hyperfine interactions in thin magnetic layers are complicated to interpret (especially in the interface regions). While CEMS characterizes the whole set of hyperfine fields Bhf in a sample, Mössbauer reflectometry measurements allow us to select the depth positions of different Bhf. The new method was tested with the samples [Cr(1.7nm)/⁵⁷Fe(1.6nm)]₂₆ [57Fe(6ML)/Co(3ML)]₃₅, [57Fe(5ML)/Co(5ML)]₂₅, [57Fe(7ML)/V(10ML)]₂₉ and [57Fe(10ML)/V(5ML)]₂₀ (ML is atomic monolayers). By the fit of time spectra of the nuclear resonance Bragg reflectivity we got the depth distribution profiles of the hyperfine fields Bhf across bilayer depth.

УДК 517.946.3

К нелокальным задачам для уравнений в частных производных

А.А. Керефов

Кабардино-Балкарский госуниверситет, Нальчик

Используя конструктивные и дифференциальные свойства функции Грина доказана однозначная разрешимость двух нелокальных задач для параболических уравнений второго порядка.

Для общего уравнения третьего порядка с кратными характеристиками в прямоугольной области доказывается разрешимость в пространстве $W_2^{3,1}(\Omega) \cap L_\infty(0, T; W_2^3(0, 1))$ одной нелокальной по временной переменной краевой задачи.

I. Нелокальные задачи для уравнения параболического типа

Пусть Ω конечная область плоскости независимых переменных x и t , $\Omega = \{(x, t): 0 < x < l, 0 < t < T\}$, в области Ω для неоднородного уравнения Фурье

$$u_t - u_{xx} = f(x, t) \quad (1.1)$$

рассмотрим следующую *нелокальную* задачу:

Найти регулярное в Ω решение $u(x, t)$ уравнения (1.1) из класса $C(\bar{\Omega}) \cap C^1(\Omega)$, удовлетворяющее условиям:

$$u(x, 0) = \sum_{i=1}^n \alpha_i(x) u(x, t_i) + u_0(x), \quad 0 \leq x \leq l, \quad 0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n = T, \quad (1.2)$$

$$u(0, t) = \varphi_0(t), \quad u(l, t) = \varphi_l(t), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (1.3)$$

где заданные функции $\alpha_i(x)$, $u_0(x) \in C[0, l]$, $\varphi_0(t), \varphi_l(t) \in C[0, T]$, причем

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i(0) \varphi_0(t_i) + u_0(0) = \varphi_0(0), \quad \sum_{i=1}^n \alpha_i(l) \varphi_l(t_i) + u_0(l) = \varphi_l(0). \quad (1.3.1)$$

Задача (1.1)-(1.3) примыкает к нелокальным задачам, предложенным в 1979 г. А.М. Нахушевым. Нелокальные краевые задачи с условиями вида (1.2) для широкого класса параболических уравнений второго порядка исследовались в работах [1, 2, 3]. Условия (1.3.1), как вытекает из (1.2) и (1.3), будут представлять собой необходимые условия разрешимости задачи (1.1)-(1.3).

Пусть

$$G(x, t; \xi, \eta) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} (t - \eta)^{-\frac{1}{2}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left\{ \exp \left[\frac{(x - \xi + 2ln)^2}{4(\eta - t)} \right] - \exp \left[\frac{(x + \xi + 2ln)^2}{4(\eta - t)} \right] \right\}$$

функция Грина первой краевой задачи для уравнения (1.1), которая является функцией бесконечно дифференцируемой по своим аргументам и обращается в нуль со всеми своими производными при $t = \eta$, $x \neq \xi$, [4, 5]. С учетом свойств функции $G(x, t; \xi, \eta)$ решение пер-

$$\begin{aligned}
 -\mathfrak{R}(x, \xi) - K(x, \xi) &= \int_0^l K_1(x, s) \cdot K_1(s, \xi) ds + \int_0^l K_1(x, s) \cdot K_2(s, \xi) ds + \dots + \\
 &+ \int_0^l K_1(x, s) \cdot K_{n-1}(s, \xi) ds + \dots = \\
 &= \int_0^l K_1(x, s) \cdot [K_1(s, \xi) + K_2(s, \xi) + \dots + K_{n-1}(s, \xi) + \dots] ds = -\int_0^l K_1(x, s) \cdot \mathfrak{R}(s, \xi) ds.
 \end{aligned}$$

Таким образом, справедливо равенство

$$\mathfrak{R}(x, \xi) + K(x, \xi) = \int_0^l \mathfrak{R}(s, \xi) K(x, s) ds. \tag{1.7}$$

Определение: Два ядра $\mathfrak{R}(x, \xi)$ и $K(x, \xi)$ называются *взаимными* [6], если они оба непрерывны в $[0, l] \times [0, l]$ и удовлетворяют условию (1.7).

Из (1.5) следует, что

$$u(\xi, 0) = u_0(\xi) + F(\xi) + \int_0^l K(\xi, \xi_1) u(\xi_1, 0) d\xi_1.$$

Обе части последнего выражения умножим на $\mathfrak{R}(x, \xi)$, тогда

$$\mathfrak{R}(x, \xi) u(\xi, 0) = \mathfrak{R}(x, \xi) u_0(\xi) + \mathfrak{R}(x, \xi) F(\xi) + \mathfrak{R}(x, \xi) \int_0^l K(\xi, \xi_1) u(\xi_1, 0) d\xi_1.$$

Полученное равенство проинтегрируем по переменной ξ в пределах от 0 до l , в результате:

$$\int_0^l \mathfrak{R}(x, \xi) u(\xi, 0) d\xi = \int_0^l \mathfrak{R}(x, \xi) u_0(\xi) d\xi + \int_0^l \mathfrak{R}(x, \xi) F(\xi) d\xi + \int_0^l \mathfrak{R}(x, \xi) d\xi \int_0^l K(\xi, \xi_1) u(\xi_1, 0) d\xi_1,$$

и переставив порядок интегрирования, окончательно получаем:

$$\int_0^l \mathfrak{R}(x, \xi) u(\xi, 0) d\xi = \int_0^l \mathfrak{R}(x, \xi) [u_0(\xi) + F(\xi)] d\xi + \int_0^l u(\xi_1, 0) d\xi_1 \int_0^l \mathfrak{R}(x, \xi) K(\xi, \xi_1) d\xi,$$

а так как справедливо $\int_0^l \mathfrak{R}(x, \xi) K(\xi, \xi_1) d\xi = \mathfrak{R}(x, \xi_1) + K(x, \xi_1)$, то следовательно имеет место

равенство:

$$\int_0^l u(\xi_1, 0) d\xi_1 \int_0^l \mathfrak{R}(x, \xi) K(\xi, \xi_1) d\xi = \int_0^l u(\xi_1, 0) \mathfrak{R}(x, \xi_1) d\xi_1 + \int_0^l u(\xi_1, 0) K(x, \xi_1) d\xi_1$$

и в результате

$$\int_0^l u_0(\xi) \mathfrak{R}(x, \xi) d\xi + \int_0^l \mathfrak{R}(x, \xi) F(\xi) d\xi + \int_0^l u(\xi, 0) K(x, \xi) d\xi = 0.$$

С учетом последнего выражения, из уравнения (1.5) вытекает справедливость равенства

$$u(x, 0) = u_0(x) + F(x) - \int_0^l \mathfrak{R}(x, \xi) [u_0(\xi) + F(\xi)] d\xi. \tag{1.8}$$

Из (1.8) заключаем, что если уравнение (1.5) имеет непрерывное решение, то оно является единственным и дается равенством (1.8).

В области Ω для параболического уравнения

$$u_{xx} + c(x,t)u - u_t = 0 \quad (1.9)$$

рассмотрим задачу с *локальным смещением* [5, 7, 8]:

Найти регулярное в Ω решение $u(x,t)$ уравнение (1.9), непрерывное в Ω и удовлетворяющее начальному

$$u(x,0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq l \quad (1.10)$$

и краевым условиям

$$u_x(0,t) = 0, \quad u(0,t) = \alpha(t)u(l,t), \quad (1.11)$$

где $c(x,t) \in C(\bar{\Omega})$, $u_0(x) \in C[0,l]$, $\alpha(t) \in C[0,T]$, причем $\alpha(t) \neq 0$, $u_0(0) = \alpha(0)u_0(l)$.

Задача (1.9)-(1.11) при $c(x,t) = const$, $\alpha(t) \equiv 1$ была изучена А.М. Нахушевым [5]. Известно [5,9], что функция Грина смешанной краевой задачи $u_x(0,t) = \varphi_0(t)$, $u(l,t) = \varphi_l(t)$ для уравнения теплопроводности имеет вид:

$$G(x,t;\xi,\eta) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}(t-\eta)^{-\frac{1}{2}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left\{ \exp \frac{(x-\xi+2n)^2}{4(\eta-t)} + \exp \frac{(x+\xi+2n)^2}{4(\eta-t)} - \exp \frac{(x-\xi-2l+2n)^2}{4(\eta-t)} - \exp \frac{(x+\xi-2l+2n)^2}{4(\eta-t)} \right\}, \quad \eta < t.$$

Используя свойства функции $G(x,t;\xi,\eta)$ убеждаемся, что решение $u(x,t)$ задачи $u_x(0,t) = 0$, $u(l,t) = \varphi_l(t)$ для уравнения (1.9) удовлетворяет интегральному уравнению

$$u(x,t) = \bar{u}_0(x,t) + \int_0^l \int_0^t c(\xi,\eta)G(x,t;\xi,0)u(\xi,\eta)d\xi d\eta, \quad (1.12)$$

где $\bar{u}_0(x,t) = \int_0^l G(x,t;\xi,0)u_0(\xi)d\xi + \int_0^t G_\xi(x,t;l,\eta)u(l,\eta)d\eta$.

Пусть $R(x,t;\xi,\eta)$ - резольвента ядра $c(\xi,\eta)G(x,t;\xi,\eta)$ интегрального уравнения (1.12), тогда решение $u(x,t)$ уравнения (1.12) имеет вид [10]:

$$u(x,t) = \bar{u}_0(x,t) + \int_0^t d\eta \int_0^l R(x,t;\xi,\eta)\bar{u}_0(\xi,\eta)d\xi,$$

отсюда с учетом значения $\bar{u}_0(x,t)$ имеем, что

$$\begin{aligned} u(x,t) = & \int_0^t G_\xi(x,t;l,\eta)u(l,\eta)d\eta + \int_0^l G(x,t;\xi,0)u_0(\xi)d\xi + \\ & + \int_0^t d\eta \int_0^l R(x,t;\xi,\eta)d\xi \int_0^\eta G(\xi,\eta;l,\eta_1)u(l,\eta_1)d\eta_1 + \\ & + \int_0^t d\eta \int_0^l R(x,t;\xi,\eta)d\xi \int_0^l G(\xi,\eta;\xi_1,0)u_0(\xi_1)d\xi_1. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Так как

$$\begin{aligned} & \int_0^t d\eta \int_0^l R(x,t;\xi,\eta) d\xi \int_0^\eta G(\xi,\eta;l,\eta_1) u(l,\eta_1) d\eta_1 = \\ & = \int_0^t u(l,\eta) d\eta \int_\eta^t d\eta_1 \int_0^l R(x,t;\xi,\eta_1) G(\xi,\eta_1;l,\eta) d\xi \end{aligned}$$

и положив $N(x,t;\eta) = G_\xi(x,t;l,\eta) + \int_\eta^t d\eta_1 \int_0^l R(x,t;\xi,\eta_1) G(\xi,\eta_1;l,\eta) d\xi$,

$$F(x,t) = \int_0^l G(x,t;\xi,0) u_0(\xi) d\xi + \int_0^t d\eta \int_0^l R(x,t;\xi,\eta) d\xi \int_0^l G(\xi,\eta;\xi_1,0) u_0(\xi_1) d\xi_1,$$

из (1.13) в итоге получаем для $u(x,t)$ представление

$$u(x,t) = \int_0^t N(x,t;\eta) u(l,\eta) d\eta + F(x,t). \tag{1.14}$$

В представлении (1.14), переходя к пределу при $x \rightarrow +0$ и учитывая условие локального смещения, для определения функции $u(l,t)$ получаем уравнение

$$\alpha(t) u(l,t) = \int_0^t N(0,t;\eta) u(l,\eta) d\eta + F(0,t). \tag{1.15}$$

Уравнение (1.15) как интегральное уравнение Вольтера второго рода имеет, и притом единственное решение $u(l,t)$ и поэтому единственное решение задачи (1.9)-(1.11) задается формулой (1.13).

II. К разрешимости нелокальной краевой задачи для уравнения третьего порядка с кратными характеристиками

В области $\Omega = \{(x,t); 0 < x < 1, 0 < t < T\}$ для уравнения

$$Lu \equiv u_t + u_{xxx} + a(x,t)u_{xx} + b(x,t)u_x + c(x,t)u = f(x,t) \tag{2.1}$$

рассматривается **задача**:

Найти решение уравнения (2.1) $u(x,t)$, удовлетворяющее граничным условиям

$$u(0,t) = 0, \quad u(1,t) = 0, \quad u_x(1,t) = 0, \quad 0 < t < T, \tag{2.2}$$

и нелокальному условию

$$u(x,0) = \varphi_0(x) + \sum_{k=1}^m \varphi_k(x) u(x,t_k), \quad 0 < x < 1, \tag{2.3}$$

где $f(x,t)$, $a(x,t)$, $b(x,t)$, $c(x,t)$, $\varphi_0(x)$, $\varphi_k(x)$, $k = \overline{1,m}$ - заданные функции, $0 < t_1 < t_2 < t_3 \dots < t_m \leq T$.

Уравнение (2.1) относится к классу дифференциальных уравнений третьего порядка с кратными характеристиками, исследованию методики постановки корректных краевых задач для уравнений такого вида посвящены работы [11,12].

Задача (2.2), (2.3) для уравнения

$$Lu \equiv u_t + u_{xxx} + \gamma u = f(x, t), \quad \text{где } \gamma = \text{const} > 0$$

исследована в работе Кожанова А.И. [13].

Справедлива **теорема 1:**

Если

$$f(x, t), a(x, t), b(x, t), c(x, t) \in L_2(0, T; W_3^2(0, 1)),$$

$$f(0, t) = f(1, t) = f_x(1, t) = 0, \quad a(0, t) = a(1, t) = a_x(1, t) = 0,$$

$$b(0, t) = b(1, t) = 0, \quad 0 < t < T,$$

$$\varphi_0(x) \in W_3^2(0, 1), \quad \varphi_0(0) = \varphi_0(1) = \varphi_0'(x) = 0,$$

$$\varphi_k(x) \in W_3^2(0, 1), \quad \tilde{\varphi}_1^2 + \tilde{\varphi}_2^2 + \dots + \tilde{\varphi}_m^2 < \frac{1}{m}, \quad \text{где } \tilde{\varphi}_k = \|\varphi_k(x)\|_{L_\infty(0, 1)},$$

тогда краевая задача (2.1)-(2.3) имеет решение $u(x, t)$ из класса

$$W_2^{3,1}(\Omega) \cap L_\infty(0, T; W_2^3(0, 1)).$$

Для доказательства справедливости теоремы 1 использована схема, предложенная в работе [13] опирающаяся на метод параболической регуляризации и метод продолжения по параметру.

Уравнение (2.1) заменим уравнением

$$L_\varepsilon u \equiv u_t + u_{xxx} + au_{xx} + bu_x + u - \varepsilon u_{xxxxx} = f(x, t), \quad (2.4)$$

где $\varepsilon = \text{const} > 0$, $\lambda \in [0, 1]$.

Для регуляризованного уравнения (2.4) рассмотрим *задачу:*

Найти в Ω решение уравнения (2.4), удовлетворяющее краевым условиям (2.2), а также условиям

$$u_{xxx}(0, t) = u_{xxx}(1, t) = 0, \quad u_{xxxx}(0, t) = 0, \quad 0 < t < T \quad (2.5)$$

и нелокальному начальному условию

$$u(x, 0) = \varphi_0(x) + \lambda \sum_{k=1}^m \varphi_k(x) u(x, t_k), \quad 0 < x < 1. \quad (2.6)$$

Имеет место **теорема 2:**

При фиксированном значении $\varepsilon > 0$ и выполнении условий теоремы 1 при условии, что $f(x, t) \in L_2(\Omega)$, задача (2.4), (2.2), (2.5), (2.6) имеет решение $u(x, t) \in W_2^{6,1}(\Omega) \cap L_\infty(0, T; W_2^3(0, 1))$

Пусть M – множество тех чисел $\lambda \in [0, 1]$, для которых задача (2.4), (2.2), (2.5), (2.6) разрешима в пространстве $W_2^{6,1}(\Omega) \cap L_\infty(0, T; W_2^3(0, 1))$ для всех заданных функций, удовлетворяющих заданным условиям. Это множество M является непустым, одновременно открытым и замкнутым, и следовательно множество M будет совпадать с $[0, 1]$.

Доказательство непустоты множества M , его одновременная замкнутость и открытость проводится аналогично работе [13].

Из равенств

$$\int_0^t \int_0^1 u L_\varepsilon u dx d\eta = \int_0^t \int_0^1 f u dx d\eta,$$

$$\int_0^t \int_0^1 u_{xxxxx} L_\varepsilon u dx d\eta = \int_0^t \int_0^1 u_{xxxxx} f dx d\eta,$$

$$\int_0^t \int_0^1 u_\eta L_\varepsilon u dx d\eta = \int_0^t \int_0^1 u_\eta f dx d\eta$$

после интегрирования по частям с учетом условий (2.2), (2.5), (2.6) и того, что $a(x,t) < 0$, $\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} > 0$, $\frac{\partial b}{\partial x} < 0$, $c(x,t) < 0$ в результате применения неравенства Юнга получим справедливость неравенств:

$$\begin{aligned} & \int_0^1 u^2(x,t) dx + \varepsilon \int_0^t \int_0^1 u_{xxx}^2 dx d\eta + \int_0^t \int_0^1 u^2 dx d\eta + \int_0^t u_x^2(0,\eta) d\eta \leq \\ & \leq K_1 \left[\int_0^1 \varphi_0^2(x) dx + \int_0^T \int_0^1 f dx d\eta \right], \end{aligned} \tag{2.7}$$

где K_1 – постоянная, зависящая от a, b, c и $\tilde{\varphi}_k$, $t \in [0, T]$,

$$\begin{aligned} & \int_0^1 u_{xxx}^2 dx + \varepsilon \int_0^t \int_0^1 u_{xxxxx}^2 dx d\eta + \int_0^t \int_0^1 u_{xxx}^2 dx d\eta + \int_0^t u_{xxxx}^2(1,\eta) d\eta \leq \\ & \leq K_2 \left[\int_0^1 \varphi_0^2(x) dx + \int_0^1 \varphi_{0,xxx}^2 dx + \left(1 + \frac{1}{\varepsilon}\right) \int_0^T \int_0^1 f^2 dx d\eta \right], \end{aligned} \tag{2.8}$$

$$\int_0^1 u_x^2(x,\eta) dx + \int_0^1 u_{xx}^2 dx \leq K_3 \left[\int_0^1 \varphi_0^2(x) dx + \int_0^1 \varphi_{0,xxx}^2 dx + \left(1 + \frac{1}{\varepsilon}\right) \int_0^T \int_0^1 f^2 dx d\eta \right], \tag{2.9}$$

где K_2 – const, зависящая от a, b, c , $\tilde{\varphi}_k$, а K_3 – зависит от K_1 и K_2 ,

$$\begin{aligned} & \varepsilon \int_0^t \int_0^1 u_{xxx}^2 dx d\eta + \varepsilon \int_0^t \int_0^1 u_{xxxxx}^2 dx d\eta \leq \\ & \leq K_4 \left[\int_0^1 \varphi_0^2(x) dx + \int_0^1 \varphi_{0,xxx}^2 dx + \left(1 + \frac{1}{\varepsilon}\right) \int_0^T \int_0^1 f^2 dx d\eta \right], \end{aligned} \tag{2.10}$$

$$\int_0^t \int_0^1 u_\eta^2 dx d\eta \leq K_5 \left[\int_0^1 \varphi_0^2(x) dx + \int_0^1 \varphi_{0,xxx}^2 dx + \left(1 + \frac{1}{\varepsilon}\right) \int_0^T \int_0^1 f^2 dx d\eta \right], \tag{2.11}$$

где K_4 и K_5 – const, зависящие от коэффициентов уравнения и заданных функций.

Из неравенств (2.7)-(2.11) нетрудно получить, что для решения задачи (2.4), (2.2), (2.5), (2.6) справедлива оценка

$$\|u\|_{W_2^{6,1}(\Omega) \cap L_\infty(0,T;W_2^3(0,1))} \leq N \left[\|f\|_{L_2(\Omega)} + \|\varphi_0\|_{W_2^3(0,1)} \right] \tag{2.12}$$

где N – постоянная величина, зависящая от φ_k , a, b, c , и ε . Оценка (2.12) позволяет показать непустоту, открытость и замкнутость множества \mathbf{M} , а затем и справедливость теоремы 2, и теоремы 1.

Литература

1. Вабишевич П.Н. Нелокальные параболические задачи и обратная задача теплопроводности, Дифференциальные уравнения, Минск, 17, 1981г. с.1193-1199.
2. Chabrowski J. On nonlocal problems for parabolic equations, Nagoya-Math. J., 93, 1984, p.109-131.
3. Либерман Г.М. Нелокальные задачи для квазилинейных параболических уравнений, международная серия “Нелинейные задачи математической физики и смежные вопросы”, Т. 1, Новосибирск, 2002г. с. 233-254.
4. Берс Л., Джон Ф., Шехтер М., Уравнения с частными производными. М. Наука. 1982г., 351с.
5. Нахушев А.М. Уравнения математической биологии. М. Высшая школа, 1995г., 301с.
6. Ловитт У. В. Линейные интегральные уравнения. М., ГИТ-ТЛ, 1957г., 266с.
7. Стеклов В.А. Основные задачи математической физики. М. Наука. 1983г., 432с.
8. Лажетич Н.А. О существовании классического решения смешанной задачи для одномерного гиперболического уравнения второго порядка. Дифференциальные уравнения, Минск, т. 34 №5, 1998г., с. 682-694.
9. Зоммерфельд А. Дифференциальные уравнения в частных производных физики. М., ИЛ, 1950, 229с.
10. Джураев Т.Д., Сопуев А., Мамажанов М. Краевые задачи для уравнений парабола-гиперболического типа. Ташкент, ФАН, 1986г. 220с.
11. Gattabriga L. Annali della seuola normole Superricri di pisa e mat., 1959, v.13, 2, p. 163
12. Джураев Т.Д. Краевые задачи для уравнений смешанного и смешанно-составного типов. Ташкент, ФАН, 1979г., 238с.
13. Кожанов А.И. О разрешимости нелокальной по времени задачи для одного уравнения с кратными характеристиками, Математические заметки ЯГУ, Якутск, Т.8, вып. 2, 2001г. с. 27-40.

About nonlocal problem for equation with particular derivative

A.A. Kerefov

Kabardino-Balkarian State University, Nalchik

Abstract. By using of constructive and differential properties of Grins function the singularity and existents of two non-local parabolic equations of the second power is proved.

For general equation of third power with multiple characteristic in rectangular domain solvability in space $W_2^{3,1}(\Omega) \cap L_\infty(0, T; W_2^3(0,1))$ of nonlocal (on time variable) boundary problems is proved.

УДК 541.64

Влияние разноразветвленности на термостойкость полиимидов

Т.И. Оранова, И.М. Мамишева

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

А.К. Микитаев

Центр по композиционным материалам, Москва

Методами термогравиметрии и газовой хроматографии в атмосфере воздуха и аргона исследован процесс термического разложения полиимидов, полученных термической циклизацией в твердой фазе полиамидокислот. Установлена зависимость между степенью циклизации полиимидов и их термостойкостью. При получении полиимидов циклизацией полиамидокислот в присутствии азолов образуются полимеры с меньшей степенью разноразветвленности, что приводит к увеличению как термической, так и термоокислительной стабильности. Полученные закономерности для полиимидов применимы к некоторым другим классам полимеров, способных к циклообразованию.

Высокая термическая стабильность – это главное качество ароматических полиимидов (ПИ), резко выдлившее их в свое время среди известных тогда полимеров и определившее их судьбу как технических материалов [1, 2]. Однако, как оказалось, реальная термостойкость ПИ отличается от потенциально возможной, которая определяется прежде всего химическим строением макромолекулы [3].

Основным методом получения ПИ является двухстадийный синтез [4], на первой стадии которого проводят поликонденсацию ароматического диамина с диангидридом тетракарбонной кислоты с образованием растворимой полиамидокислоты (ПАК). На второй стадии под воздействием температуры или химических агентов протекает реакция полициклодегидратации. Особенностью твердофазной термической циклизации ПАК является трудность достижения 100 %-ной степени конверсии, в результате чего образующиеся полимеры являются «дефектными» или «разноразветвленными». Было показано, что разноразветвленность является фактором, существенно влияющим на весь комплекс физических и химических свойств различных полимеров [3].

Исследование полипиромеллитимидов показало, что они содержат значительное количество незациклованных звеньев (дефектов различного химического строения) [5], а следовательно, существуют реальные резервы повышения термостойкости путем уменьшения разноразветвленности.

Условия проведения термической имидизации ПАК определяют термостойкость ПИ, на что указывал еще Брук [6, 7].

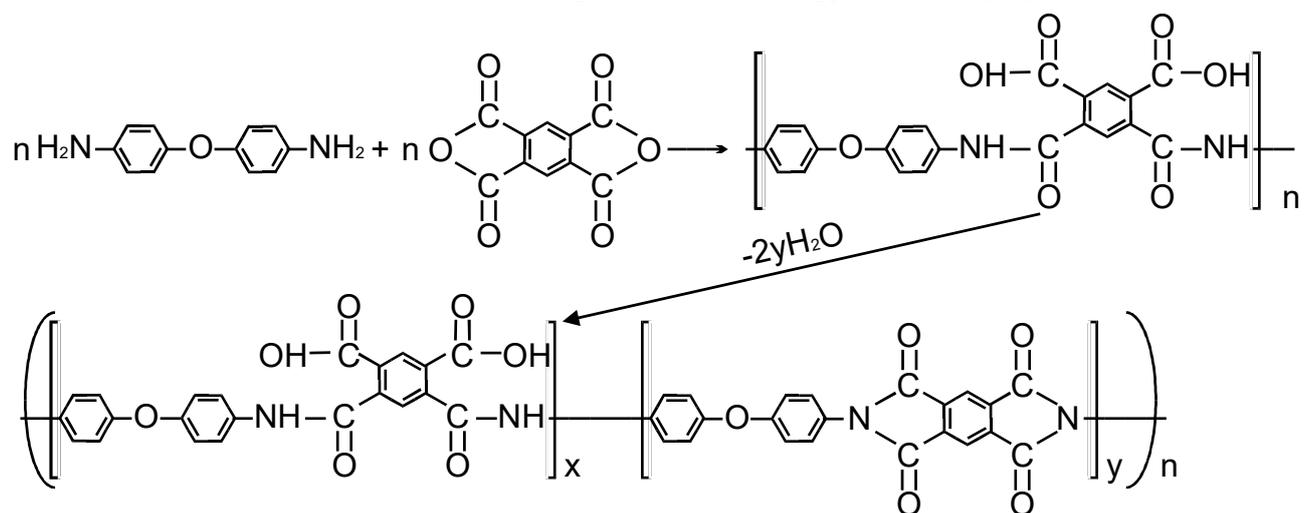
Проведенные ранее нами исследования закономерностей термической циклизации ПАК в ПИ в твердой фазе в присутствии различных добавок показали, что в случае третичных аминов наблюдается ускорение и понижение температурного интервала циклизации, а также увеличение степени циклизации на 5-10% [8, 9]. Изучение кинетики циклизации в присутствии гетероциклических третичных аминов – азолов [9, 10], позволило оценить степень превращения ПАК в ПИ и установить корреляцию между деформационно-прочностными свойствами и степенью циклизации ПИ [11].

Кроме определения степени конверсии ПАК в ПИ, важным является установление химического строения дефектных фрагментов макромолекул, т.е. типа разноразности, отрицательно влияющей на термостойкость полимеров.

В работе [12] указывается, что в ПИ могут содержаться изоимидные дефекты и термоокисление ПИ идет при перегруппировке имид-изоимид. Однако в [13] отмечается, что изоимидные звенья при термической циклизации, если и образуются, то в незначительном количестве и доказательство их образования весьма проблематично.

Теоретические расчеты показали, что в наших условиях получения ПИ основным дефектом является амидокислотная разноразность [14].

Проведенные нами ИК-спектроскопические исследования пленок ПАК, термообработанных до температуры 573 К, подтвердили это присутствием в ИК-спектре полос поглощения, соответствующих незациклизованным карбоксиамидным фрагментам [15]:



В настоящей работе исследовано влияние некоторых третичных аминов на термостойкость полиимидов на основе пиромеллитового диангидрида и диаминодифенилоксида, полученных термической твердофазной циклодегидратацией.

Исследования проводили методами термогравиметрии и газовой хроматографии в атмосфере воздуха и инертного газа аргона.

В табл. 1 приведены данные термогравиметрического анализа (ТГА) на воздухе пленок ПИ, полученных из ПАК в присутствии и без добавок.

Наблюдается значительная разница в температурах начала интенсивной деструкции ПИ, полученных без добавок и в присутствии всех третичных аминов. Однако первые три из представленных являются весьма токсичными реагентами. Наиболее эффективными и экологичными являются добавки азолов, особенно имидазола (температура начала разложения ПИ

Таблица 1

Влияние различных добавок в ПАК на термостойкость образующихся ПИ

| №№ пп | Добавка | Степень циклизации, % | Температура начала деструкции, К | |
|----------|--------------|--------------------------|----------------------------------|----------|
| | | | на воздухе | в аргоне |
| 1 | - | 80 | 673 | 793 |
| 2 | триэтиламин | - | 733 | - |
| 3 | пиридин | - | 748 | - |
| 4 | хинолин | - | 743 | - |
| 5 | имидазол | 90 | 753 | 818 |
| 6 | бензимидазол | 85 | 743 | - |

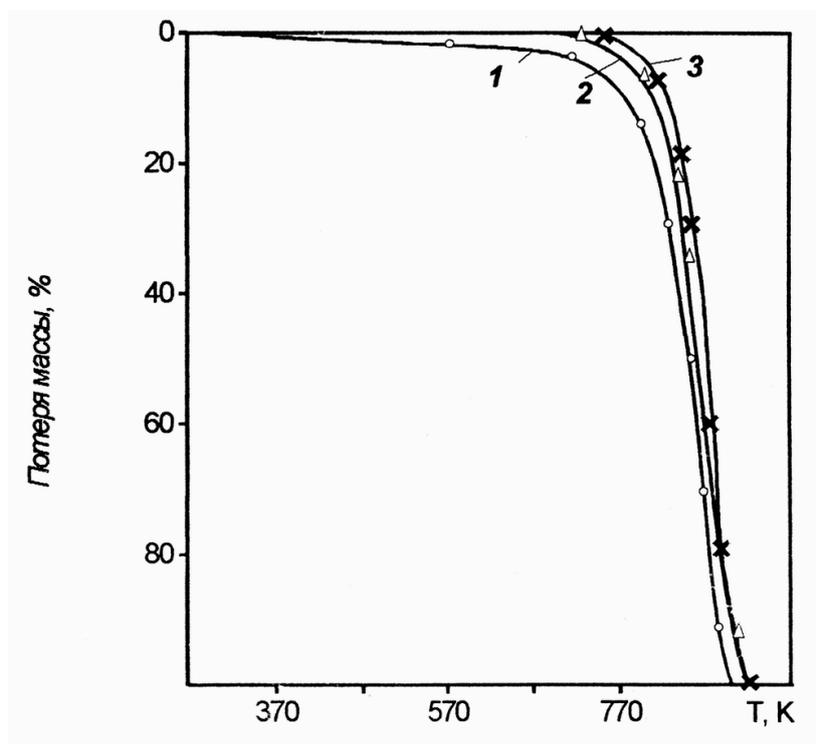


Рис. Кривые ТГА пленок ПИ, циклизованных при 573 К на основе ПАК (1), ПАК+бензимидазол (2) и ПАК+имидазол (3).

в этом случае на 80° выше, чем у ПИ, полученного без добавок).

Имеется хорошее соответствие между степенью циклизации и температурой начала термоокислительной деструкции ПИ. Кроме того, необходимо отметить, что у ПИ, полученного без добавок, наблюдается убыль массы еще до начала разложения (рис. 1).

Отличие термостойкости в различных температурных диапазонах, вероятно, связано с разложением дефектных (незаиклизованных карбоксиамидных) фрагментов, что привело к потерям массы в первоначальный период.

Интересно было сравнить поведение ПИ, полученных циклизацией в присутствии добавок и обычным способом, при нагревании в инертной атмосфере. Результаты ТГА в аргоне пленок ПИ на основе ПАК и ПАК с имидазолом также показывают увеличение термостойкости у ПИ на основе ПАК с имидазолом, хотя разница не столь велика, как на воздухе. Это связано с тем, что при переходе от окислительной атмосферы к инертной меняется механизм деструкции.

Одновременно с потерей массы полимеров фиксировали выход газов, образующихся при деструкции ПИ, таких как СО и СО₂. Кинетика выделения оксидов углерода, их количество и соотношение свидетельствуют об увеличении степени циклизации, т.е. числа имидных циклов в полимерах, полученных в присутствии добавок азолов, а кроме того подтверждают

Таблица 2

Коксовый остаток ПИ при термоударе (1023 К, 120 с) на воздухе

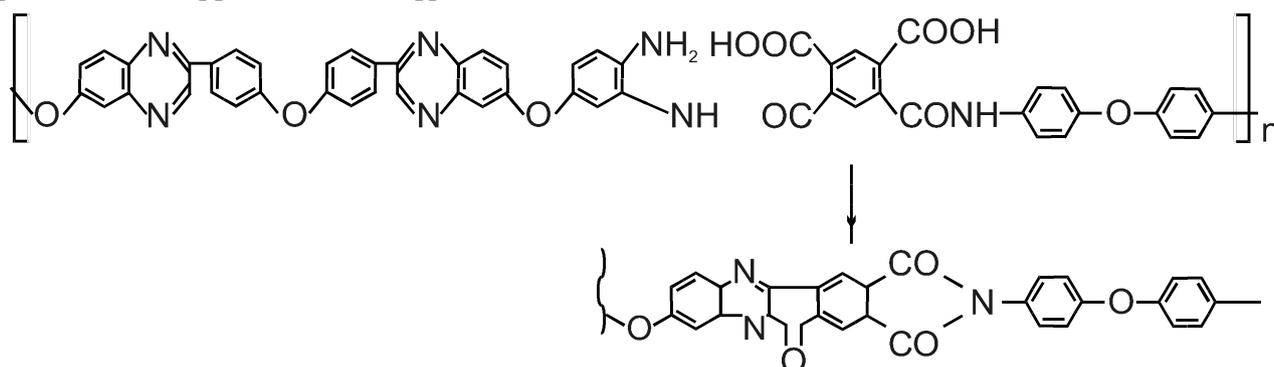
| Добавка | Температура циклизации, К | Степень циклизации, К | Коксовый остаток, % |
|----------|---------------------------|-----------------------|---------------------|
| - | 493 | 65 | 57 |
| - | 573 | 80 | 61 |
| имидазол | 573 | 90 | 64 |

преимущественную карбоксиамидную разноразветвленность.

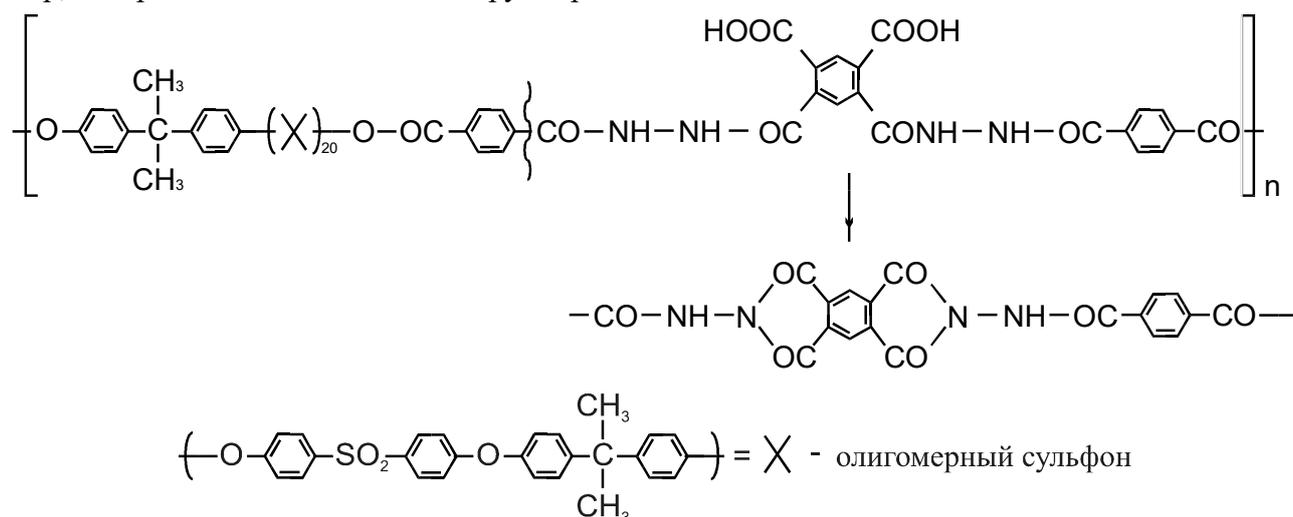
Доказательством получения менее дефектной структуры ПИ в случае способа циклизации в присутствии азолов являются значения коксового остатка при термоударе на воздухе, приведенные в табл. 2. (Данные испытания важны, в том числе, для оценки абляционной стойкости полимерных материалов, применяющихся в аэрокосмической технике).

Проведенные эксперименты свидетельствуют о том, что при получении ПИ циклизацией в присутствии азолов образуются полимеры с меньшей степенью разноразветвленности, что приводит к увеличению как термической, так и термоокислительной стабильности.

Все предыдущие исследования влияния третичных аминов на процесс циклизации полиамидокислот и свойства полиимидов проводились для полимеров на основе пиромеллитового диангида и 4,4'-диаминодифенилового эфира, что обусловлено их практической ценностью. Вместе с тем интересно было проверить применимость полученных закономерностей к другим классам полимеров, способных к циклообразованию. В качестве объектов исследования использовались: сополихиноксалиноаминоамидокислота, циклизующаяся с образованием пирронимидного фрагмента:



и блок-сополисульфонгидразидокислота, которая при термообработке превращается в полимер, содержащий амидоимидные группировки:



При анализе данных ТГА полихиноксалиноаминоамидокислоты наблюдается, как и в случае полиамидокислоты, понижение температуры окончания циклизации: для полимера с добавкой имидазола она заканчивается при 523 К, а без добавки – при 583 К.

Для данных полимеров не проводилось определение значений степени циклизации. Тем не менее, можно предположить уменьшение разноразветвленности сополихиноксалинопирронимида, полученного в присутствии имидазола, по аналогии с полиимидами, о чем свидетельствуют более высокие значения температур начала деструкции и коксового остатка при термоокислении (табл. 3).

Таблица 3

Влияние добавок на циклизацию и термические свойства имидсодержащих полимеров

| Полимер | Добавка | Температура, К | | | Коксовый остаток при ТГА, % |
|------------------------------|----------|----------------------|--------------|------|-----------------------------|
| | | окончания циклизации | потери массы | | |
| | | | 2% | 100% | |
| Сополихиноксалино-пирронимид | - | 583 | 653 | - | 4 |
| | имидазол | 523 | 683 | - | 11 |
| Блок-сополисульфон-амидоимид | - | 493 | 713 | 973 | - |
| | имидазол | 493 | 743 | 993 | - |

Для блок-сополисульфонгидразидокислоты имеет место незначительное ускорение циклизации в присутствии имидазола, которая, однако, заканчивается при одинаковой температуре. Наблюдается небольшое увеличение температуры начала деструкции и полного разложения полимера, полученного в присутствии добавок. То, что эффекты ускорения циклизации и повышения термостойкости в данном случае небольшие, связано с малым содержанием в полимере циклообразующих фрагментов.

Таким образом, при проведении циклизации различных сополимеров в присутствии имидазола наблюдаются те же закономерности, что и для собственно полиимидов, а именно: ускорение циклизации и увеличение их термостойкости.

Экспериментальная часть

Подготовку исходных реагентов и синтез ПАК осуществляли по методикам, приведенным в [16-18]. ПИ получали путем термической циклодегидратации в вакууме пленок полиамидокислот, отлитых на стеклянные пластинки. Циклодегидратацию пленок осуществляли всегда в фиксированном состоянии путем ступенчатого подъема температуры с выдержкой при каждом заданном ее значении по следующему режиму: 333,413,453 – по 0,3 ч, 493, 523, 573 К – по 1 часу.

Образцы сополихиноксалиноаминоамидокислоты и блок-сополисульфонгидразидокислоты синтезированы в лаборатории КБГУ и любезно предоставлены авторам.

Изучение термостойкости полиимидов, а также синтезированных новых полимеров проводилось с помощью динамического термогравиметрического анализа. Исследования на воздухе проводились на дериватографе "МОМ" (Венгрия). Навеска образца 50 мг, скорость нагрева 0,08⁰/с; в среде инертного газа (аргона) – на термовесах совмещенных с газовым хроматографом "Setaram" (Франция), навеска образца 20 мг, скорость нагрева 0,08⁰/с.

Коксовый остаток при термоударе на воздухе определяли следующим образом: навеску образца 50 мг взвешивали на аналитических весах. Помещали в пиролитическую печь, нагретую до температуры 1023 К, после чего охлаждали в эксикаторе и взвешивали.

Литература

1. Полиимиды – класс термостойких полимеров./ Бессонов М.И., Котон М.М., Кудрявцев В.В., Лайус Л.А. Л.: Наука, 1983. 328 с.
2. Polyimides. Synthesis, Characterization, and Applications. Ed. By K.L. Mittal. V.1,2. New York: Plenum Press, 1984.
3. Коршак В.В. Разноразмерность полимеров. М.: Наука. 1977. 302 с.
4. Edwards W.M., Robinson I.M. Полимеры на основе имидов. Пат.2900369 США. – РЖХим. 1961. 18С140.

5. Amborski L.E. H-film – a new high temperature dielectric.// *Ind. And Eng. Chem., Prod. Res. Div.*. 1963. V.2. №3. P.189-196.
6. Bruck S.D. Thermal degradation of an aromatic polypyromellitimides in air and vacuum. 1.Rates and activation energies.// *Polymer*. 1964. V.5 №9. P.435-446.
7. Bruck S.D. Thermal degradation of an aromatic polypyromellitimide in air and vacuum. 2.The effect of impurities and the nature of degradation products.// *Polymer*. 1965. V.6. №1. P.49-61.
8. Микитаев А.К., Коршак В.В., Шелгаев В.Н., Оранова Т.И., Нестеров В.М. Влияние добавок на характер термической циклизации полиамидокислоты основе пиромеллитового диангидрида и 4,4'-диаминодифенилового эфира. // *Высокомолек. соед. Б*. 1982. Т.24. №3. С. 191-194.
9. Микитаев А.К., Куашева В.Б., Таова А.Ж., Оранова Т.И., Коршак В.В. Кинетика твердофазной циклизации полипиромеллитамидокислоты в присутствии катализатора. // *Высокомолек. соед. Б*. 1983. Т. 25. №6. С. 412-414.
10. Берикетов А.С., Куашева В.Б., Оранова Т.И., Таова А.Ж., Микитаев А.К. О предельной степени циклизации полиамидокислот в твердом состоянии. // *Высокомолек. соед. А*. 1986. №6. С. 1330-1333.
11. Микитаев А.К., Оранова Т.И., Кештов М.М. Деформационно-прочностные свойства пленок полиамидокислот в процессе каталитической циклизации. // *Высокомолек. соед. А*. 1985. Т. 27. №10. С. 2184-2190.
12. Коршак В.В., Цейтлин Г.М., Кулагин В.Н., Павлов А.И. Термостойкость полимеров, содержащих бензгетероциклы. // *Пластмассы*. 1972. №2. С.40-42.
13. Ламская Е.В., Свиридов Е.Б., Берендяев В.И., Котов Б.В. Электронные спектры поглощения и донорно-акцепторный характер изоимидных структур в ароматических полиимидах. // *Высокомолек. соед. Б*. 1988. Т.30. №9. С.700-704.
14. Микитаев А.К., Берикетов А.С., Коршак В.В., Таова А.Ж. Влияние дефектов химической структуры полиимидов на их термостойкость. // *Высокомолек. соед. А*. 1983. Т.25. №8. С.1691-1696.
15. Оранова Т.И., Микитаев А.К. Катализ реакции циклизации полиамидокислот.// *Межвуз. сб. Каталитические реакции мономеров и полимеров*. Чебоксары. 1988. С. 72-76.
16. Оранова Т.И. Исследование взаимодействия полиамидокислот с азолами и сравнение их активности при циклизации. // *Межрегион. сб. Актуальные вопросы современного естествознания*. Нальчик: КБГУ, 2003. С. 106-116.
17. Сёренсон У., Кемпбел Т. Препаративные методы химии полимеров. М.: Издат. ин. лит. 1963.
18. Гордон А., Форд Р. Спутник химика. М.: Мир, 1976. 438 с.

Influence the different unit structure on a thermal stability of polyimides

T.I. Oranova, I.M. Mamisheva

Kabardino-Balkarian state university, Nalchik

A.K. Mikitaev,

Composite materials center, Moscow

Abstract. The methods of a thermogravimetric and gas chromatography in an atmosphere of air and argon research the process of thermal decomposition of polyimides obtained by thermal ring formation in a solid phase of polyamic acids. The dependence between a degree of ring formation of polyimides and their thermostability is placed. At obtaining polyimides the ring formation polyamic acids at the presence of azoles will derivate polymers with a smaller different unit structure that reduces in increase as thermal, and thermooxidize of stability. The obtained legitimacies for polyimides are applied to some other classes of polymers capable to cyclization.

УДК 61

Зависимость от алкоголя и морфина и один из подходов к ее лечению

Т.В. Проскурякова

Национальный научный центр наркологии Минздрава России, Москва

Рассмотрены обсуждаемые в научной литературе механизмы формирования зависимости от психоактивных веществ: алкоголя и морфина. Наиболее доказанной является теория, связывающая развитие алкогольной зависимости с нарушением обмена дофамина в мезолимбической области мозга, ответственной за регуляцию эмоциональной сферы. В качестве ведущего фактора развития опиатной зависимости рассматривается изменение трансдукции внутриклеточного сигнала после активации опиоидных рецепторов на уровне систем вторичных посредников. Обсуждается способность нейропептида холецистокинина модифицировать дофамин- и опиоидергическую нейротрансмиссию. Приводятся экспериментальные данные о возможности купирования основных проявлений алкогольной и опиоидной зависимости (толерантности, синдрома отмены и влечения к алкоголю и морфину) с помощью пептидного соединения, созданного путем модификации эндогенного тетрапептида холецистокинина.

В настоящее время актуальной проблемой во всем мире является постоянно возрастающее употребление психоактивных веществ (ПАВ), особенно среди молодежи. К психоактивным относятся вещества, которые по механизму действия на центральную нервную систему (ЦНС) можно разделить на три группы:

вещества, оказывающие седативное воздействие на ЦНС (алкоголь, опиаты и седативные лекарственные препараты);

вещества, оказывающие стимулирующее воздействие на ЦНС (кофеин, кокаин, амфетамин, летучие растворители, никотин);

галлюциногены, оказывающие возбуждающее воздействие на кору головного мозга (ЛСД, "экстази", диметоксибромамфетамин и др.).

Длительное употребление ПАВ приводит к развитию вначале психической зависимости, которая характеризуется появлением после прекращения употребления ПАВ таких симптомов, как компульсивное влечение к ПАВ, агитация, тревога и депрессия. Затем развивается и физическая зависимость от ПАВ, проявляющаяся формированием абстинентного синдрома. Последний развивается в условиях отмены ПАВ после их продолжительного употребления и, помимо симптомов психической зависимости характеризуется физиологическими нарушениями: повышением температуры тела, учащением пульса, тремором, тошнотой, потливостью, а в некоторых случаях и судорогами. Абстинентный синдром является одним из основных клинических критериев развернутой стадии алкоголизма, наркоманий и токсикоманий. Неблагоприятные медико-социальные последствия этих заболеваний определяют необходимость разработки эффективных средств их лечения. Известные фармакологические препараты, применяемые в настоящее время в наркологической клинике, довольно эффективно купируют различные проявления абстинентного синдрома, но, к сожалению, не способствуют наступлению у больных стойкой и длительной ремиссии [8]. Для решения этой проблемы необходима разработка новых лекарственных препаратов на основе более углубленного представления о патогенетических механизмах формирования зависимости от ПАВ.

Зависимость от ПАВ имеет психологическую и физиологическую составляющие, поэтому патогенетические механизмы ее формирования являются предметом исследований не только экспериментальной и клинической наркологии, но и нейрофизиологии, психологии личности, поведенческой психологии и других научных дисциплин.

Согласно одной из психологических теорий, начало формирования любой зависимости всегда происходит на эмоциональном уровне [10]. Для человека свойственно стремление к психологическому комфорту и этот психологический комфорт может достигаться различными путями, например, преодолением препятствий и достижением значимых целей; удовлетворением любопытства; реализацией исследовательской и творческой работы; проявлением эмпатии к другим людям, оказанием им помощи и поддержки.

Но возможен и иной путь достижения психологического комфорта – это употребление ПАВ. При этом мотивации употребления ПАВ могут быть самыми разными. Одни люди прибегают к употреблению ПАВ для устранения или смягчения эмоционального дискомфорта, вызванного тревогой, страхом, подавленным настроением, межличностными конфликтами, другие люди – с целью вывести себя из состояния пассивности, безразличия, апатии и бездействия. Часто люди употребляют ПАВ, чтобы испытать чувство радости, удовольствия, эйфории.

Помимо этого существуют субмиссивная и псевдокультурная мотивации употребления ПАВ. В основе первой лежит неспособность человека противостоять давлению окружающих и отказаться от предлагаемого окружающими приема ПАВ, тогда как вторая обусловлена причастностью к традициям, культуре либо отражает желание человека принадлежать к избранному кругу лиц. При псевдокультурной мотивации важным является не столько употребление ПАВ вещества, сколько демонстрация этого процесса окружающим.

Независимо от того, какая мотивация лежит в основе употребления ПАВ, их злоупотребление приводит к существенным нарушениям биохимических процессов в различных структурах мозга, а в ряде случаев – к формированию зависимости.

В настоящее время наиболее изученной является алкогольная зависимость. Формированию алкоголизма как прогрессивного заболевания предшествует длительный период бытового пьянства. При этом необходимо подчеркнуть два момента. Во-первых, чем в более раннем возрасте начинается злоупотребление алкоголем, тем быстрее происходит трансформация бытового пьянства в алкоголизм. И, во вторых, формирование алкоголизма более вероятно у людей с наследственной алкогольной отягощенностью, под которой понимают алкоголизм одного или обоих родителей, а также их близких родственников [46].

Согласно сложившимся представлениям, процесс формирования зависимости от алкоголя в значительной степени связан с его подкрепляющими эффектами, как позитивным, так и негативным. С помощью нейрофизиологических исследований было установлено, что позитивный подкрепляющий эффект проявляется в способности алкоголя вызывать состояние эйфории. Этот эффект алкоголя наблюдается в течение ограниченного промежутка времени после приема алкоголя, когда концентрация алкоголя в крови повышена, и сопровождается увеличением электрической активности мозга и двигательной активности [35]. Негативный подкрепляющий эффект алкоголя связывают с его анксиолитическим действием, т.е. со способностью купировать состояние тревоги. Правда, этот эффект алкоголя не всегда регистрируется в экспериментальных моделях тревоги у животных, а также у добровольцев в условиях алкогольной нагрузки [37]. Тем не менее, купирование симптомов алкогольного абстинентного синдрома алкоголем доказывает его негативный подкрепляющий эффект [43]. Установлено, что подкрепляющие эффекты алкоголя опосредуются в ЦНС каскадом нейрохимических процессов, в который вовлечены практически все нейромедиаторные и нейромодуляторные системы [45, 48, 58].

На настоящий момент наиболее обсуждаемой является теория, связывающая механизм формирования алкогольной зависимости с нарушением обмена дофамина (ДА) в структурах мезолимбической системы мозга [1].

В последнее десятилетие особый интерес вызывает изучение обмена ДА в *n. accumbens*, расположенном в вентральной области переднего мозга. Доказано, что импульсы ДА-содержащих нейронов *ventral tegmental area*, расположенной в вентральной области среднего мозга, поступают в задний отдел *n. accumbens*, и эта иннервация рассматривается в качестве ведущего фактора в реализации подкрепляющих эффектов алкоголя и других ПАВ. Установлено, что активация проводящего пути *ventral tegmental area* – *n. accumbens* любым ПАВ может изменить не только двигательную активность, но и мотивацию поступков, реакцию на стресс. Этот "нейронный ансамбль" часто называют "системой подкрепления или награды". Вместе с тем, в передний отдел *n. accumbens* проецируется импульсная активность аналогичных нейронов из коры больших полушарий, что позволяет обсуждать участие мезокортико-лимбических структур мозга в развитии зависимости от алкоголя и других ПАВ.

Ряд исследователей связывают нейрхимический механизм формирования алкогольной зависимости с повышением обратного захвата ДА нейрональными клетками и усилением процесса его деградации, которые при длительном употреблении алкоголя приобретают постоянный характер. Отмена этанола после длительного его употребления ведет к мобилизации процессов синтеза, выброса и сохранения ДА в синаптической щели. Однако разбалансированная в результате длительной алкогольной интоксикации ДА-система реагирует на отмену этанола таким образом, что происходит не нормализация уровня ДА, а чрезмерное возрастание его содержания, вследствие чего и развивается алкогольный абстинентный синдром [7]. Последний, как отмечалось выше, характеризуется наличием тревожных или депрессивных расстройств, а также физиологических нарушений, степень выраженности которых позволяет судить о тяжести физической зависимости от алкоголя. В период синдрома отмены у больных алкоголизмом актуализируется патологическое влечение к алкоголю. При этом установлена тесная связь патологического влечения к алкоголю, его обострений или редукции, с усилением или ослаблением депрессивных или дисфорических расстройств у больных алкоголизмом [9]. Согласно опубликованным данным, симптомы депрессии наблюдаются у 30-60% больных алкоголизмом, (Bronisch T., 1985), а 32% больных с аффективными расстройствами имеют ту или иную форму зависимости, включая длительное злоупотребление алкоголем [33].

В основе многочисленных биохимических, в том числе и нейрхимических эффектов, вызываемых алкоголем, лежит его способность к неспецифическому взаимодействию с биологическими мембранами. Алкоголь, растворяясь в липидном матриксе мембран, повышает их текучесть и, тем самым, способствует увеличению степеней свободы мембраносвязанных белков. Следствием этого, вероятно, является снижение конформационной стабильности указанных молекул, сопровождающееся, в частности, падением сродства рецепторов к специфическим лигандам. При этом не исключен и процесс погружения мембраносвязанных белков внутрь клетки, в результате чего может уменьшаться число рецепторов на мембране клетки.

Способность алкоголя изменять липидный матрикс мембран приобретает решающий характер при его длительном введении. В мембранном бислое развиваются изменения, направленные на минимизацию разжижающего действия этанола за счет накопления в мембранах таких веществ, как холестерин, насыщенные жирные кислоты, некоторые фракции фосфолипидов. Особая роль при этом отводится холестерину, концентрация которого в мембране определяет не только глубину погружения мембраносвязанных белков и эффективность работы мембранных насосов, но и подвижность углеводородных цепей в фосфолипидном бислое мембран. Эти изменения в липидном матриксе нейрональных мембран приводят к

увеличению содержания рецепторов на фоне падения их связывающей активности, от которой в значительной степени зависит реализация пре- и постсинаптических процессов.

В литературе обсуждается гипотеза, согласно которой адаптационные изменения в липидной структуре мембраны делают ее резистентной к действию алкоголя, что и приводит к развитию толерантности и физической зависимости. Согласно другой точке зрения, алкоголь модифицирует синтез, освобождение и метаболизм практически всех нейромедиаторов, и формирование толерантности и зависимости от этанола является следствием именно этих процессов. На самом деле эти две точки зрения, по-видимому, взаимосвязаны, так как адаптационные изменения липидной структуры мембран при хроническом введении алкоголя модифицируют транспорт ионов, изменяя, таким образом, распространение электрического потенциала действия вдоль аксона и освобождение нейромедиаторов из его окончания.

С мембранотропным эффектом алкоголя связывают и один из механизмов его токсического действия, особенно в тканях, где метаболизируется основная часть поступающего в организм алкоголя. Наиболее высокая активность алкоголь-метаболизирующих ферментов алкогольдегидрогеназы (АДГ) и ацетальдегиддегидрогеназы (АцДГ) регистрируется в тканях печени. Некоторым авторам удается регистрировать активность АДГ и в тканях мозга.

Установлено, что у людей с низкой активностью АДГ повышен риск формирования алкогольной зависимости, тогда как у людей с высокой активностью АДГ при злоупотреблении алкоголем повышен риск возникновения соматических заболеваний таких, как алкогольный гепатит и алкогольный цирроз печени, алкогольная кардиомиопатия [14]. Следует отметить, что повышенный риск возникновения соматических расстройств при высокой активности АДГ, под действием которой из алкоголя образуется ацетальдегид, вероятен только в тех случаях, когда снижена активность АцДГ, расщепляющей ацетальдегид на ацетат и ацетилкоэнзим А. Возникновение соматических заболеваний в этом случае связано не столько с токсическими эффектами самого алкоголя, сколько с токсическими эффектами ацетальдегида, который обладает более выраженной токсичностью, чем алкоголь. Благодаря высокой реакционной способности, ацетальдегид взаимодействует с различными эндогенными соединениями (например, с изохинолинами), в результате чего образуются опиатоподобные вещества. На основании этого документированного многочисленными исследованиями факта в свое время обсуждалась гипотеза, рассматривающая в качестве механизма формирования алкогольной зависимости нарушения со стороны опиатных систем мозга.

Что касается наркоманий, то, согласно эпидемиологическим исследованиям, наиболее часто потребляемыми наркотическими средствами в России являются опий кустарного производства, героин и его самостоятельные аналоги [11], и поэтому основной проблемой является опиоидная наркомания.

Длительное применение морфина ведет к развитию толерантности к его депрессивному действию (например, к анальгетическому эффекту), тогда как стимулирующие эффекты морфина (например, усиление сокращения гладкой мускулатуры) не изменяются. Толерантность к морфину может очень быстро достигать большой выраженности: в среднем больные наркоманией для достижения желаемого эффекта могут принимать до 300 мг морфина в день.

Наркотическое действие морфина, с которым связывают изменение восприятия боли при его введении, обычно сопровождается повышением настроения, ощущением душевного комфорта, положительным восприятием окружающей среды, независимо от реальной действительности. Эйфоризирующий эффект морфина наиболее выражен при его повторном применении, однако у некоторых людей отмечается обратное явление – плохое самочувствие и отрицательные эмоции. Именно со способностью морфина вызывать эйфорию и связывают формирование зависимости от него.

Необходимо отметить, что при злоупотреблении алкоголем формирование абстинентного синдрома происходит обычно через 5-10 лет, тогда как при злоупотреблении наркотиков этот период сокращается до нескольких недель или месяцев в зависимости от интенсивности

наркотизации. Так, при регулярном введении морфина в терапевтических дозах через каждые 4 часа уже через 24 часа развивается физическая зависимость, т.е. формируется абстинентный синдром, структура которого отличается от алкогольного абстинентного синдрома рядом специфических вегетативных реакций. Если употребление наркотиков не прекращается, то через 3-4 года больные становятся недееспособными либо погибают.

В отличие от алкоголя, действие морфина в организме опосредуется опиоидными рецепторами μ -типа, локализованными в ЦНС и на периферии. Плотность μ -рецепторов убывает в следующем ряду структур головного мозга: стриатум, неокортекс, таламус, прилежащее ядро, гиппокамп, миндалина [6]. Менее богаты μ -рецепторами задние рога спинного мозга, околоспинальное серое вещество и ядра шва. Очень низка плотность μ -рецепторов в гипоталамусе. На периферии μ -рецепторы обнаруживаются в *p.vagus*, симпатических ганглиях, а также в тканях сердца и желудочно-кишечного тракта (ЖКТ). В сердце плотность μ -рецепторов особенно высока в сердечном ганглии и параганглиальных клетках.

Опиоидные μ -рецепторы относятся к метаботропному типу, т.е. передача информации внутрь клетки после связывания с агонистом осуществляется путем модуляции различных систем вторичных посредников при участии ассоциированных с мембраной гуаниннуклеотидсвязывающих белков – G-белков.

Существует вероятность того, что возбуждающие и угнетающие эффекты морфина опосредуются различными подтипами опиоидных μ -рецепторов – μ_1 - и μ_2 -рецепторами. Однако данные генетического анализа не подтверждают этого [20]. Тем не менее, имеются убедительные свидетельства, что опиоидные рецепторы сопряжены не только с тормозными (G_i), но и с возбуждающими G_s -белками, хотя не исключено, что это может быть одна популяция рецепторов, ассоциированная с различными G-белками [53].

Наряду с данными об отсутствии изменений связывающей активности μ -рецепторов при длительном введении морфина [61], сообщается и о резком снижении их плотности и/или аффинности в различных структурах головного мозга экспериментальных животных. Изменения связывающей активности μ -рецепторов, скорее всего, имеют адаптационный характер и реализуются по принципу отрицательной обратной связи, и этот механизм, по-видимому, лежит в основе развития толерантности к морфину. Однако, как показали экспериментальные исследования, снижение плотности μ -рецепторов при длительном введении морфина не коррелирует с концентрацией m-RНК для одного из типов μ -рецепторов у крыс – μ_1 -рецепторов [24]. В связи с этим сложилось представление, что уровень экспрессии опиоидных μ -рецепторов не является определяющим фактором при развитии толерантности и зависимости к морфину.

В настоящее время в качестве ведущего фактора развития опиоидной толерантности и зависимости рассматривается изменение модуляции систем вторичных посредников. Наиболее изученными путями трансдукции внутриклеточного сигнала с участием опиоидных рецепторов являются модуляция активности аденилатциклазы, фосфолипазы C, потенциалзависимых кальциевых каналов и калиевых каналов.

Длительное введение морфина сопровождается повышением активности аденилатциклазы и ц-АМФ-зависимой протеинкиназы-A в прилежащем ядре, голубом пятне, миндалине и таламусе [57]. В гиппокампе, мозжечке, черной субстанции, вентральной области покрышки и околоспинальном сером веществе эти показатели остаются в пределах нормы. Существенным образом при длительном введении морфина изменяются и уровни G-белков, в основном, тормозных. Так, в прилежащем ядре отмечается понижение содержания G_i -белка, тогда как в миндалине, напротив, – увеличение. В литературе имеются сведения о нарушениях в этих условиях экспрессии m-RНК, кодирующих синтез G-белков [47]. Аналогичные изменения вызывает и героин.

Наиболее вероятный механизм дезинтеграции аденилатциклазной системы при длительном введении морфина связан с нарушением процесса взаимодействия опиоидных рецепто-

ров с G-белками. Изменения аденилатциклазной активности лежат в основе одной из гипотез развития опиатной толерантности [5]. Согласно этой гипотезе, связываясь со специфическими рецепторами, морфин вызывает ингибирование аденилатциклазы. Если действие морфина продолжается, то включаются компенсаторные клеточные механизмы, благодаря которым происходит увеличение числа молекул аденилатциклазы и, следовательно, повышение концентрации ц-АМФ до нормального уровня. Компенсаторная реакция включает также "up-регуляцию" ц-АМФ-зависимой системы вторичных посредников, например, увеличение активности протеинкиназы А, что, в свою очередь, может вызывать адаптивные изменения в опиоидных μ -рецепторах. Стоит отметить, что в развитии опиатной толерантности определенную роль могут играть и другие регуляторные процессы, такие, как десенситизация и интернализация опиоидных μ -рецепторов.

Морфин обладает более выраженным токсическим действием, чем алкоголь. Механизмы токсического действия морфина точно не установлены, но есть основания полагать, что значительную роль в них играет способность морфина изменять фосфолипидный состав клеточных мембран путем активации свободнорадикального перекисного окисления липидов [19].

Реализация мембранотропного эффекта морфина наиболее вероятна в тканях, где присутствуют опиоидные μ -рецепторы, и в первую очередь, в тканях мозга. Характерными изменениями при остром введении морфина являются хроматоллиз, набухание и вакуолизация цитоплазмы нейронов, а при хронической интоксикации морфином – сморщивание и липидная дистрофия с последующей гибелью нервных клеток. В литературе имеются сведения об увеличении при длительном введении морфина числа полисом и их скоплений в агранулярной эндоплазматической сети нейронов. Подобные изменения наблюдаются не только в телах нейронов, но и в пре- и постсинаптических образованиях, что вызывает нарушение процессов нейрональной передачи на различных уровнях ЦНС.

Вопрос об участии различных нейромедиаторных, в том числе и дофаминовой, систем в развитии толерантности и зависимости от опиатов находится на стадии накопления фактического материала, который требует дальнейшего осмысления.

В последнее время при изучении нейрохимических механизмов формирования зависимости от алкоголя и морфина внимание исследователей все больше привлекают различные нейропептиды, которые являются модуляторами нейромедиаторных процессов в мозге, а некоторые из них сами выполняют функции нейромедиаторов. К числу таких нейропептидов относится холецистокинин (cholecystokinin, ССК), синтезируемый не только в ткани поджелудочной железы, но и в нервной ткани, вероятно, как про-ССК, который затем расщепляется протеолитическими ферментами на ряд биологически активных фрагментов. Наиболее изученными являются октапептидный и тетрапептидный фрагменты, ССК-8 и ССК-4, соответственно. Установлено, что 90% ССК-подобных пептидов в ЦНС представлено ССК-8, сульфатированным по тирозину в положении 7, ССК-8(S) [22]. Действие биологически активных фрагментов ССК опосредуется двумя типами рецепторов: ССК1- и ССК2-рецепторами, локализованными как в периферических тканях, так и в ЦНС [28]. При этом ССК-8(S) обладает выраженной селективностью к ССК1-рецепторам, тогда как ССК-4 – к ССК2-рецепторам.

Установлено, что после приема этанола в плазме крови в несколько раз возрастает уровень ССК, который одновременно действует на ЖКТ, уменьшая его перистальтику (21), и стимулирует через специфические рецепторы афферентные пути *p.vagus*, с последующим распространением ССК-импульса в ядро солитарного тракта и далее в ствол мозга, мост и гипоталамус, где находится центр насыщения [23]. Действуя как сигнал насыщения, ССК ограничивает потребление этанола посредством обратной связи с нейроэндокринными процессами, регулирующими энергетический баланс в организме.

Вместе с тем считается доказанным, что животные ограничивают потребление этанола с целью снижения аверсивных эффектов алкогольной интоксикации, к которым в большей степени относятся тошнота и утомление, чем насыщение [40]. Mosher J.T. et al. (1996) удалось доказать, что ССК-8(S) при периферическом введении в высоких дозах индуцируют аверсивные реакции. Поэтому можно думать, что вовлеченность ССК-пептидов в процесс регуляции потребления этанола осуществляется как посредством контроля за энергетическим балансом, так и путем индукции аверсивных эффектов алкогольной интоксикации.

При алкогольной интоксикации в процесс ограничения потребления алкоголя включается и другой фактор, а именно, активность алкоголь-метаболизирующих систем организма [39]. У интактных животных доказана прямая связь между потреблением алкоголя, активностью АДГ и АцДГ печени и скоростью элиминации алкоголя из крови [38]. Существует определенная связь и между активностью некоторых изоформ АцДГ эритроцитов и чувствительностью к алкоголю [27].

Вопрос о том, стимуляция какого типа ССК-рецепторов наиболее значима для проявления ингибирующего эффекта ССК на потребление этанола, широко обсуждается в литературе. Многолетнее изучение эффектов ССК-8(S) в условиях алкогольной нагрузки позволило прийти к заключению, что стимуляция центральных и периферических ССК1-рецепторов приводит к более выраженному снижению потребления этанола животными, чем стимуляция периферических и центральных ССК2-рецепторов [30].

Для экспериментальной наркологии наибольший интерес представляет характер влияния ССК-пептидов на потребление этанола у животных с различной чувствительностью к этанолу, различным предпочтением этанола в условиях свободного выбора, а также у животных со сформированной в результате длительной алкоголизации зависимостью.

Используя животных с высокой и низкой чувствительностью к этанолу (мышей линий HAS и LAS, соответственно), Kulkosky P.J. et al. (1993) не обнаружили различий в потреблении этанола между животными линий HAS и LAS при периферическом введении ССК-8(S).

Медведева О.Ф.(1997) наблюдала снижение потребления этанола у предпочитающих этанол животных только при центральном введении ССК-8(S). При этом ССК-8(S) не изменял потребления этанола у отвергающих этанол животных.

Вместе с тем в литературе встречаются принципиально другие данные, согласно которым антагонист ССК1-рецепторов (L 364,718) снижает потребление этанола у предпочитающих этанол животных и не оказывает эффекта у отвергающих этанол животных [26]. При этом, как оказалось, у предпочитающих этанол животных ССК-ергический сигнал в *p.assumbens* был выше, чем у отвергающих этанол животных.

Вопрос о механизме действия ССК-пептидов в условиях хронической алкогольной интоксикации, особенно на стадии сформированной зависимости от алкоголя остается открытым. И, прежде всего, остается открытым вопрос о характере взаимодействия ССК-пептидов с ДА-системой, нарушения функционирования которой в мезолимбической области мозга, как отмечалось выше, принято считать нейрхимической основой формирования зависимости от алкоголя. В некоторых структурах мезолимбической области мозга таких, как стриатум, *p.assumbens* и черная субстанция ССК-пептиды локализованы в ДА-содержащих нейронах [52]. В этих морфологических структурах высока плотность ССК- и дофаминовых рецепторов (D-рецепторов).

Биохимические и электрофизиологические исследования обнаружили способность ССК-пептидов модулировать электрическую активность ДА-содержащих нейронов, освобождение ДА [42], связывающие характеристики D-рецепторов [50], ДА-индуцируемую аденилатциклазную активность (55), а также индуцируемые ДА поведенческие реакции [59].

Следует подчеркнуть, что изменение содержания ДА и его метаболитов в некоторых структурах мозга одни авторы обнаруживают при введении агонистов ССК-рецепторов [36, 12], а другие – при введении антагонистов ССК-рецепторов [32, 34]. При этом и в том, и в

другом случае в одних структурах мозга наблюдается увеличение содержания ДА и его метаболитов, тогда как в других, напротив, снижение.

Таким образом, способность модулировать ДА-систему свойственна как агонистам, так и антагонистам ССК-рецепторов, что позволяет рассматривать их в качестве потенциальных терапевтических средств для лечения алкогольной зависимости. Именно поэтому многочисленные работы последнего десятилетия посвящены разработке новых лигандов ССК-рецепторов различной химической природы. Одно из таких соединений было разработано в НИЦ наркологии путем модификации эндогенного ССК-4. Новое пептидное соединение, условно названное аналогом ССК-4, обладало выраженной избирательностью с ССК1-рецепторам.

Как показали проведенные исследования, аналог ССК-4 подавлял у длительно алкоголизованных животных алкогольную мотивацию и сокращал продолжительность действия наркотической дозы этанола [2, 15], а в условиях отмены алкоголя купировал состояние тревоги [3, 18]. Нейрохимический механизм действия аналога ССК-4 был связан с нормализацией функционирования ССК-системы во фронтальной коре и гипоталамусе и обмена ДА в среднем мозге. Таким образом, была продемонстрирована способность аналога ССК-4 воздействовать на дофаминергическую нейротрансмиссию в условиях длительной алкогольной интоксикации, а также в период отмены алкоголя.

В последнее время растет число доказательств взаимодействия ССК- и опиоидной систем при реализации анальгетического действия опиатов [60]. При этом в качестве основного аргумента приводятся данные о том, что опиоидные и ССК-пептиды обнаруживаются в одних и тех же морфологических структурах ЦНС [54], а в некоторых структурах эти пептиды локализованы в одних и тех же нейронах [51].

Первым сообщением о способности эндогенного ССК модифицировать анальгетическое действие морфина была работа X.L.Ding et al. (1986), которые обнаружили, что у животных, получавших антисыворотку против ССК-8, морфин индуцировал более выраженный анальгетический эффект, чем у контрольных животных.

Затем Li Y. и Han J.S. (1989) установили, что введение ССК-8, предшествующее введению морфина, снижает анальгетическое действие последнего, и этот эффект ССК-8 полностью обращается антагонистами ССК-рецепторов. Причем проглюмид (антагонист ССК2-рецепторов) блокирует ингибирующий эффект ССК-8 при концентрации 5 мг, тогда как девазепид (антагонист ССК1-рецепторов) – при значительно более высоких концентрациях (50-200 мг), что позволяет связывать антиопиоидное действие ССК-8 с активацией ССК2-рецепторов.

L.F. Felício et al. (2001) показали, что у животных, которым вводили лорглюмид (антагонист ССК1-рецепторов) либо РД-135,158 (антагонист ССК2-рецепторов) морфин вызывал более выраженный анальгетический эффект, чем у контрольных животных. По мнению авторов, эти данные указывают на то, что антиопиоидное действие ССК опосредуется активацией обоих типов ССК-рецепторов.

Сами антагонисты ССК-рецепторов, как правило, не обладают анальгетическим действием, но при совместном введении с морфином потенцируют анальгетический эффект последнего [56]. Это свойство антагонистов ССК-рецепторов имеет прямое клиническое применение, так как позволяет уменьшать дозу морфина и частоту его введения при использовании морфина в качестве обезболивающего средства.

В связи с этим была предпринята попытка оценить действие аналога ССК-4 на такие проявления длительного употребления морфина, как толерантность к анальгетическому эффекту морфина, формирование зависимости и влечение к морфину. Оказалось, что аналог ССК-4 при однократном введении потенцировал анальгетическое действие морфина, и этот эффект был наиболее выражен, когда введение аналога ССК-4 предшествовало введению морфина [4, 16]. Такой режим введения аналога ССК-4 и морфина позволял снижать дозу последнего при сохранении его анальгетического эффекта.

Введение аналога ССК-4 на фоне длительной морфинизации частично предотвращало развитие толерантности к анальгетическому эффекту морфина, практически в два раза снижало тяжесть физической зависимости от морфина, а при введении в период длительной отмены морфина подавляло влечение к морфину у животных со сформированной опиатной зависимостью [17].

Что касается механизма фармакологической активности аналога ССК-4, то было установлено, что при его введении изменяется связывающая активность опиоидных μ - и δ -рецепторов во фронтальной коре и стриатуме. Эти данные, а также выявленная в экспериментах *in vitro* способность аналога ССК-4 препятствовать связыванию селективного агониста (ДАГО) с μ -рецепторами дают основание обсуждать следующую ситуацию: аналог ССК-4, связываясь со специфическими рецепторами, вызывает конформационные изменения в структуре μ -рецепторов, в результате чего десенситизация μ -рецепторов и последующая активация специфических для морфина элементов сигнальной трансдукции происходит менее интенсивно. Вероятно, поэтому тяжесть физической зависимости у животных, получавших морфин в сочетании с аналогом ССК-4, менее выражена, чем у животных, получавших один морфин.

В то же время способность аналога ССК-4 потенцировать анальгетический эффект морфина и его анксиолитическая активность позволяют рассматривать аналог ССК-4 в качестве антагониста ССК1-рецепторов. Поэтому для объяснения снижения тяжести физической зависимости у животных, получавших морфин в сочетании с аналогом ССК-4, может быть предложен и другой механизм. А именно, блокирование ССК1-рецептора аналогом ССК-4 повреждает процесс спаривания $G_{i\alpha}$ -белка с опиоидным μ -рецептором, уменьшая таким образом ингибирование аденилатциклазной активности. Не исключено, что в условиях блокирования ССК1-рецептора при активации морфином μ -рецептора реализуется иной каскад сигнальной трансдукции, ведущий к увеличению образования ц-АМФ.

Таким образом, полученные экспериментальные данные дают основание говорить об эффективности использования аналога ССК-4 для коррекции поведенческих и нейрохимических эффектов алкоголя и морфина, а разработанный подход к синтезу аналога ССК-4 может быть использован при создании принципиально нового класса лекарственных препаратов для лечения алкоголизма и наркоманий.

В заключение хотелось бы отметить, что наибольший терапевтический эффект при лечении алкоголизма и наркоманий достигается при условии сочетания фармакологического лечения с клинико-психологической интервенцией, направленной на коррекцию у больных восприятия, внимания, памяти, речи, мышления, эмоциональных и мотивационных расстройств. При этом первым важным этапом лечения следует рассматривать выработку у больного мотивации на лечение. В отличие от большинства психических расстройств, при которых больные активно заинтересованы в лечении, при злоупотреблении ПАВ мотивация к лечению чрезвычайно слаба. Лишь по прошествии многих лет, когда негативные последствия употребления ПАВ становятся сильнее позитивных, больные готовы начать лечение. К негативным последствиям относятся соматические заболевания, социальная изоляция из-за потери работы и круга знакомых, а также проблемы с законом, запрещающим употребление, например, наркотиков в немедицинских целях. Для того, чтобы люди с уже сформированной зависимостью от ПАВ захотели пройти курс лечения, необходимо сформировать у них активное желание и, главное, решимость и готовность сделать это. Решение этой трудной задачи включает осознание человеком своих истинных чувств при употреблении ПАВ, преодоление психологической защиты и осмысление деструктивности своего поведения.

Литература

1. Анохина И.П. //Вопр. наркологии. – 1995. – № 2. – С. 27-31.
2. Анохина И.П., Проскурякова Т.В., Беспалова Ж.Д. и др. //Патент на изобретение № 2142470. – М., 1999.
3. Анохина И.П., Проскурякова Т.В., Беспалова Ж.Д. и др. //Патент на изобретение № 2142813. – М., 1999.
4. Анохина И.П., Проскурякова Т.В., Панкратова Н.В. и др. //Патент на изобретение № 2213572. – М., 2003.
5. Беспалов А.Ю., Звартау Э.Э. //Нейропсихофармакология антагонистов NMDA-рецепторов. – 2000. – Санкт-Петербург. – 295 с.
6. Головки А.И., Коноплин Д.А., Некрасов А.Н. и др. //Нейрохимия. – 2000. – Т. 17. – №1. – С. 3-12.
7. Дмитриева Т.Б., Дроздов А.З., Коган Б.М. //Клиническая нейрохимия в психиатрии. – М., 1998. – 298 с.
8. Иванец Н.Н., Анохина И.П., Валентик Ю.В. и др. // Вопр.наркол.- 1991. – №3. – С. 13-16.
9. Иванец Н.Н., Анохина И.П., Коган Б.М. и др. //Вопр.наркологии. – 1997. – № 2. – С. 18-26.
10. Карвасарский Б.Д. //Клиническая психология. – 2002. – Санкт-Петербург. – 956 с.
11. Козловский А.В., Лелевич В.В., Виницкая А.Г. и др. //Вопр.наркол. – 1999. – №1. – С. 79-84.
12. Медведева О.Ф., Судаков С.К., Киинмаа К. //Журн. эксперим. и клинич. фармакологии. – 1996. – Т. 59. – № 6. – С. 44-47.
13. Медведева О.Ф. Влияние холецистокинина на поведенческие и нейрохимические эффекты этанола у крыс. //Автореф. канд. дисс. – М. – 1997. – 20 с.
14. Огурцов П.П. Роль хронической алкогольной интоксикации и генетического полиморфизма алкогольдегидрогеназы в формировании патологии внутренних органов. //Автореф. докт. дисс. – М. – 2002.- 50 с.
15. Проскурякова Т.В., Петриченко О.Б., Панкратова Н.В. и др. //“Рос. психiatr. журнал”. – 2000. – №4. – С. 69-74.
16. Проскурякова Т.В., Петриченко О.Б., Панкратова Н.В., Шоханова В.А. // “Нейрохимия”. – 2003. – Т. 20. – №1. – С. 28-34.
17. Проскурякова Т.В., Панкратова Н.В., Петриченко О.Б.и др. //“Рос. психiatr. журнал”. – 2003. – №3. – С. 55-58.
18. Проскурякова Т.В., Петриченко О.Б., Панкратова Н.В. и др. // “Наркология”. – 2002. – №4. С. 7-11.
19. Соловьева А.Г. Изменение обмена липидов и перекисное окисление липидов при острой и хронической интоксикации морфином и промедолом. //Автореф. канд. дисс. – М. – 1995. – 20 с.
20. Akil H., Owens G., Gutstein H. et al. //Drug Alcohol Depend. – 1998. – V. 51. – P. 127-140.
21. Backus R.C., Howard K.A., Rogers Q.R. //Regulatory Peptides. – 1997. – V. 72. – P. 31-40.
22. Beinfeld M.C., Palkovits M. //Neuropeptides. – 1981. – V. 2. – P. 123-129.
23. Branchereau P., Champagnat J., Rogues B.P., Denavit-Saubie M. //Neuroreport. – 1992. – V. 3. – P. 909-912.
24. Brodsky M., Elliott K., Hyansky A., Inturrisi C.E. //Brain Res. Bull. – 1995. – V. 38. – P. 135-141.
25. Bronisch T. //Fortschr.Neurol.Psychiatr. – 1985. – V. 53. – P. 454-468.
26. Crespi F. //Methods Find Exp. Clin. Pharmacol. – 1998. – V. 20. – P. 679-697.
27. Daoust M., Lhuintre J.P., Moore N. et al. //Alcohol and Alcoholism. – 1987. – V. 22. – P. 409-414.
28. Dethloff L.A., de la Iglesia F.A. //Drug Metab. Rev. – 1992. – V. 24. – P. 267-293.
29. Ding X.Z., Fan S.G., Zhou J.P., Han J.S. // Neuropharmacology. – 1986. -V. 25. – P. 1155-1160.
30. Dorre D., Smith G.P. //Physiol. Behav. – 1998. – V. 65. – P. 11-14.
31. Felicio L.F., Mazzini B.K., Cacheiro R.G., Cruz T.N., Florio J.C., Nasello A.G. // Peptides. – 2001. – V. 22. – P. 1299-1304.
32. Fukamauchi F., Wang Y.J., Mataga N., Kusakabe M. //Neuroreport. – 1997. -V. 2. – P. 3919-3922.
33. Hippus H., Ackenheil M. //Медикография – 1994. – Вып. 56. – Т. 16.-
34. № 1. – С. 24-28.
35. Ivengar S., Li D., Simmons R.M. et al. //Society for Neuroscience Abstracts. – 1993. – V. 19. – P. 469.
36. June H.L., Hughes R.W., Spurlock H.L., Lewis M.J. //Psychopharmacol. – 1994. – V. 115 – P. 332-339.
37. Kihara T., Ikeda M., Matsubara K., Matsushita A. //Eur. J. Pharmacol. – 1993. – V. 230. – P. 271-277.
38. Koob G.F., Braestrup C., Thatcher Britton K. //Psychopharmacol. – 1986 – V. 90. – P. 173-178.

39. Kulkosky P.J., Cornell N.W. //Pharmacol. Biochem. Behav. – 1979. – 40. V. 11. – P. 439-444.
41. Kulkosky P.J., Chavez M.R. //Alcohol. – 1984. – V. 1. – P. 409-412.
42. Kulkosky P.J. //Neurosci. Biobehav. Rev. – 1985. – V. 9. – P. 179-190.
43. Kulkosky P.J., Clayborne Y.J., Sandoval S.L. //Alcoholism: Clin. Exp. Res. – 1993. – V. 17. – P. 545-551.
44. Ladurelle N., Keller G., Rogues B.P., Dauge V. //Brain Res. – 1993. – V. 628. – P. 254-262.
45. Lewis M.J. //Alcohol and Alcoholism. – 1996. – V. 31. – P. 17-25.
46. Li Y., Han J.S. // Brain Res. – 1989. – V. 480. – P. 105-110.
47. Lin A.M.Y., Freund R., Palmer M.R. //Neurosci. Lett. – 1991. – V. 122. – P. 154-158.
48. Maier W. //Zeitschrift fur Klinische Psychologie. – 1995. – V.24. – P. 147-158.
49. Martin S., Manzanares J., Corchero J. et al. // Brain Res. – 1999. – V. 821. – P.350-355.
50. McBride W.J., Murphy J.M., Lumeng L., Li T.K. //Alcohol. – 1990. – V. 7. – P. 199-205.
51. Mosher J.T., Johnson M.F., Birkemo L.S., Ervin G.N. //Peptides. – 1996. – V. 17. – P. 483-488.
52. Murphy R.B., Schuster D.I. //Peptides. – 1982. – V. 3. – P. 539-543.
53. Pohl M., Benoliel J.J., Bourgoin S. // J. Neurochem. – 1990. – V. 55. – 54. P. 1122-1130.
55. Seroogy K., Schalling M., Brene S. et al. //Exp. Brain Res. – 1989. – V. 74. – P. 149-156.
56. Singh V.K., Bajpai K., Biswas S. et al. //Neuroimmunomodulation. – 1997. – V. 4. – P. 285-297.
57. Skinner K., Basbaum A.I., and Fields H.L. // Neuroreport. 1997. – V. 8. – 58. P. 2995-2998.
59. Snyder G.L., Fisone G., Morino P. et al. //Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 1993. – V. 90. – P. 11277-11281.
60. Stanfa L., Dickenson A., Xu X.J., Wiesenfeld-Hallin Z. //Trends Pharmacol. Sci. – 1994. – V. 15. – P. 65-66.
61. Terwilliger R.L., Beitner-Johnson D., Sevarino K.A. et al. // Brain Res.- 1991. – V. 548. – P. 100-110.
62. Tsai G., Gastfriend D.R., Coyle J.T. //Amer. J. Psychiatry. – 1995. – V. 152. – P. 332-340.
63. Van Kampen J., Frydryszak H., Stoessl A.J. //Eur. J. Pharmacol. – 1996. – V. 298. – P. 7-15.
64. Wiesenfeld-Hallin Z., de Araujo Lucas G., Alster P., Xu X.-J., Hokfelt T. // Brain Res. – 1999. – V.848. – P. 78-89.
65. Wong C.S., Cherng C.H., Zuk H. et al. //Eur. J. Pharmacol. – 1996. – V. 297. – P. 27-33.

Alcohol and morphine dependence and one of the methods for the treatment

T.V. Proskuryakova

National Research Center on Addictions Russian Federation Ministry of Health, Moscow

Abstract. Plausible mechanisms of the formation to alcohol and morphine dependence are discussed. From all evidence the mechanism of alcohol dependence is connected with the disfunction of dopamine metabolism in brain mesolimbic structures, which play the main role in regulation of the emotions. The disorder of intracellular signal transduction, including systems of the second messengers, upon activation of opioid receptors was found to be the important factor of morphine dependence. The ability of cholecystokinin neuropeptide to modificate of dopamine- and opioidergic neurotransmission is discussed. Experimental results about the efficiency of new peptide for the treatment of the symptoms of alcohol and morphine dependence (tolerance, withdrawal, alcohol and morphine craving) are given. This peptide is synthetic analog of endogenous cholecystokinin tetrapeptide.

УДК 621.9.06

Моделирование и многокритериальная оптимизация параметров механических систем

А.Х. Тлибеков

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

Рассматриваются проблемы автоматизированного проектирования механических систем, реализуемого CAD/CAE технологиями. В настоящее время основными вопросами моделирования и многокритериальной оптимизации параметров механических систем, которые определяют успех автоматизированного проектирования, являются методика расчета контактной жесткости деталей механической системы и выбор математической модели, обеспечивающей оценку эффективности, по критериям, не имеющим одинаковую размерность. Приведены примеры расчета контактной жесткости и оптимизации параметров механизма.

Введение

Успех автоматизированного проектирования, реализуемого CAD/CAE технологиями, во многом определяет адекватность математической функциональной модели и возможность синтеза оптимальных параметров механизма. Алгоритмы анализа процессов в механической системе, реализованные в различных прикладных программах компьютерного моделирования, используют метод конечных элементов (МКЭ).

Когда для проведения анализа рассматривают спектр собственных частот, параметрами математической модели механической системы являются значения инерции и жесткости звеньев, а также жесткость контакта между звеньями. Расчет жесткости звеньев выполняют по уравнениям теории упругости.

Внешние нагрузки при компьютерном моделировании представляют в виде давления, равномерно или неравномерно распределенного по поверхности, равномерной силы или силы с переменной интенсивностью, приложенной к поверхности, к ребру (линия пересечения поверхностей) или к вершине (пересечение ребер), в виде гравитационных или центробежных сил. Моделируют также тепловые воздействия, конвекцию, радиацию.

Однако многие механические системы, с которыми приходится сталкиваться в инженерной практике, недетерминированы. Каждая серия измерений внешней нагрузки представляет специфическую реализацию, которую нельзя предсказать с большой точностью. Моделирование частотных характеристик механической системы в условиях случайных внешних нагрузок должно выполняться методами спектрального анализа, а в случае переходных процессов вместо спектральной плотности “мощности” необходимо использовать спектральную плотность “энергии” [1].

Существующие автоматизированные методы оптимизации параметров механических систем, в качестве целевой функции рассматривают один из следующих критериев качества: объем или вес, предельную статическую величину внешней нагрузки, первую собственную частоту колебаний. Управляемыми параметрами в процессе оптимизации являются размеры звеньев механической системы (т.е. осуществляется поиск оптимальной формы звена механизма), а ограничения задаются значениями напряжений, деформаций или смещений звеньев, предельными статиче-

ской внешней нагрузкой или температурой, спектром собственных частот, тепловым потоком и поверхностной плотностью теплового потока. При этом различают “возможный проект” как результат оптимизации, который удовлетворяет всем ограничениям и “оптимальный проект” - возможный проект при значении целевой функции, наиболее близком к оптимальному.

Синтез оптимальных параметров механизма в настоящее время неэффективен. Главная причина этого состоит в том, что специалисты не могут корректно поставить задачу оптимизации, и, прежде всего, назначить критерий оптимальности сложной конструкции, эксплуатационное качество которой невозможно оценить значением одного показателя. В результате решение инженерной задачи, как правило, не имеет прикладного значения.

Рассмотрим некоторые подходы к решению указанных проблем.

1. Моделирование жесткости контакта

Уравнения равновесия сил на контакте, для линейной упругой модели материала контактирующих тел, записываются в следующем виде [2]:

$$[C]\{Y\}=\{R\},$$

где $[C]$ - матрица жесткости контакта, $\{Y\}$ и $\{R\}$ - вектора перемещений и внешних нагрузок на контактных поверхностях.

Эти уравнения являются прямым следствием принципа минимума потенциальной энергии, согласно которому из всех осуществимых конфигураций перемещений на контакте равновесной будет конфигурация, минимизирующая потенциальную энергию:

$$V=1/2\{X\}^T[C]\{X\}-\{X\}^T\{R\}.$$

Компьютерная реализация метода конечных элементов для решения контактных задач моделирует контакт при статическом действии внешних нагрузок. Рассматриваются следующие условия контакта звеньев: неподвижное соединение; свободное скольжение поверхностей, включая их взаимное проникновение и скольжение только вдоль контактных поверхностей (эффект, аналогичный трению).

Как правило, в большинстве конструкций контактная жесткость ниже жесткости звеньев. Этому в значительной степени способствуют микронеровности поверхностей. Уменьшение жесткости механической системы снижает собственные частоты, в результате чего увеличивается вероятность резонанса. Повысить адекватность модели позволит расчет контактной жесткости, выполненный по уравнениям, учитывающим реальные поверхности контакта.

До начала контакта уравнения поверхности тел задаются функциями $f_1(x)$ и $f_2(x)$. Вследствие деформации после приложения сжимающих сил тела переместятся поступательно. Координаты точек $y_1(x)$ и $y_2(x)$ на линии контакта тел определяются деформациями микровыступов их поверхностей $K_1p(x)$ и $K_2p(x)$ и сближением $\delta = \delta_1 + \delta_2$ [3 - 5]:

$$y_1(x) + y_2(x) = \delta - f_1(x) - f_2(x)$$

$$y_1(x) = \theta_1 \int_{-x_0}^{x_0} p(\xi)L(x, \xi)d\xi - K_1p(x)$$

$$y_2(x) = \theta_2 \int_{-x_0}^{x_0} p(\xi)L(x, \xi)d\xi - K_2p(x)$$

где ξ и x – координаты точек контакта (рис. 1); K_1 и K_2 – контактная податливость; $\theta_{1,2} = \frac{1 - \nu_{1,2}^2}{E_{1,2}}$, $\nu_{1,2}$ и $E_{1,2}$ – коэффициенты Пуассона и модули упругости контактируемых тел.

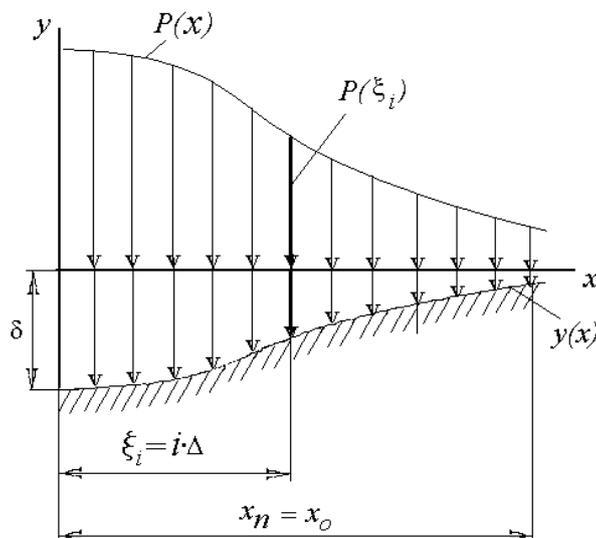


Рис. 1. Схема расчета контактных давлений

Функция $L(x, \xi)$ определяет распределение давлений по линии контакта и зависит от формы тел, находящихся в контакте и от граничных условий.

Одним из наиболее эффективных методов решения интегрального уравнения, позволяющим реализовать алгоритм численного интегрирования является его представление системой линейных алгебраических уравнений.

Применив метод колокации, т.е. приняв $x = x_i$, вместо интегрального уравнения получим систему $n+1$ линейных алгебраических уравнений для определения значений $p(x) \approx 0$. Вычисления выполняются с шагом $\Delta \ll 1$. Остановка вычислений осуществляется при приближении контактного давления к нулю $\delta(\delta_n) = 0$. При этом фиксируется координата линии контакта x_0 . Длина линии контакта a , рассчитанная по теории Герца, считается предельной: если в процессе вычисления x_0 окажется больше a , имеется возможность повторить вычисления для меньших значений Δ , что снижает погрешность.

Жесткость контакта определяется зависимостью Винклера $C = \frac{P}{\delta}$.

Пример 1. Упругий цилиндр прижат к упругой полосе, лежащей без трения на жестком основании (рис. 2). Под действием равномерно распределенной по ширине полосы силы P , направленной по оси y , цилиндр перемещается поступательно на величину сближения δ , поворот цилиндра отсутствует. На линии контакта $-x_0 \leq x \leq x_0$ возникает контактное давление $p(x)$. Перемещения на контактной поверхности

$$y_1(x) - y_2(x) = \delta - f(x),$$

где $f(x)$ – уравнение контура, ограничивающего цилиндр.

Контактное давление и длина линии контакта определяются из интегрального уравнения

$$(\theta_1 + \theta_2) \int_0^{x_0/a} p(\xi)L(x, \xi)d\xi = \frac{\delta}{a} - f(x),$$

где: $f(x) \approx \frac{ax^2}{2R}$, $\delta = \frac{2P}{\pi} (\Theta_1 + \Theta_2) \left(\ln \frac{2R}{a} + 0,407 \right)$, $a = 0,798 \sqrt{(\Theta_1 + \Theta_2)RP}$,
 $x = x^*/a$, $\xi = \xi^*/a$, $h = h^*/a$; x^* , ξ^* , h^* – размерные переменные.

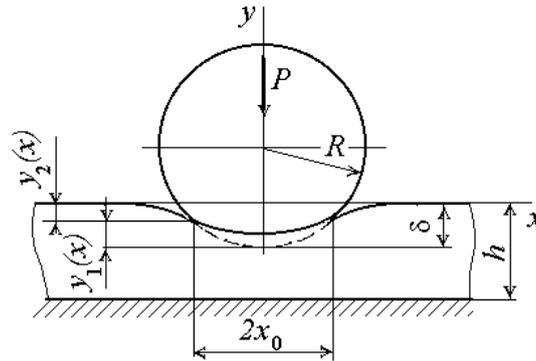


Рис. 2. Схема контакта цилиндра и полосы

Под влиянием нагрузки в зоне контакта тел с волнистостью и шероховатостью в результате взаимного внедрения микронеровностей, их расплющивания и упругой деформации происходит сближение поверхностей контактируемых тел. Его величина (мм) рассчитывается по формуле [7]

$$\delta_v = 0,82R_a [p_a (\Theta_1 + \Theta_2)]^{0,12} \left(\frac{H_B}{R_B} \right)^{0,37} \left(\frac{r}{R_a} \right)^{0,43} + 1,8H_B^{0,85} R_B^{0,15} [p_a (\Theta_1 + \Theta_2)]^{0,3},$$

где R_B (мм) и H_B (мкм) – радиус и высота волны; R_a (мкм) – среднее арифметическое отклонение профиля (параметр шероховатости); r (мкм) – приведенный радиус неровностей; p_a – номинальное давление на контакте (для рассматриваемой задачи можно принять $p_a = P/a$).

Результаты расчета показаны на рис. 3.

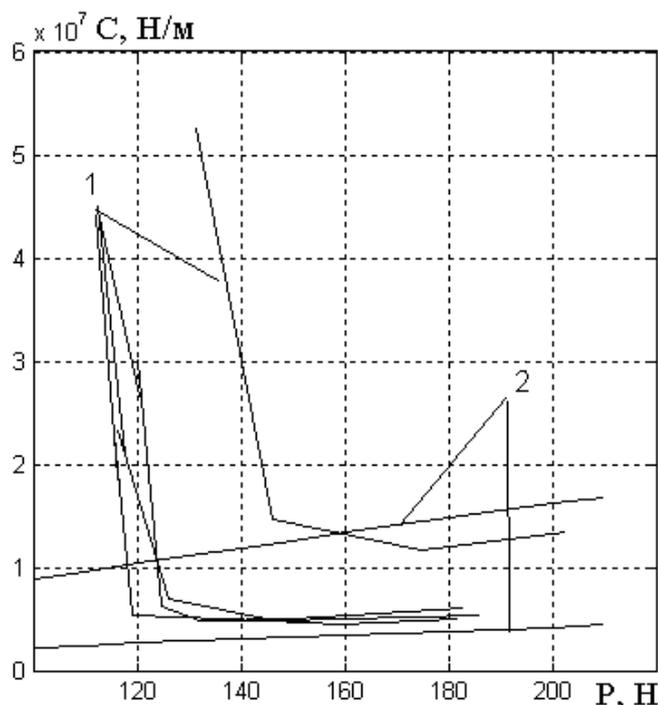


Рис. 3. Изменение жесткости $C = \frac{P}{\delta + \delta_v}$ от силы, сжимающей цилиндр P (1 – экспериментальные,

2 – расчетные значения)

2. Многокритериальная оптимизация

Рассмотрим задачу многокритериальной оптимизации в следующей постановке [8].

Имеется математическая модель объекта, которая зависит от r управляемых параметров $\alpha_1, \dots, \alpha_r$ образующих вектор параметров $\alpha = \{\alpha_1, \dots, \alpha_r\}$.

Параметрические ограничения имеют вид

$$\alpha_j^* \leq \alpha_j \leq \alpha_j^{**}, \quad j = 1, \dots, r.$$

Они выделяют в r -мерном пространстве параметров параллелепипед Π .

Функциональные ограничения можно записать так

$$c_i^* \leq f_i(\alpha) \leq c_i^{**}, \quad i = 1, \dots, l.$$

Функции $f_i(\alpha)$ определяют условия, накладываемые на решение модели или соотношения между параметрами модели.

Имеются, также критерии оптимальности $\Phi_\nu(\alpha)$, которые однозначно характеризуют качество механической системы. Их значения, например должны быть минимальны, поэтому установлена верхняя граница для каждого критерия

$$\Phi_\nu(\alpha) \leq \Phi_\nu^{**}, \quad \nu = 1, \dots, \nu.$$

Все ограничения - параметрические, функциональные и критериальные - выделяют допустимое множество D , $D \subseteq \Pi$.

Требуется найти такое множество Парето P , $P \subseteq \Pi$, для которого

$$\Phi(P) = \min_{\alpha \in D} \Phi(\alpha),$$

где $\Phi(\alpha) = \{\Phi_1(\alpha), \dots, \Phi_k(\alpha)\}$ - целевая функция.

В результате решения задачи определяется вектор α^0 , принадлежащий множеству P и являющийся наиболее предпочтительным или оптимальным из векторов этого множества.

Пример 2. Оптимизация параметров механической системы кривошипного пресса.

Цель оптимизации. Целью оптимизации параметров механической системы пресса является снижение деформаций в подшипниковых узлах и обеспечение минимальных поступательных колебаний станины пресса в период нагружения.

Расчетная схема. Расчетная схема механической системы листоштамповочного кривошипного пресса (рис. 4) составлена для условия смещения масс в период нагружения пресса. В результате деформации опор и поверхностей соединений звеньев, их смещение происходит поступательно в направлении действия усилия вырубки.

Для определения оптимальных параметров установлены пределы допустимого изменения инерции и жесткости. В этих пределах назначаются варианты параметров модели, которые последовательно реализуются в процессе оптимизации.

Результаты оптимизации параметров механической системы кривошипного пресса. Рассчитано 26 частных критерия оптимизации (табл.). Полученные при этом амплитудно-частотные характеристики (АЧХ) (рис. 5) показывают, что варианты параметров, улучшающие динамическое качество конструкции зависят от расположения резонансных пиков АЧХ и соответствуют их минимальным значениям.

За счет простого перераспределения значений параметров механической системы в заданных пределах снижены деформации в подшипниковых узлах главного исполнительного механизма и поступательные колебания станины пресса, улучшено динамическое качество проектируемой конструкции.

Таблица

Компоненты векторов целевых функций (частные критерии эффективности), полученные при различных условиях поиска, x_0 – перемещение при статическом действии сил

| Критерии | Компоненты вектора функции цели для поиска № | | | | | | | |
|--|--|--------|--------|---------------|--------|--------|---------------|--------|
| | Базовый | 1 | 2 | 3* | 4 | 5 | 6* | 7 |
| $\Delta\omega_1$, Гц | 8,716 | 9,415 | 7,794 | 1,013 | 6,429 | 9,518 | 5,025 | 4,723 |
| $\Delta\omega_2$, Гц | 0,795 | 2,415 | 1,690 | 0,696 | 3,413 | 0,344 | 0,341 | 0,204 |
| max τ | 5,072 | 5,049 | 5,631 | 5,047 | 5,409 | 4,519 | 4,306 | 4,248 |
| $x_0 \times 10^4$, м | 1,184 | 1,222 | 0,892 | 0,320 | 0,498 | 0,703 | 0,408 | 0,411 |
| max(x) $\times 10^4$, м | 2,056 | 2,328 | 1,575 | 0,585 | 0,955 | 1,139 | 0,814 | 0,657 |
| Время затухания колебаний по связям, с | | | | | | | | |
| 0-1 | 3,437 | 2,778 | 2,428 | 2,422 | 3,034 | 3,609 | 2,034 | 1,845 |
| 1-2 | 1,237 | 1,644 | 1,147 | 1,083 | 1,108 | 0,611 | 0,569 | 1,119 |
| 1-3 | 1,396 | 1,708 | 1,223 | 0,912 | 1,018 | 0,480 | 0,813 | 1,171 |
| 1-4 | 2,689 | 2,361 | 2,256 | 1,764 | 2,728 | 2,008 | 1,459 | 2,006 |
| 4-7 | 1,780 | 1,726 | 1,671 | 1,514 | 1,602 | 1,913 | 1,449 | 1,691 |
| 4-8 | 2,046 | 1,917 | 1,715 | 1,941 | 1,897 | 1,681 | 1,191 | 1,257 |
| 7-10 | 3,299 | 1,871 | 2,431 | 1,765 | 2,793 | 1,502 | 1,483 | 2,457 |
| Мах. амплитуда колебаний по узловым точкам $\times 10^4$, м | | | | | | | | |
| 1 | 0,531 | 0,737 | 0,535 | 0,231 | 0,314 | 0,301 | 0,242 | 0,199 |
| 2 | 1,306 | 1,707 | 0,671 | 0,360 | 0,705 | 0,708 | 0,398 | 0,419 |
| 3 | 1,458 | 1,261 | 0,996 | 0,289 | 0,707 | 0,697 | 0,468 | 0,384 |
| 4 | 1,858 | 1,504 | 1,040 | 0,487 | 0,473 | 0,597 | 0,649 | 0,591 |
| 7 | 1,515 | 1,109 | 0,700 | 0,552 | 0,568 | 0,558 | 0,413 | 0,502 |
| 8 | 1,413 | 0,804 | 0,935 | 0,502 | 0,756 | 0,472 | 0,214 | 0,360 |
| 10 | 1,269 | 1,548 | 1,026 | 0,585 | 0,829 | 0,506 | 0,586 | 0,618 |
| Отношение max. упругих усилий к усилию вырубки по связям | | | | | | | | |
| 0-1 | 0,00079 | 0,0018 | 0,0009 | 0,0004 | 0,0007 | 0,0007 | 0,0007 | 0,0006 |
| 1-2 | 0,102 | 0,125 | 0,0080 | 0,035 | 0,054 | 0,059 | 0,021 | 0,015 |
| 1-3 | 0,052 | 0,100 | 0,031 | 0,051 | 0,114 | 0,129 | 0,049 | 0,093 |
| 1-4 | 0,170 | 0,047 | 0,086 | 0,057 | 0,042 | 0,050 | 0,051 | 0,0002 |
| 4-7 | 0,090 | 0,174 | 0,118 | 0,007 | 0,024 | 0,052 | 0,016 | 0,079 |
| 4-8 | 0,182 | 0,110 | 0,023 | 0,073 | 0,060 | 0,036 | 0,092 | 0,060 |
| 7-10 | 1,000 | 1,000 | 1,000 | 1,000 | 1,000 | 1,000 | 1,000 | 1,000 |

* – все частные критерии оптимизации улучшены относительно базового варианта механической системы

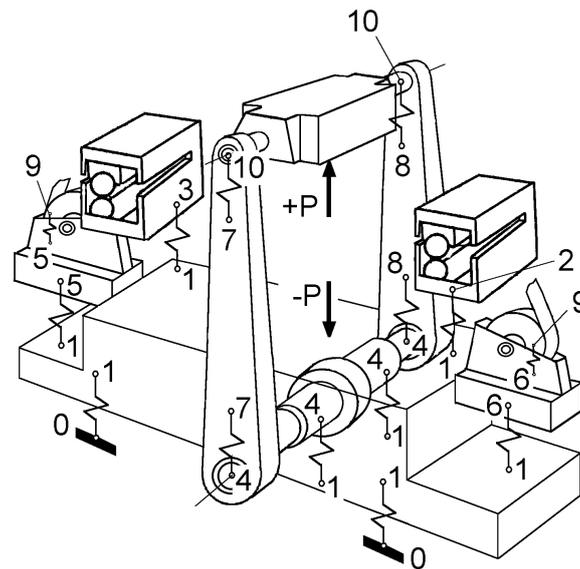


Рис. 4. Расчетная схема механической системы листоштамповочного кривошипного прессы

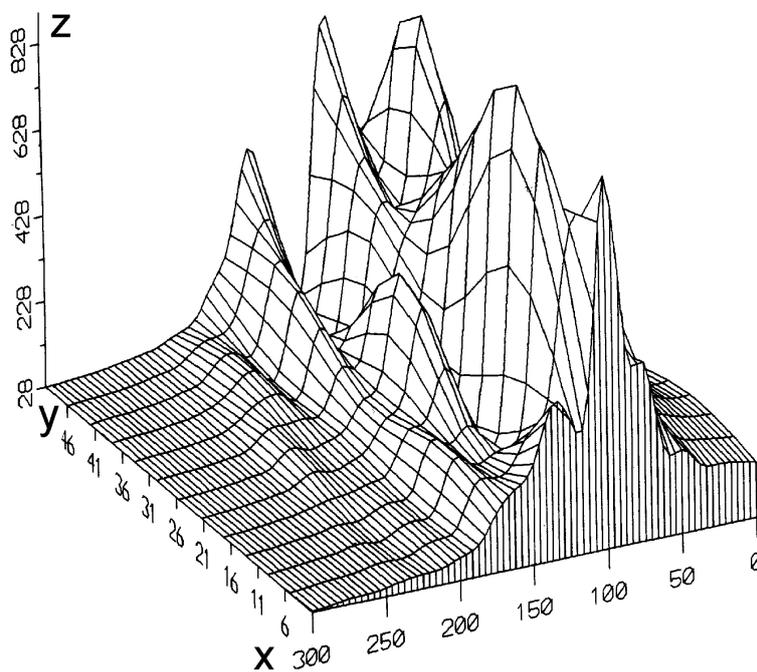


Рис. 5. Динамическая жесткость ($Z \cdot 10^{-6}$ Н/м) в зависимости от варианта (Y) параметров механической системы прессы, ($X \cdot 10$ – частота в Гц)

Литература

1. Бердат Дж., Пирсол А. Применение корреляционного и спектрального анализа: Пер. с англ. - М.: Мир, 1983
2. Маркс (W. R. Marks), Саламон (N. J. Salamon). Усовершенствованный метод сопряженного градиента для решения контактных задач без трения. Конструирование и технология машиностроения, 1983, т. 105, № 2. - С. 73-78

3. Александров В.М. О приближенном решении одного типа интегральных уравнений. Изв. АН Арм. ССР, сер. физ.-матем. н., 1964, т. 17, № 2. С. 934-943
4. Александров В.М. Асимптотические методы в контактных задачах теории упругости. Прикладная математика и механика. Вып. 4, 1968. С. 672-683
5. Александров В.М., Ромалис Б.Л. Контактные задачи в машиностроении. - М.: Машиностроение, 1986
6. Уонг (С.F. Wang). Упругий контакт полосы, сдавленной двумя цилиндрами. - Прикладная механика, 1968, № 2, с. 73-79
7. Трение, изнашивание и смазка. Справочник. В 2-х кн./Под ред. И. В. Крагельского, В. В. Алисина. - М.: Машиностроение, 1978
8. Павлов Ю. С., Пожалостин А. А., Статников Р. Б., Фролова О. А. Многокритериальное моделирование и анализ. Проблемы машиностроения и надежность машин, № 1, 1996. - С. 105-113

Modelling and a lot of criterion optimization of parameters of mechanical systems

A.H. Tlibekov

The Kabardino-Balkarian state university, Nalchik

Abstract. Problems of the automated designing of the mechanical systems sold CAD/CAE by technologies are considered. Now the basic questions of modelling and a lot of criterion optimization of parameters of mechanical systems which define success of the automated designing, are the design procedure of contact rigidity of details of mechanical system and a choice of the mathematical model providing a rating of efficiency, by the criteria which are not having identical dimension. Examples of calculation of contact rigidity and optimization of parameters of the mechanism are resulted.

УДК 32.001

Проблема пределов демократии

Р.Х. Кочесоков

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

В статье подчеркивается, что в современную эпоху демократия как институциональная процедура начинает преобладать над демократией как ценностью, парадигмой. Это неизбежно ведет к глубокому кризису демократии вообще. Следовательно, необходимо изучить способы сохранения демократии как идеи и ценности и нашего будущего.

Введение

Современную эпоху часто называют эпохой “третьей волны демократизации”. Видимо, это справедливо. Вместе с тем нельзя не заметить обозначившуюся тенденцию трансформации и использования понятия «демократия». Оно относится к разряду тех, которые одновременно являются и ценностью, абстрактным ориентиром, и инструментом, институциональной процедурой. Пока понятие остается ценностью, неким ориентиром, его инструментальное, практическое несовершенство не вызывает вопросов. Впоследствии же, когда оно становится, прежде всего, инструментом, постепенно на передний план начинают выходить его практические недостатки, в результате чего происходит его делегитимация, «десакрализация». С понятием «демократия» сейчас происходит то же самое.

Природа ценности и институциональной процедуры принципиально различна: вопрос о ценностях – предмет скорее веры, а вопрос об институциональной процедуре – предмет скорее рационального. До недавнего времени вопрос о преимуществах демократии решался главным образом верой в ее осуществимость, нежели рациональными обоснованиями. В настоящее время вследствие процесса демократизации приходится рационально доказывать преимущества демократии и как ценности, и как инструмента. От того, насколько успешно будет решен этот вопрос, зависит будущее как демократии, так и, возможно, всего человечества.

О пределах демократии как идеи (логика развития идей)

Любая идея концептуального (парадигмального) характера носит конкретно-исторический характер, эволюционирует по определенной логике и нисходит. Охарактеризуем вкратце содержание и специфику этапов развития идей.

Первый этап. Выдвижение аксиоматического принципа (идеи). Неудовлетворенность существующим социальным положением и общественно-политическим устройством императивно требует создания, выдвижения новой исходной посылки нового типа социального устройства. В качестве таковой выдвигается, формулируется некая *аксиома*, принимаемая за *самоочевидную истину* (таковы, например, основные принципы мировых религий, категорический императив Канта, лозунг “свобода, равенство, братство” и т.п.). Они не могут быть *доказаны*, они должны быть приняты; критерием их истинности является *легитимность*, т.е. соответствие неким ожиданиям. Они аналогичны парадигмам в науке, т.е. они в наибольшей

степени способствуют решению возникших в данную историческую эпоху задач. Именно самоочевидность и легитимность притягивает людей. Этап завершается утверждением этой аксиоматической идеи в сознании значительной части населения и приходом к власти ее приверженцев. (В данном случае вопрос о природе и генезисе аксиоматической идеи не принципиален; различные объяснения мы можем найти у Гуссерля, Кельзена, Куна, Шпенглера, Гумилева, Сорокина и др.).

Второй этап. Реализация идеи. Предпринимаются попытки *исчерпывающе* реализовать утвердившуюся в социальном сознании идею. Однако это не удается по многим причинам.

а. Нет такой идеи, которую можно было бы *реализовать исчерпывающе*; следовательно, она постепенно ставится под сомнение. Например, когда выдвигается идея демократии, речь идет о том, чтобы все сознательные и самостоятельные люди стали бы гражданами (т.е. получили бы равный политико-правовой статус) и получили бы возможность повлиять на процесс принятия важнейших политических решений. Однако со временем понятие “демократии” бесконечно расширяется, становится аморфным и расплывчатым. В *таком* новом понимании демократия, конечно, никогда не может быть реализована. Следовательно, сперва предпринимаются попытки предложить иные модели демократии, которые также не правдивают себя. Заканчивается все это тем, что в общественном сознании утверждается идея о невозможности реализации демократии.

б. Благодаря реализации основ аксиоматической идеи, общество достигает нового качественного состояния. Однако со временем достигнутое уже “приедается”, принимается за “естественное”. Эти основы уже не являются стимулирующим фактором, фактором сплочения и мобилизации общества. Например, никто уже не гордится тем, что у него есть избирательное право, гражданские права и т.п. Если раньше создание хотя бы основ демократии приветствовалось и считалось важнейшим достижением, это подвигало общество к “новым свершениям”, то теперь наступает разочарование.

в. В обществе уже нет социальных групп, придерживающихся прежней аксиомы и, следовательно, не с чем сравнить новую, утвердившуюся. В таком случае даже у элиты носители новой аксиомы, во-первых, уже нет необходимости быть “идеалистами”, революционерами, и, во-вторых, нет стимулов к искреннему и последовательному внедрению в общество новой аксиомы, т.е. развивать ее. Говоря словами Тойнби, элита впадает в самогипноз.

г. Постепенно аксиоматическая идея превращается из *цели* (самодостаточной ценности) в *средство*, инструмент достижения иных целей. Тем самым власть, по Шпенглеру, постепенно переходит от “романтиков” к “прагматикам”, и далее, к “циникам”. (Аналогия: трансформация древнегреческой философии в софистику). Здесь, по Гумилеву, исчезает потребность в пассионарных личностях.

Второй этап завершается началом “рутинизации” аксиоматической идеи.

Третий этап. Разложение идеи. Постепенно происходит полная “рутинизация” идеи и в дальнейшем – ее дискредитация. Устанавливается власть демагогов и софистов. Например, любой нормальный человек знает разницу между приличным и неприличным, однако здесь начинаются демагогические, софистические дискуссии, которые окончательно запутывают людей, которые уже не отличают “нормального” человека от “ненормального” (преступника, бандита и т.д.), “приличное” от “неприличного” (как, например, споры об эротике и порнографии, использовании матерных слов и т.д.). Аксиома становится мишенью нападок и высмеиваний. То, что она исчерпала себя, не означает, что она *изначально* была плохой. Любые социальные идеи (как и парадигмы в науке) действительны и эффективны лишь для определенного этапа и для решения задач определенного уровня. Третий этап завершается постепенным вызреванием новой аксиомы; она – не *антитеза* прежней, а нечто иное, *иного порядка*, направлена на решение других задач.

Скажем несколько слов о природе самоочевидных истин. В древности самоочевидным считались истины, соответствующие природе, т.е. “естественные” истины. В Средневековье таковыми считались божественные истины, открытые нам в Священных текстах. В Новое

время самоочевидными считаются *рациональные*, конструируемые сознанием истины (например, категорический императив Канта). Самоочевидная истина (аксиома) исчерпывается тогда, когда ее природа исчерпывается. Следовательно, возникает вопрос о том, исчерпала ли себя *рациональная* парадигма демократии.

Крах коммунизма и пределы рациональной демократии

Крах коммунизма был осмыслен очень поверхностно, большей частью идеологически и аффективно. Это было воспринято как “окончательная победа либерализма”, как “конец истории”. На самом же деле кризис более глубок, чем принято считать. Коммунизм и либерализм в действительности – две разновидности одного и того же подхода, а именно рационализма. Исходные принципы либерализма и коммунизма тождественны: 1) стремление к созданию рационально управляемого общества и 2) признаний детерминирующей роли субъективного фактора. Коммунизм по своей сути есть попытка ускоренным путем возвести *рационалистически* устроенное справедливое общество (в этом плане проблемы частной собственности, рыночной экономики и т.п. носят второстепенный характер). Можно сказать, что коммунизм есть карикатура на либерализм; разница только в том, что либерализм считает возможным и даже необходимым довольствоваться недостаточно совершенным устройством. Но коммунизм порожден как раз нежеланием людей ограничиться достижениями либерализма, их стремлением преодолеть оставшиеся недостатки. Поэтому вопрос следует ставить несколько иначе: можно ли сделать так, чтобы люди самостоятельно, добровольно и сознательно ограничились бы собой, довольствовались несовершенным социальным устройством?

Крушение коммунизма заставляет нас констатировать весьма неприглядные обстоятельства. Во-первых, оказалось, что люди вовсе не склонны сознательно придерживаться общих “правил игры”, рациональных норм и ценностей (например, следовать принципу “от каждого – по способностям, каждому – по потребностям”). Во-вторых, согласно парадоксу демократии Платона и вопреки Монтескье, люди не в состоянии выбирать в качестве своих руководителей лучших в профессиональном и моральном плане.

Возможны несколько путей выхода из сложившейся ситуации.

1. Дальнейшая рационализация социальной системы в целом и ценностных ориентиров в частности. В этом смысле самое главное – убедить людей жить по “Сизифу” Камю: зная, что создать совершенное общество нельзя, все же стремиться к нему. Нравится это или нет, здесь самое важное – “воспитание и перевоспитание людей”, что пытался сделать коммунизм (например, Макаренко) и что ему не удалось.

2. Отказ от попыток создания рационально устроенного “справедливого”, “демократического” общества и возврат к обществу, устроенному на иррациональных принципах, чем, собственно, занимается фундаментализм.

3. Полная нигилизация, отрицание любых систем ценностей, абсолютный “плюрализм” – в таком случае возникает опасность сохранения общества как определенной *культурной целостности*.

4. Авторитарными, принудительными мерами и средствами заставить людей самоограничиваться (этим пытались заняться церковь в Средневековье и коммунизм в XX веке).

Таким образом, главным вопросом современности является вопрос о том, сможет ли либерализм продолжить ориентацию на рациональную систему и рациональные ценности. *Институционально* сделать это не удалось и не удастся. Дело в том, что демократия как политическая система также развивается по определенной логике.

Внутренняя логика развития демократии как политической системы (о пределах открытости “открытого” общества)

Утверждение господствующей в определенную историческую эпоху идеи (аксиомы) сопровождается, разумеется, ее институционализацией, т.е. она господствует и как идея, и как система институтов. Как разлагается идея, мы уже рассмотрели. Теперь рассмотрим, как внутренняя логика развития системы приводит к ее распаду. Рассмотрим это на примере демократии, так как именно она как политическая система утверждалась в Новое время.

Демократическая политическая система закономерно и последовательно проходит в своем развитии ряд стадий.

1-я стадия: от “закрытой” демократии (демократии “внутреннего пользования”) к “открытой” демократии (демократии “универсального пользования”).

В условиях, когда другие государства неконкурентоспособны и/или не желают открываться, демократия эффективнее других систем и искренне проповедует “открытость”. Вместе с тем общество “открыто” лишь до тех пор, пока другие хотят оставаться “закрытыми”. Однако принципы демократии распространяются пока только на граждан данного государства. Но это противоречит природе принципов демократии: пока граждане демократического государства не “насытились” демократией, они не распространяют демократические ценности на других людей и другие общества; но со временем необходимость исчерпывающей реализации принципов демократии вынуждает распространить их на другие общества и других граждан.

2-я стадия: от “открытой” демократии к мини-империи.

Во внутренней политике демократические ценности углубляются и расширяются, вследствие чего возникает толерантное и конформистское общество: постепенно пределы “дозволенного” расширяются и становятся аморфными, вследствие чего постепенно стираются границы между “добром” и “злом”, “моральным” и “аморальным”. В этом смысле открытая демократия имеет тенденцию к мини-империи, т.е. данное государство становится фрагментированным, многосоставным, сложным, плюралистическим, анархическим. Но поскольку инородные элементы (национальные меньшинства, сексуальные меньшинства и т.п.) пока составляют незначительную силу, центробежные тенденции (общность) остаются сильнее центростремительных (фрагментации).

3-я стадия: от мини-империи к макси-империи.

“Открытое” общество может стать стабильным только тогда, когда нет врагов в виде “закрытых” обществ. Поэтому “открытое” общество целенаправленно экспортирует свои ценности, имеющие, напомним, универсальный характер. Неэффективные “закрытые” общества постепенно подрываются, его граждане принимают универсальные ценности. Постепенно небольшая (меньшая, во всяком случае) часть новых “открытых” обществ достигает уровня старых “открытых” обществ; значительная же часть новых “открытых” обществ пока ничего не достигло, но многие их граждане хотят пользоваться достижениями “открытых” обществ и начинают в массовом порядке переселяться в “открытые” общества. “Открытые” общества не могут закрываться, так как в этом случае противоречия между внутренней демократией и внешним авторитаризмом становятся опасными и аморальными. Тем самым мини-империи имеют тенденцию к макси-империям. (Примером является Рим: варвары захотели попасть в Рим и постепенно “растворили” его.) “Бедные” страны теперь стремятся “открыться”, так как: а) они уже приняли универсальные ценности и их гражданам все равно, где жить – следовательно, усиливается миграция; б) в “открытых” обществах степень демократии и плюрализма позволяет мигрантам не ассимилироваться, а стать “анклавом”, причем они даже могут требовать равенства с “аборигенами” (варвары становились гражданами Рима, называли себя римлянами и даже стали приходить к власти).

4-я стадия: от макси-империи к фрагментации.

С расширением пространства империи, а также с увеличением удельного веса чужеродных элементов, постепенно фрагментация (различия) начинает преобладать над общим. Самоидентичность исчезает (или появляется несколько равнозначных критериев самоидентификации), что приводит к развалу империи.

Идеальным вариантом было бы, если на третьей стадии все общества стали бы *открытыми и развитыми*. Но в реальности этого нет. Следовательно, развитые страны сталкиваются с дилеммой: 1) помочь неразвитым страна достигнуть своего уровня, а для этого надо “поделиться” с бедными странами, чего богатые не захотят (о чем говорит усиление авторитарно-националистических сил); 2) а если захотят, то сами тоже обеднеют, что будет стимулировать антидемократические тенденции и сдвиги.

Основными задачами (альтернативами) четвертой стадии являются:

а) “открытые” общества превращаются в “открытый мир” (создается универсальное демократическое государство), что в силу разнородности и неравенства государств невозможно *сейчас*;

б) “открытые” общества захотят стать “закрытыми”, следовательно, *открытая* демократия превращается в *закрытую* демократию, а она, в свою очередь, в авторитаризм: отсутствие возможностей дальнейшего развития демократических ценностей приводит к “застою”, а затем и к духовно-нравственной деградации, так как нет надежд на лучшее.

Кризис гражданского общества, основы либеральной демократии

Общеизвестно, что либеральное демократическое правовое государство возможно только при наличии гражданского общества. Разделение на политическое (правовое) государство и гражданское общество возможно только в том случае, когда они имеют независимые друг от друга автономные источники: в правовом государстве это конституция, т.е. *рационально* сформулированные ценности, соблюдение которых обеспечивается *принудительным* образом; в гражданском обществе – с одной стороны, рациональные нормы (общественное мнение), соблюдаемые сознательно и, с другой стороны, главное ядро – *иррациональные* (этнонациональные и конфессиональные) нормы, соблюдаемые в силу страха перед иррациональным. Таким образом, гражданское общество зиждется на совокупности *авторитарно* навязываемых рациональных и иррациональных ценностей и принципов.

Однако со временем их легитимность и/или функциональная значимость становятся проблематичными: постепенно размывается, исчезает страх перед иррациональным (традиционным), а *материальной* принудительной основы у них нет. Раньше все вынуждены были соблюдать господствующую систему ценностей, люди различали “дозволенное” и “недозволенное”. Но сейчас происходит, во-первых, полная фрагментация системы ценностей и, во-вторых, размывание границ между “дозволенным” и “недозволенным”. Это сопровождается десакрализацией иррациональных ценностей. Таким образом, во-первых, страх перестает быть фактором соблюдения иррациональных ценностей, во-вторых, размывание рациональных ценностей приводит к размыванию ценностей вообще.

Здесь следует иметь в виду еще одно обстоятельство. В силу сказанного выше гражданское общество как органическая целостность возможно только в виде “закрытого общества”, в том смысле, что люди *неавторитарно* соблюдают только *свои* ценности. Однако в связи с глобализацией “открытые” общества расширяются, перестают быть целостностью, превращаются в поликультурные (или эклектичные): если людей ничего не объединяет, то общество распадается.

Постепенно оформляются два основных выхода из складывающейся ситуации.

1. Авторитарное сохранение прежних социумов (национальных государств) и, следовательно, их основы, т.е. иррациональных ценностей. Об этом свидетельствуют и консервативно-националистические тенденции в Европе. Но в условиях глобализации выполнимость та-

кой задачи кажется проблематичной. Здесь опять приходится возвращаться к “закрытым” обществам.

2. Замена национальных государств, согласно коммунитаризму, коммунами, в которых соблюдаются свои иррациональные (или иррационализированные) ценности. К этому примыкают и попытки создания политкорректного общества. Но бесконечное расширение политкорректности также приводит к анархии. Общее у них то, что они надеются на рациональное; но нынешняя манипулируемость социальным сознанием (это легко можно увидеть на примере США) делает эту задачу тоже проблематичной.

The problem of limits of democracy

R.H.Kochesokov

Kabardino-Balkarian State University, Nalchik

Abstract. It is emphasized in the paper that in the contemporary epoch the democracy as an instrumental procedure is becoming to dominate over the democracy as value, paradigm. It inevitably leads to the deep crisis of democracy in general. Thus, it is necessary to investigate the ways of preservation of democracy as idea and value and as our future.

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|------|
| PERSONALIA. К 150-летию со дня рождения Жюль Анри Пуанкаре | – 3 |
| <i>Молодкин В.Б., Низкова А.И.</i> Природа влияния наноразмерных дефектов и упругого изгиба на динамическое рассеяние рентгеновского излучения в кристаллах | – 6 |
| <i>Фрицлер К.Б., Труханов Е.М., Калинин В.В., Дрофа А.Т., Василенко А.П., Колесников А.В., Федоров А.А.</i> Качество монокристаллического кремния и некоторые проблемы рентгеновской интерферометрии | – 32 |
| <i>Андреева М.А., Кальска Б., Линдгрен Б., Хэггстром Л., Вэплинг Р., Семенов В.Г., Салащенко Н.Н., Прохоров К.А., Чумаков А.И., Леопольд О., Рюффер Р.</i> Селективные по глубине исследования периодических многослойных магнитных пленок методом ядерно-резонансной брэгговской рефлектометрии | – 49 |
| <i>Керефов А.А.</i> К нелокальным задачам для уравнений в частных производных | – 58 |
| <i>Оранова Т.И., Мамишева И.М., Микитаев А.К.</i> Влияние разнотонности на термостойкость полиимидов | – 66 |
| <i>Проскурякова Т.В.</i> Зависимость от алкоголя и морфина и один из подходов к ее лечению | – 72 |
| <i>Тлибеков А.Х.</i> Моделирование и многокритериальная оптимизация параметров механических систем | – 83 |
| <i>Кочесоков Р.Х.</i> Проблема пределов демократии | – 91 |

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|------|
| PERSONALIA. To the 150-anniversary from birthday of Jules Henri Poincar | – 3 |
| <i>Molodkin V.B., Nizkova A.I.</i> The influence of nanodimensional defects and elastic curving on X-ray dynamic scattering on crystals | – 6 |
| <i>Fritzler K.B., Trukhanov E.M., Kalinin V.V., Drofa A.T., Vasilenko A.P., Kolesnikov A.V., Fedorov A.A.</i> Quality of single crystal silicon and some problems of X-ray interferometry | – 32 |
| <i>Andreeva M.A., Kalska B., Lindgren B., Häggström L., Wäppling R., Semenov V.G., Salashchenko N.N., Prokhorov K.A., Chumakov A.I., Leupold O., Ruffer R.</i> Depth-selective investigations of periodical multilayer magnetic structures by nu-clear resonance Bragg reflectivity | – 49 |
| <i>Kerefov A.A.</i> About nonlocal problem for equation with particular derivative | – 58 |
| <i>Oranova T.I., Mamisheva I.M., Mikitaev A.K.</i> Influence the different unit structure on a thermal stability of polyimides | – 66 |
| <i>Proskuryakova T.V.</i> Alcohol and morphine dependence and one of the methods for the treatment | – 72 |
| <i>Tlibekov A.H.</i> Modelling and a lot of criterion optimization of parameters of mechanical systems | – 83 |
| <i>Kochesokov R.H.</i> The problem of limits of democracy | – 91 |

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

Редакция просит авторов руководствоваться изложенными ниже правилами

1. Статья, предоставленная для публикации, должна иметь направление, экспертное заключение от учреждения, в котором выполнена работа.
2. Рукопись должна быть отпечатана на компьютере (размер шрифта – 12 кегль) через два машинописных интервала (полуторный межстрочный интервал в редакторе Word), на белой бумаге формата А4 (297x210 мм) с одной стороны листа, левое поле – 25 мм. Все листы в статье должны быть пронумерованы.
3. Статья должна быть подписана авторами и представлена в двух экземплярах.
4. Рисунки, таблицы и фотографии в тексте рукописи не размещаются, а прилагаются на отдельных листах в конце статьи.
5. Начало статьи оформляется по образцу: индекс статьи по универсальной десятичной классификации (УДК), название, авторы, полное название учреждений, в которых выполнялось исследование, аннотация (объем – не более половины страницы), текст статьи. Далее на отдельных листах:
 - список литературы,
 - таблицы,
 - рисунки,
 - подписи к рисункам,
 - на английском языке: название, фамилии авторов, полное название учреждений, в которых выполнялось исследование, краткая аннотация,
 - адреса для переписки, телефоны, fax, e-mail.
6. В статье должны использоваться единицы и обозначения в международной системе единиц СИ и относительные атомные массы элементов по шкале ^{12}C . В расчетных работах необходимо указывать авторов используемых программ. При названии различных соединений необходимо использовать терминологию ИЮПАК.
7. Все сокращения должны быть расшифрованы, за исключением небольшого числа общепринятых.
8. При упоминании в тексте иностранных фамилий в скобках необходимо давать их оригинальное написание, за исключением общеизвестных, а также в случае, если на эти фамилии даются ссылки в списке литературы.
9. При упоминании иностранных учебных заведений, фирм, фирменных продуктов и т.д. в скобках должны быть даны их названия в оригинальном написании.
10. Оформление формул должно соответствовать следующим требованиям:
 - a) все формулы и буквенные обозначения должны быть напечатаны на компьютере, или впечатаны на машинке с латинским шрифтом, или вписаны от руки черными чернилами, с четкой разметкой всех особенностей текста (индексов, полужирного и курсивного начертаний и т.д.);
 - b) при разметке формул необходимо прописные и строчные буквы всех алфавитов, имеющих одинаковое начертание (P, S) подчеркивать простым карандашом: большие – двумя чертами снизу, маленькие – двумя чертами сверху;
 - c) показатели степени и индексы выделять простым карандашом дугой: верхние – снизу, нижние – сверху;
 - d) для полужирных символов (векторов) использовать подчеркивание синим карандашом.

11. Таблицы нумеруются по порядку упоминания их в тексте арабскими цифрами. После номера должно следовать название таблицы. Все графы в таблицах и сами таблицы должны иметь заголовки.
12. Рисунки предоставляются размером не менее 5x6 см и не более 17x24 см, с указанием низа и верха. Рисунки должны быть выполнены на белой бумаге черной тушью или распечатаны на лазерном или струйном принтере с разрешением не менее 300 dpi. Использовать другие цвета кроме черного не допускается.
13. Фотографии предоставляются на нетисненной глянцевой бумаге размером не более 9x12 см.
14. На обратной стороне рисунков и фотографий указывают фамилию первого автора, порядковый номер, верх, низ.
15. В тексте необходимо дать ссылки на все приводимые рисунки и таблицы, на полях рукописи слева должно быть отмечено, где приводимый рисунок или таблица встречаются впервые.

Требования к рукописям, предоставляемым в электронном виде

1. В целях сокращения сроков подготовки материалов к публикации желательно предоставление материалов в электронном виде. Электронная версия материалов сдается в дополнение к бумажной и должна быть максимально ей идентична.
2. Электронная версия предоставляется на 3,5" дискетах, форматированных для IBM PC. На диске должны быть обозначены имена файлов, название статьи и фамилия и инициалы автора(ов).
3. Основной текст статьи и таблицы предоставляются в формате MS Word for Windows (версии 6.0 и старше). Шрифт – Times New Roman, 12 кегль. Строки в пределах абзаца не должны разделяться тем же символом, что и абзацы.
4. Формулы, если это необходимо, должны быть набраны в формате MS Equation. Как в тексте, так и в MS Equation следует соблюдать следующие стили и размеры:
 - а) стиль: текст, функция, числа – Times New Roman Обычный, переменная – Times New Roman Наклонный (Курсив), матрица-вектор Times New Roman Полужирный, греческие и символы – Symbol Обычный;
 - б) размер: обычный, мелкий символ – 12 пт, крупный индекс – 8 пт, мелкий индекс – 6 пт, крупный символ – 18 пт;
 - в) формат-интервал: высота/глубина индексов – 30 %, все остальное – по умолчанию.
5. Штриховые и полутоновые иллюстрации должны быть представлены в форматах TIFF, JPEG, GIF с разрешением не менее 300 dpi. Цветовая палитра: grayscale. Каждый графический файл должен содержать один рисунок.
6. Допускается (но нежелательно) сжатие графических файлов архиваторами WinRAR или WinZIP. Каждый файл должен быть помещен в отдельный архив.

Научное издание

**АКТУАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ
СОВРЕМЕННОГО ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ**

Компьютерная верстка *Д.А. Тарасова*
Корректор *Е.Г. Скачкова*

Изд. лиц. Серия ИД 06202 от 01.11.2001
В печать **.**.2004. Формат 60x84 ¹/₁₆. Печать трафаретная
Бумага газетная. *.** усл.п.л. **. * уч.-изд.л
Тираж 10001 экз. Заказ № _____
Кабардино-Балкарский государственный университет
360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173

Полиграфическое подразделение КБГУ
360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173