МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические науки

TOM 16, №1 2023

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого 2023

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Боровков А.И., проректор по перспективным проектам; Глухих В.А., академик РАН; Жуков А.Е., чл.-кор. РАН; Индейцев Д.А., чл.-кор. РАН; Рудской А.И., академик РАН; Сурис Р.А., академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – главный редактор; Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – зам. главного редактора; Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь; Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Безпрозванный И.Б., д-р биол. наук, профессор, Юго-Западный медицинский центр Техасского университета, Даллас, США; Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Донецкий Д.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, университет штата Нью-Йорк в Стоуни-Брук, США; Дубов В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Карасёв П.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Лобода О.С., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия; *Малерб Й.Б.*, Dr.Sc. (Physics), профессор, университет Претории, ЮАР; Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Привалов В.Е., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Смирнов Е.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Соловьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, Научно-исследовательский центр мезобионаносистем (MBN), Франкфурт-на-Майне, Германия; Таганцев А.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, Швейцарский федеральный институт технологий, Лозанна, Швейцария; Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Хейфец А.С., Ph.D. (Physics), профессор, Австралийский национальный университет, Канберра, Австралия; Черепанов А.С., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия.

Журнал с 2002 г. входит в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук.

Сведения о публикациях представлены в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН, в международной справочной системе «Ulrich's Periodical Directory».

С 2008 года выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ».

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.

Распространяется по Каталогу стран СНГ, Объединенному каталогу «Пресса России» и по Интернет-каталогу «Пресса по подписке». Подписной индекс 71823. Журнал индексируется в базах данных **Web of** Science (Emerging Sources Citation Index), Scopus, а также включен в базы данных **«Российский индекс** научного цитирования» (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте http://www.elibrary.ru, и "Directory of Open Access Journals" (DOAJ).

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна. Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства:

Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29. Тел. редакции (812) 294-22-85. http://ntv.spbstu.ru/physics

> © Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2023

THE MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL

Physics and Mathematics

VOLUME 16, No.1, 2023

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 2023

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

A.I. Borovkov – vice-rector for perspective projects;

V.A. Glukhikh – full member of RAS;

D.A. Indeitsev – corresponding member of RAS;

VA.I. Rudskoy – full member of RAS;

R.A. Suris – full member of RAS;

A.E. Zhukov – corresponding member of RAS.

JOURNAL EDITORIAL BOARD

V.K. Ivanov - Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, - editor-in-chief;

A.E. Fotiadi - Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, - deputy editor-in-chief;

V.M. Kapralova – Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – executive secretary;

V.I. Antonov - Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

I.B. Bezprozvanny – Dr. Sci. (biology), prof., The University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX, USA;

A.V. Blinov - Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

A.S. Cherepanov - Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

D.V. Donetski – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., State University of New York at Stony Brook, NY, USA;

V.V. Dubov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

D.A. Firsov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

P.A. Karasev - Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

A.S. Kheifets - Ph.D., prof., Australian National University, Canberra, Australia;

O.S. Loboda - Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

J.B. Malherbe - Dr. Sci. (physics), prof., University of Pretoria, Republic of South Africa;

V.M. Ostryakov - Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

V.E. Privalov - Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

E.M. Smirnov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

A.V. Solov'yov - Dr. Sci. (phys.-math.), prof., MBN Research Center, Frankfurt am Main, Germany;

A.K. Tagantsev - Dr. Sci. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;

I.N. Toptygin - Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia.

The journal is included in the List of leading peerreviewed scientific journals and other editions to publish major findings of theses for the research degrees of Doctor of Sciences and Candidate of Sciences.

The publications are presented in the VINITI RAS Abstract Journal and Ulrich's Periodical Directory International Database.

The journal is published since 2008 as part of the periodical edition 'Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPb-GPU'.

The journal is registered with the Federal Service for Supervision in the Sphere of Telecom, Information Technologies and Mass Communications (ROSKOMNADZOR). Certificate Π Nº Φ C77-52144 issued December 11, 2012.

The journal is distributed through the CIS countries catalogue, the «Press of Russia» joint catalogue and the «Press by subscription» Internet catalogue. The subscription index is 71823.

The journal is in the **Web of Science** (Emerging Sources Citation Index), **Scopus**, the **Russian Science Citation Index** (RSCI) and the **Directory of Open Access Journals** (DOAJ) databases.

© Scientific Electronic Library (http://www.elibrary.ru).

No part of this publication may be reproduced without clear reference to the source.

The views of the authors may not represent the views of the Editorial Board.

Address: 195251 Politekhnicheskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.

Phone: (812) 294-22-85. http://ntv.spbstu.ru/physics

> © Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 2023

Содержание

Физика конденсированного состояния

Лапатин Н. А., Кастро Р. А., Карулина Е. А. Диэлектрическая спектроскопия перфторсуль- фоновых мембран в протоно- и тербиевозамещенных формах	7
Вакуленко А. Ф., Вахрушев С. Б., Королева Е. Ю., Васильева Е. А. Зависимость диэлектри- ческой проницаемости монокристалла РМN (111) от толщины	16
Александров С. Е., Хаттаб Ю. Электрические и оптоэлектронные свойства наноразмер- ных вертикальных нанолистов, изготовленных из дисульфида молибдена (статья на английском языке)	24
Математическое моделирование физических процессов	
Гавриловец В. В., Король А. В., Сушко Г. Б., Иванов В. К., Соловьев А. В. Излучение высоко- энергетических электронов при каналировании в искривленных монокристаллах кремния и германия	33
Сухотерин М. В., Лалин В. В., Кондратьева Л. Н., Барышников С. О., Войтко И. В. Свобод- ные колебания прямоугольной пластины с защемленными противоположными краями (CFCF-пластина)	51
Каур И., Сингх К. Двухтемпературный подход к анализу свойств полупроводящего тер- моупругого сплошного цилиндра, основанный на модифицированной теории теплопере- дачи Мура — Гибсона — Томпсона (статья на английском языке)	65
Андрианова Е. А., Новицкий Д. В., Онищук В. С. Теоретическое обоснование идентифика- ции собственных частот в методе FDD (декомпозиции в частотной области)	82
Биофизика и медицинская физика	
Головицкий А. П., Концевая В. Г., Куликов К. Г. Электродинамическая модель определения функции распределения частиц по размерам для клеток крови in vivo	97
Физика молекул	
Абраха А. Г., Белэй А. Г. Изучение связывания кофеина с никотинамидом с помощью мето- дов тушения флуоресценции и спектроскопии в ультрафиолетовой и видимой областях (статья на английском языке)	111
Матвиенко А. Н. Способы формирования структуры миди-фуллеренов на примере изо- меров С ₂₂ , С ₂₄ и С ₂₆	125
Механика	
Усманов А. Р., Модестов В. С. Метод задания центробежных нагрузок валов при расчете дисбалансного поведения роторов	132
Разакова Р. В., Турусов Р. А. Термоупругие параметры слоистых композитов	140

Шевченко С. А., Мельников Б. Е. Использование методов теории планирования эксперимента и анализа чувствительности при работе с моделью резонатора гироскопа 152

Contents

Condensed matter physics

Lapatin N. A., Castro R. A., Karulina E. A. Dielectric spectroscopy of perfluorosulfonic membranes in proton- and terbium-substituted forms	7
Vakulenko A. F., Vakhrushev S. B., Koroleva E. Yu., Vasilyeva E. A. The permittivity – thickness relationship of a PMN (111) single crystal	16
Alexandrov S. E. Khattab Y. Nanosized vertical nanosheets made of molybdenum disulphide: Elec- trical and optoelectronic properties	24
Simulation of physical processes	
Haurylavets V. V., Korol A. V., Sushko G. B., Ivanov V. K., Solov'yov A. V. Radiation of high-energy electrons when channeling in the bent silicon and germanium monocrystals	33
Sukhoterin M. V., Lalin V. V., Kondratjeva L. N., Baryshnikov S. O., Voytko I. V. Free vibrations of a rectangular plate with clamped opposite edges (a CFCF-plate)	51
Kaur I., Singh K. The two-temperature effect on a semiconducting thermoelastic solid cylinder based on the modified Moore – Gibson – Thompson heat transfer	65
Andrianova E. A., Novitskii D. V., Onischuk V. S. Theoretical justification of natural frequency identification in the FDD (Frequency Domain Decomposition) method	82
Biophysics and medical physics	
Golovitskii A. P., Kontsevaya V. G., Kulikov K. G. An electrodynamic model for determining the distribution function of particles by size for blood cells in vivo	97
Physics of molecules	
Abraha A. G., Belay A. G. Binding of caffeine with nicotinamide: A study by means of fluorescence quenching and UV-Vis spectroscopic techniques	111
Matvienko A. N. The ways to form midi-fullerens structure exemplified by $C_{22^{\prime}}$, C_{24} and C_{26} isomers	125
Mechanics	
Usmanov A. R., Modestov V. S. Method of specifying the centrifugal loads of shafts in calculation of the rotor unbalance behavior	132
Razakova R. V., Turusov R. A. Thermoelastic parameters of layered composites	140
Shevchenko S. A., Melnikov B. E. Using the theory of design of experiment and the sensitivity	

analysis method in simulation of a gyroscope resonator152

Физика конденсированного состояния

Научная статья УДК 53.08, 538.9 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16101

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПЕРФТОРСУЛЬФОНОВЫХ МЕМБРАН В ПРОТОНО- И ТЕРБИЕВОЗАМЕЩЕННЫХ ФОРМАХ Н. А. Лапатин ⊠, Р. А. Кастро, Е. А. Карулина

Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена,

Санкт-Петербург, Россия

⊠ NICOLJAPAT@mail.ru

Аннотация. Представленное исследование ставило целью выявить механизмы электрической проводимости перфторсульфоновой мембраны (МФ-4СК) в протонозамещенной форме (Н-форма) и влияние ионов тербия, модифицирующих данную матрицу (Тb-форма), на эти механизмы. Проведены измерения частотных зависимостей комплексной диэлектрической проницаемости при температуре 293 К и ее температурных зависимостей на частоте 1 кГц для образцов обеих форм. Выявлен рост величины є' при уменьшении частоты и повышении температуры. Обнаружены максимумы фактора диэлектрических потерь є" в слоях исследуемых систем при различных температурах. Полученные экспериментальные данные позволили предположить существование распределения по временам релаксации релаксаторов. Для модифицированной и немодифицированной мембран был обнаружен и интерпретирован переход от классического переноса заряда к квантовомеханическому.

Ключевые слова: перфторсульфоновая мембрана, диэлектрическая спектроскопия, протон, тербий, температурная и частотная зависимости

Финансирование: Исследование выполнено в рамках государственного задания при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (научный проект № FSZN-2020-0026).

Для цитирования: Лапатин Н. А., Кастро Р. А., Карулина Е. А. Диэлектрическая спектроскопия перфторсульфоновых мембран в протоно- и тербиевозамещенных формах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 1. С. 7–15. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16101

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии СС BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article

DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16101

DIELECTRIC SPECTROSCOPY OF PERFLUOROSULFONIC MEMBRANES IN PROTON- AND TERBIUM-SUBSTITUTED FORMS

N. A. Lapatin ⊠, R. A. Castro, E. A. Karulina

Herzen State Pedagogical University of Russia, St. Petersburg, Russia

⊠ NICOLJAPAT@mail.ru

Abstract. The present study was aimed to reveal the mechanisms of electrical conductivity of the perfluorosulfonic membrane (MF-4SK) in the proton-substituted form and an effect of

© Лапатин Н. А., Кастро Р. А., Карулина Е. А., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Tb ions modified this matrix on these mechanisms. The frequency dependences of the complex permittivity at a temperature of 293 K and the temperature dependences of it at a frequency of 1 kHz for samples of the both forms have been measured. An increase in the permittivity ε' value with decreasing frequency and increasing temperature was brought out. The maxima of the dielectric loss factor were obtained for the layers of the studied systems at different temperatures. The obtained experimental data allowed us to assume that there were distributions over relaxation times for relaxation oscillators. A transition from classical to quantum mechanical charge transfer was discovered and interpreted for the original and modified membranes.

Keywords: perfluorosulfonic membrane, dielectric spectroscopy, proton, terbium, temperature dependence and frequency one

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment with the financial support of the Ministry of Education of Russian Federation (Research project No. FSZN-2020-0026).

For citation: Lapatin N. A., Castro R. A., Karulina E. A., Dielectric spectroscopy of perfluorosulfonic membranes in proton- and terbium-substituted forms, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1) (2023) 7–15. DOI: https:// doi.org/10.18721/JPM.16101

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons. org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Сульфированная политетрафторэтиленовая полимерная мембрана типа Нафион и ее российский аналог МФ-4СК находят широкое применение в топливных элементах в качестве твердого электролита, обладающего высокой ионной проводимостью. Топливные элементы могут служить заменой аккумуляторам в автомобилях и мобильных устройствах в связи с отсутствием необходимости их перезарядки и повышенным сроком их эксплуатации. К преимуществам использования мембран в топливных элементах следует отнести их высокую термическую и химическую стойкость. В настоящее время сульфированные политетрафторэтиленовые мембраны интенсивно изучаются разнообразными физическими и химическими методами.

Лучше других изучены набухшие перфторсульфоновые мембраны, которые содержат в своей матрице ионы калия. Согласно современным представлениям, такие мембраны обладают структурой обратной мицеллы (вода, имеющаяся в мембране, окружена полимерной матрицей с функциональными ионными группами).

Другие замещенные формы перфторсульфоновых мембран, по сравнению с солевыми формами мембраны типа Нафион, изучены менее подробно; это касается, главным образом, механизмов проводимости в высокотемпературном диапазоне и при низкой влажности.

Цель настоящего исследования — выявить механизмы электрической проводимости перфторсульфоновой мембраны в протонозамещенной форме и влияние ионов тербия, модифицирующих данную матрицу, на эти механизмы.

В настоящей работе изучены обе указанные формы мембран (сокращенно H- и Tb-формы).

Методика эксперимента

Объектом исследования был российский аналог мембраны Нафион – МФ-4СК (производство ОАО «Пластполимер», г. Санкт-Петербург), толщиной 220,0 \pm 0,5 мкм и площадью 1 – 2 см².

Предварительно мембрану очищали от сорбированных из воздуха примесей ее кипячением в растворе азотной кислоты (65 % по массе) в течение нескольких часов. Затем образцы отмывали в дистиллированной воде от избытка однозарядных анионов NO_3^- , а после этого высушивали при температуре 90 °C до постоянной массы.

Диэлектрические спектры исследуемых слоев (температурная и частотная зависимости составляющих комплексной диэлектрической проницаемости) были зарегистрированы на

[©] Lapatin N. A., Castro R. A., Karulina E. A., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

широкополосном диэлектрическом спектрометре «Concept-81» (в Центре коллективного пользования диэлектрической спектроскопии при НИИ физики РГПУ им. А. И. Герцена) в интервале частот $f = 1 - 10^5$ Гц и температур T = 273 - 403 К.

Были измерены действительная и мнимая части импеданса $Z^*(\omega)$ (ω – угловая частота переменного электрического тока). Также были получены частотные и температурные зависимости комплексной диэлектрической проницаемости и проводимости. Относительная погрешность эксперимента не превышала 5 %.

Значения релаксационных параметров системы были найдены обработкой полученных диэлектрических спектров путем аппроксимации кривых двухпараметрической эмпирической функцией Гавриляка — Негами [1] с помощью программного обеспечения Novocontrol Winfit. В результате были выделены позиции максимумов диэлектрических потерь и определены параметры Гавриляка — Негами (HN) для изучаемых релаксационных процессов.

Экспериментальные результаты и их обсуждение



Рис. 1. Частотные зависимости при температуре T = 293 К (*a*) и температурные зависимости на частоте f = 1 кГц (*b*) действительной части комплексной диэлектрической проницаемости образцов мембран МФ-4СК (*I*) и МФ-4СК + Tb (*2*)

Частотные зависимости диэлектрической проницаемости ε' образцов двух систем при комнатной температуре представлены на рис. 1, *а*. Наблюдается рост диэлектрической проницаемости ε' при уменьшении частоты, что свидетельствует о возможности проявления межфазной поляризации. Поляризация пространственного заряда в изучаемых мембранах при нормальных условиях объясняется присутствием влаги. Перфторсульфоновые мембраны гигроскопичны и, как результат, поглощенная ими вода аккумулируется в гидрофильных ионных областях [2 – 4]. Рост величины ε' в области низких частот может

быть также обусловлен проявлением дипольно-релаксационной поляризации, вызванной наличием полярных групп в структуре полимера.

Рост є' с повышением температуры (рис. 1, b) вызван увеличением числа протонов и их подвижности, а это приводит к изменению их количества на границах раздела фаз. Кроме того, при подъеме температуры в нешироком исследуемом интервале (320 - 420 K) усиливается вклад дипольно-ориентационной поляризации, поскольку ориентация диполей облегчается при их исходной жесткой фиксации в каркасе политетрафторуглеродного скелета мембраны.

Легирование мембран МФ-4СК тербием увеличивает значение диэлектрической проницаемости системы примерно на 25 %, что связано с сильным поляризующим действием ионов тербия Tb^{3+} на молекулы воды в матрице полимера и, как следствие, увеличение числа протонов в системе по предполагаемой схеме:



Рис. 2. Виды функции распределения релаксаторов по временам релаксации $G(\tau)$ для образцов МФ-4СК (*1*) и МФ-4СК + Tb (*2*) при температуре T = 323 К

Анализ полученных нами экспериментальных температурных зависимостей мнимой части є" комплексной диэлектрической проницаемости (фактор диэлектрических потерь) позволил выявить наличие дисперсии этой величины. Обнаружены максимумы диэлектрических потерь (рис. 2), присутствие которых можно объяснить существованием релаксационных процессов, которые порождают эти потери [6].

Для того чтобы оценить распределения релаксаторов по временам релаксации, мы использовали полученные экспериментальные данные, относящиеся к частотным зависимостям тангенса угла диэлектрических потерь tgð и фактора потерь є", т. е.

$$tg\delta = f_1(\omega), \tag{2}$$

(1)

$$\varepsilon'' = f_2(\omega). \tag{3}$$

В рамках приближения Гавриляка — Негами были определены значения релаксационных параметров $\Delta \epsilon$, τ_{max} , α , β через аппроксимирующую функцию экспериментальных кривых вида

$$\varepsilon * (\omega) = \varepsilon_{\infty} + \frac{\Delta \varepsilon}{\left[1 + (i\omega\tau)^{\alpha}\right]^{\beta}}, \qquad (4)$$

где ε_{∞} — диэлектрическая проницаемость на пределе высоких частот; $\Delta \varepsilon$ — разность между низкочастотной диэлектрической проницаемостью и диэлектрической проницаемостью на пределе высоких частот; τ , с, — время релаксации; α , β — показатели степени, которые описывают асимметрию и широту соответствующих спектров.

Анализ полученных экспериментальных данных привел к предположению о соответствии распределения релаксаторов по временам релаксации моделям Коула – Дэвидсона и Коула – Коула для случаев несимметричного и симметричного распределений релаксаторов. Согласно нашим предположениям, такими релаксаторами могут выступать функциональные группы – CF₂, – CH и – CH₂, а также гидрофильные полярные сульфогруппы –SO₃, обнаруженные при инфракрасном сканировании исследуемых мембран [7].



Рис. 3. Температурные зависимости наиболее вероятного времени релаксации τ_{max} для образцов МФ-4СК (*1*) и МФ-4СК + Tb (*2*)

В таблице приведены значения энергии активации обнаруженных процессов E_{ap} , которые были получены расчетным путем по данным графика температурной зависимости наиболее вероятного времени релаксации τ_{max} (рис. 3).

Таблица

Образец	Температурный интервал, К	Энергия активации E_{ap}	
		эВ	ккал/моль
МФ4-СК	293 - 353	$0,\!27\pm0,\!02$	$6,21 \pm 0,45$
$M\Phi4-CK + Tb$	343 - 383	$0,\!42\pm0,\!01$	$9,63 \pm 0,20$

Значения энергии активации релаксационных процессов в исследованных образцах

Обнаружение в ходе измерений дисперсии диэлектрической проницаемости в сочетании с существованием максимумов диэлектрических потерь в среднечастотном диапазоне можно расценить как проявление механизма дипольно-релаксационной поляризации в исследуемых объектах.

Полученные закономерности можно объяснить в рамках модели, предложенной авторами статьи [8], где структура неупорядоченных систем трактуется как набор диполей, каждый из которых имеет свое время релаксации, зависящее от энергии активации, необходимой для преодоления потенциального барьера носителями заряда.

Анализ частотных зависимостей удельной проводимости σ' полимерных матриц МФ-4СК как исходных, так и легированных тербием, привел нас к заключению, что данные зависимости подчиняется степенному закону, присущему многим аморфным и кристаллическим полупроводникам:

$$\sigma'(\omega) \sim \omega^{S}, \tag{5}$$

где σ' , См, – проводимость; *s* – показатель степени.

Исследование температурной зависимости фактора *s* для образцов обеих систем привело к обнаружению двух температурных участков: с ростом температуры сначала параметр *s* снижается (участок I при T = 313 K), затем наблюдается его рост (участок II при T = 323 K). Полученные в ходе исследования степенная зависимость (5) проводимости от частоты и изменение значения параметра *s* с ростом температуры дают возможность допустить существование прыжкового механизма проводимости, при котором носители заряда (ионы и электроны) совершают термически активированные прыжки внутри разу-порядоченной структуры исследуемых систем [9].

Согласно модели коррелированных барьерных прыжков (*анел*. Correlated Barrier Hopping (CBH)) [10], с увеличением температуры в диапазоне 280 — 330 К наблюдается снижение значения параметра *s* для модифицированной и не модифицированной мембран (см. рис. 10 в работе [10]), и это хорошо согласуется с моделью CBH, согласно которой носители заряда совершают прыжки между энергетическими состояниями, преодолевая потенциальные барьеры.

Значение показателя степени s по этой модели определяется следующей зависимостью:

$$s = 1 - 6 kT/W_{M}$$
, (6)

где W_{M} – высота потенциального барьера, T – температура, k – постоянная Больцмана.

Увеличение же значения *s* можно объяснить, если привлечь модель Остина – Мотта [12], что мы наблюдали для обеих изучаемых систем.

С учетом структуры исследуемых мембран, переход от классического механизма проводимости к квантовомеханическому в исследуемом интервале температур можно объяснить следующим образом.

При низких температурах расстояние смещения носителя заряда несопоставимо с временем приложения электрического поля (это показано в работе [2]), и, как следствие, перемещение протона по образцу оказывается лимитированным и не все протоны, подходящие к межфазной границе, могут ее преодолеть.

В области высоких температур ситуация иная. Движение протонов уже не ограничивается проводящими включениями, они могут беспрепятственно перемещаться в объеме образца, так как расстояние, пройденное частицей, пропорционально времени приложения силы.

Заключение

В настоящей работе исследованы механизмы электрической проводимости протонообменной перфторсульфоновой мембраны и влияние ионов тербия, введенных в ее матрицу (мембрана, модифицированная тербием), на эти механизмы. Проведены измерения температурных и частотных зависимостей комплексной диэлектрической проницаемости обоих объектов.

В результате анализа полученных результатов обнаружен рост действительной части є' диэлектрической проницаемости при уменьшении частоты и при увеличении температуры.

Измерение фактора диэлектрических потерь є" в слоях исследуемых систем при разных температурах выявило существование максимума этой величины как для немодифицированных (МФ-4СК), так и для легированных тербием (МФ-4СК + Тb) мембран (МФ-4СК – это российский аналог мембраны Нафион). Анализ полученных экспериментальных данных привел к предположению о существовании распределения по временам релаксации релаксаторов, которыми могут выступать функциональные группы –CF₂, –CH и –CH₂, а также гидрофильные функциональные полярные сульфогруппы –SO₃, в соответствии с моделями Коула – Дэвидсона и Коула – Коула.

Степенная зависимость (5) проводимости от частоты и изменение параметра *s* с ростом температуры (6) характерны для прыжкового механизма проводимости.

Для образцов двух исследованных систем обнаружен переход от классического механизма переноса заряда к квантовомеханическому.

Перенос заряда в изученных объектах имеет активационный характер с энергиями активации

 $E_1 = (0,33 \pm 0,01)$ эВ и $E_2 = (0,37 \pm 0,01)$ эВ

для $M\Phi$ -4CK и $M\Phi$ -4CK + Tb соответственно.

Введение примеси тербия в полимерную матрицу вызывает снижение проводимости исходных мембран, что можно объяснить адсорбцией воды в объеме полимерной матрицы и уменьшением числа протонов вследствие их замещения ионами тербия.

Проведенное исследование расширяет объем информации, относящийся к перфторсульфоновым мембранам и может быть полезным при проектировании и создании топливных элементов с улучшенными характеристиками.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kremer K., Schonhals A. (Eds.). Broadband dielectric spectroscopy. Berlin, Heidelberg: Springer, 2003. 729 p.

2. Малышкина И. А., Бурмистров С. Е. Диэлектрические спектры и эффекты проводимости в сульфированном политетрафторэтилене (Nafion) в ненабухшем состоянии // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. 2006. № 2. С. 54–57.

3. **Ярославцев А. Б.** Перфторированные ионообменные мембраны // Высокомолекулярные соединения. А. 2013. Т. 55. № 11. С. 1367–1392.

4. Mauritz K. A., Gray C. Proton tunneling within the hydration structure of OH-containing perfluorosulfonate ionomer membranes // Macromolecules. 1983. Vol. 16. No. 8. Pp. 1279–1286.

5. **Bekheet A. E., Hegab N. A.** Ac conductivity and dielectric properties of Ge₂₀Se₇₅In₅ films // Vacuum. 2009. Vol. 83. No. 2. Pp. 391–396.

6. **Мустафаева С. Н.** Диэлектрические свойства монокристаллов TlGa_{1-x}Fe_xSe₂ в переменных электрических полях // Журнал радиоэлектроники. 2008. № 5. С. 2.

7. Castro R. A., Lapatin N. A., Karulina E. A., Reztsov T. V. Polarization properties of perfluorosulfonic membranes modified with terbium // St. Petersburg State Polytechnic University Journal. Physics and Mathematics. 2021. Vol. 14. No. 4. Pp. 126–131.

8. Giuntini J. C., Zanchetta J. V., Jullien D., Eholie R., Houenou P. Temperature dependence of dielectric losses in chalcogenide glasses // Journal of Non-Crystalline Solids. 1981. Vol. 45. No. 1. Pp. 57–62.

9. Gosh A. Frequency-dependent conductivity in bismuth-vanadate glassy semiconductors // Physical Review. B. 1990. Vol. 41. No. 3. Pp. 1479–1488.

10. Elliott S. R. A.c. conduction in amorphous chalcogenide and pnictide semiconductors // Advances in Physics. 1987. Vol. 36. No. 2. Pp. 135–217.

11. Jonscher A. K. The universal dielectric response // Nature. 1977. Vol. 267. 23 June. Pp. 673–679.

12. Austin I. G., Mott N. F. Polarons in crystalline and non-crystalline materials // Advances in Physics. 1969. Vol. 18. No. 71. Pp. 41–102.

REFERENCES

1. Kremer K., Schonhals A. (Eds.), Broadband dielectric spectroscopy, Springer, Berlin, Heidelberg, 2003.

2. Malyshkina I. A., Burmistrov S. E., Dielektricheskiye spektry i effekty provodimosti v sulfirovannom politetraftoretilene (Nafion) v nenabukhshem sostoyanii [Dielectric spectra and conductivity effects in the non-swelling sulfonated polytetrafluorethylene (Nafion)], Moscow University Physics Bulletin. (2) (2006) 54–57 (in Russian).

3. **Yaroslavtsev A. B.,** Perfluorinated ion-exchange membranes, Polymer Science, Series A. 55 (11) (2013) 1367–1392.

4. Mauritz K. A., Gray C., Proton tunneling within the hydration structure of OH-containing perfluorosulfonate ionomer membranes, Macromolecules. 16 (8) (1983) 1279–1286.

5. Bekheet A. E., Hegab N. A., Ac conductivity and dielectric properties of $Ge_{20}Se_{75}In_5$ films, Vacuum. 83 (2) (2009) 391–396.

6. **Mustafayeva S. N.,** Dielektricheskiye svoystva monokristallov $TlGa_{1-x}Fe_xSe_2$ v peremennykh elektricheskikh polyakh [Dielectric properties of $TlGa_{1-x}Fe_xSe_2$ single crystals in alternating-current electric fields], Zhurnal Radioelektroniki [Radioelectronics Journal]. (5) (2008) 2 (in Russian).

7. Castro R. A., Lapatin N. A., Karulina E. A., Reztsov T. V., Polarization properties of perfluorosulfonic membranes modified with terbium, St. Petersburg Polytechnic University Journal.

Physics and Mathematics. 14 (4) (2021) 126–131.

8. Giuntini J. C., Zanchetta J. V., Jullien D., et al., Temperature dependence of dielectric losses in chalcogenide glasses, J. Non-Cryst. Solids. 45 (1) (1981) 57–62.

9. Gosh A., Frequency-dependent conductivity in bismuth-vanadate glassy semiconductors, Phys. Rev. B. 41 (3) (1990) 1479–1488.

10. Elliott S. R., A.c. conduction in amorphous chalcogenide and pnictide semiconductors, Adv. Phys. 36 (2) (1987) 135–217.

11. Jonscher A. K., The universal dielectric response, Nature. 267 (23 June) (1977) 673–679.

12. Austin I. G., Mott N. F., Polarons in crystalline and non-crystalline materials, Adv. Phys. 18 (71) (1969) 41–102.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛАПАТИН Николай Анатольевич — кандидат химических наук, научный сотрудник отдела физики конденсированного состояния Научно-исследовательского института физики Российского государственного педагогического университета имени А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия. 191186, Россия, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48

NICOLJAPAT@mail.ru ORCID: 0000-0002-6306-2968

КАСТРО АРАТА Рене Алехандро — доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник отдела физики конденсированного состояния Научно-исследовательского института физики Российского государственного педагогического университета имени А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия.

191186, Россия, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48 recastro@mail.ru ORCID: 0000-0002-1902-5801

КАРУЛИНА Елена Анатольевна — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета имени А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия.

191186, Россия, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48 karulina@mail.ru ORCID: 0000-0001-9604-4769

THE AUTHORS

LAPATIN Nikolay A. Herzen State Pedagogical University of Russia 48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russia NICOLJAPAT@mail.ru ORCID: 0000-0002-6306-2968

CASTRO ARATA Rene Alejandro Herzen State Pedagogical University of Russia 48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russia recastro@mail.ru ORCID: 0000-0002-1902-5801 KARULINA Elena A. Herzen State Pedagogical University of Russia 48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russia karulina@mail.ru ORCID: 0000-0001-9604-4769

Статья поступила в редакцию 02.12.2022. Одобрена после рецензирования 06.12.2022. Принята 12.12.2022. Received 02.12.2022. Approved after reviewing 06.12.2022. Accepted 12.12.2022. Научная статья УДК 538.956 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16102

ЗАВИСИМОСТЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ МОНОКРИСТАЛЛА РМN (111) ОТ ТОЛЩИНЫ А. Ф. Вакуленко¹ [⊠], С. Б. Вахрушев², Е. Ю. Королева¹, Е. А. Васильева³

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия;

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия; ³ НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Россия ²³ sasha705@mail.ru

Аннотация. В работе проведены измерения диэлектрической проницаемости монокристаллов магнониобата свинца PMN (111) с толщинами 400, 25 и 10 мкм на частоте 0,1 Гц. Образцы имели форму плоскопараллельных пластин, полученных шлифовкой вручную и были покрыты металлическими электродами Cr-Au толщиной 80 нм. Топография поверхностей образцов контролировалась методом атомной силовой микроскопии. Были измерены температурные зависимости комплексной диэлектрической проницаемости в диапазоне от 150 до 350 К. Проанализировано изменение температурных зависимостей є́ при варьировании толщины монокристалла. Показано, что при уменьшении его толщины пик на температурной кривой є́ смещается в сторону более высокой температуры, а его ширина значительно увеличивается. Предложено феноменологическое выражение для описания зависимости величины диэлектрической проницаемости от толщины монокристалла.

Ключевые слова: сегнетоэлектрик, релаксор, магнониобат свинца, диэлектрическая проницаемость, температурная зависимость, толщина монокристалла

Финансирование: Вакуленко А. Ф., Вахрушев С. Б., Королева Е. Ю. выполняли исследования при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-02-00724 А). Часть исследований осуществлялась при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования (соглашение № 13.ЦКП.21.0014 (075-11-2021-068). Уникальный идентификационный номер – RF – 2296.61321X0014).

Для цитирования: Вакуленко А. Ф., Вахрушев С. Б., Королева Е. Ю., Васильева Е. А. Зависимость диэлектрической проницаемости монокристалла PMN (111) от толщины // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 1. С. 16–23. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16102

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии СС BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16102

THE PERMITTIVITY – THICKNESS RELATIONSHIP OF A PMN (111) SINGLE CRYSTAL A. F. Vakulenko¹[∞], S. B. Vakhrushev²,

E. Yu. Koroleva¹, E. A. Vasilyeva³

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

² Ioffe Institute, St. Petersburg, Russia;

³NRC "Kurchatov Institute" – Central Research Institute KM "Prometheus", St. Petersburg, Russia Sasha705@mail.ru

© Вакуленко А. Ф., Вахрушев С. Б., Королева Е. Ю., Васильева Е. А., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Abstract. In this work, the permittivity measurements of lead magnoniobate PMN (111) single crystals with thicknesses of 400 μ m, 25 μ m and 10 μ m have been carried out at a frequency of 0.1 Hz. The samples in the form of plane-parallel plates were prepared by hand grinding and then their sides were coated with 80 nm Cr-Au electrodes. The topography of the sample surfaces was controlled by AFM. The temperature dependences of the complex permittivity were obtained in the range from 150 to 350 K. The changes in the temperature dependences of ε with varying the thickness of the single crystals were analyzed. The peak on the temperature curve of ε' was shown to shift to a higher temperature with a decrease in the sample's thickness, and its width increasing significantly. A phenomenological expression was proposed to describe the permittivity – thickness relationship of a single crystal.

Keywords: ferroelectric, relaxor, lead magnoniobate, permittivity, temperature dependence, single-crystal thickness

Funding: Vakulenko A. F., Vakhrushev S. B., Koroleva E. Yu. carried out the research funded by Russian Foundation for Basic Research (grant No. 20-02-00724 A). A part of the research was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (agreement No. 13.CCP.21.0014 (075-11-2021-068). The unique identification number is RF - 2296.61321X0014).

For citation: Vakulenko A. F., Vakhrushev S. B., Koroleva E. Yu., Vasilyeva E. A., The permittivity – thickness relationship of a PMN (111) single crystal, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1) (2023) 16–23. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16102

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons. org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Такие устройства, как ультразвуковые двигатели, микронасосы, акселерометры, сонары, созданы на основе сегнетоэлектрических материалов [1 – 3]. Для развития этих и других аналогичных устройств необходимы материалы с высокой диэлектрической проницаемостью и высоким коэффициентом электромеханической связи [4 - 6]. Указанным требованиям отвечают, в первую очередь, твердые растворы релаксоров с сегнетоэлектриками. В работе [4] подробно рассмотрено развитие и применение нескольких поколений подобных материалов: это бинарные соединения релаксоров с титанатом свинца (PMN-PT, PZN-PT) и тройные соединения - PIN-PMN-PT. Замечательные характеристики данных материалов позволяют значительно расширять возможности пьезоэлектрических преобразователей в различных областях их применения [7]. Известно, что толщина пьезоматериала зависит от используемой рабочей частоты пьезоэлемента [7] (например, в диапазоне 1 – 20 МГц для медицинской визуализации) и обычно находится в интервале от 100 до 1000 мкм. Влияние ограничения геометрических размеров на свойства данных материалов как в виде монокристаллов либо керамики [8, 9], так и в виде тонких пленок [10] является предметом интенсивного изучения. Приводятся различные предположения о причинах связи основных характеристик пьезоматериалов с их толщиной. Так например, в работе [8] ухудшение характеристик материала PMN-PT связывается с образованием поврежденного приповерхностного слоя при подготовке образцов толщиной порядка десятков микрометров, а также с характерными размерами сегнетоэлектрических доменов. В работе [7], наоборот, сообщается о повышении диэлектрической проницаемости при уменьшении толщины монокристалла PZN-PT (12 %) с 750 до 75 мкм. В работе [11] рассмотрены различные факторы влияния на свойства пьезоматериалов и их оценка.

Несмотря на большое число работ, посвященных исследованию двух- и трехсоставных пьезоматериалов, практически не изучается основа этих материалов — релаксор магнониобат свинца Pb(Mn_{1/3}Nb_{2/3})O₃.

Целями настоящей работы являются измерение, анализ и предварительная интерпретация зависимости диэлектрической проницаемости монокристалла PMN (111) от его толщины в широком температурном диапазоне.

© Vakulenko A. F., Vakhrushev S. B., Koroleva E. Yu., Vasilyeva E. A., 2023. Published by Peter the Great St.Petersburg Polytechnic University.

Подготовка образцов

Для проведения измерений методами диэлектрической спектроскопии и атомной силовой микроскопии были изготовлены монокристаллы PMN с ориентацией поверхностей [111] и значениями толщины от 10 до 400 мкм.

Образцы монокристаллов представляли собой пластины с площадью поверхности порядка 1 – 2 мм² и были получены ручной плоскопараллельной шлифовкой.

Для измерения кристаллографической ориентации образцов использовался рентгеновский дифрактометр Oxford Diffraction SuperNova (производство фирмы Agilent Technologies, США). Резку монокристаллов проводили на станке Struers Accutom 50 (Дания) до толщины пластин порядка 0,5 мм. После этого полученные пластины стачивали вручную до необходимой толщины шлифовкой с помощью наждачной бумаги с зернистостью от P500 до P4000 и полировкой алмазной суспензией DiaPro Nap R (Дания).

Для точного измерения размера в процессе шлифовки образец закрепляли на плоскопараллельной стеклянной призме тонким слоем смолы. Учет толщины слоя смолы и толщины обрабатываемого образца выполняли с помощью рычажной скобы Micron CP-25 (Чехия) и набора концевых мер длины. Измерения проводились с предельно допустимой абсолютной погрешностью ±1,5 мкм. Все используемые в работе измерительные приборы внесены в Госреестр СИ.

Обе поверхности каждой из пластин покрывали электродами хром-золото толщиной 84 нм (Cr – 4 нм, Au – 80 нм). Напыление электродов проводили при давлении остаточных газов 10^{-6} Topp с использованием вакуумной установки нанесения тонких пленок Moorfield Minilab 080 (Великобритания). Образец подключали к измерительной цепи через проводящий серебряный лак и золотые провода диаметром 25 мкм.

Диэлектрическую проницаемость измеряли на диэлектрическом спектрометре NOVOCONTROL CONCEPT-80 (Германия), оснащенном системой контроля температуры образца. Измерения проводили в температурном диапазоне от 150 до 350 К; изменение и поддержание температуры образца осуществляли регулированием газообразного потока азота заданной температуры. Для экспериментального исследования возможного наличия полярных структур в ультратонких кристаллах PMN использовали модифицированный метод атомно-силовой микроскопии пьезоотклика (АСМП). При этом использовали атомно-силовой микроскоп AttoAFM I (Германия), снабженный набором внешних измерительных приборов, позволяющих реализовывать метод АСМП.

Результаты и их обсуждение

Методом ACM были получены изображения топографии поверхности монокристалла PMN (рис. 1); шероховатость поверхности составила величину Ra не более 15 нм на площади размером 20 × 20 мкм.



Рис. 1. АСМ-изображение топографии поверхности монокристалла РМN толщиной 10 мкм

Измерения с использованием АСМ проводили при комнатной температуре. Процедура измерения объединяла два метода: АСМП и контактный метод зонда Кельвина [12]. Такая комбинация позволяет проводить измерения петель сегнетоэлектрического гистерезиса и выявлять случаи, когда подобные петли обусловлены не явлением сегнетоэлектричества, а перемещением заряда по поверхности образца.

Результаты измерений указанным комбинированным методом при комнатной температуре показали, что монокристалл PMN с ориентацией поверхности (111) и минимальной толщиной 10 мкм не имеет полярных областей и не находится в сегнетоэлектрическом состоянии.

На рис. 2 представлены зависимости диэлектрической проницаемости от температуры для монокристаллов PMN разной толщины, мкм: 400, 25 и 10, на частоте 0,1 Гц. Также для наглядной демонстрации уширения пика на измеренной зависимости $\varepsilon'(T)$ приведен график величины $\varepsilon'_{norm} = \varepsilon'/\varepsilon'_{max}$. Результаты для монокристаллов толщиной 25 и 10 мкм были получены усреднением по нескольким измерениям. Суммарная абсолютная погрешность экспериментальных данных оценивается величиной, не превышающей 15 %, и включает как неточность размеров при подготовке образцов, так и вклады от погрешности измерений (влияние контактных эффектов и приборная погрешность).

Анализ полученных данных позволяет отметить, что величина диэлектрической проницаемости чистого PMN убывает на порядок с уменьшением толщины кристалла от 400 до 10 мкм. Позиция максимума кривой $\varepsilon'(T)$ смещается на несколько градусов в сторону повышения температуры. Кроме того, сравнение графиков зависимостей $\varepsilon_{norm}(T)$ для образцов разной толщины показывает, что пик диэлектрической проницаемости значительно уширяется при уменьшении толщины кристалла.

На рис. 3 представлена зависимость величины диэлектрической проницаемости в максимуме температурной кривой ε'_{max} от толщины образца h. Чтобы количественно охарактеризовать эту зависимость, нами предлагается следующее феноменологическое выражение:

$$\varepsilon'_{\max}(h) = A \cdot [1 - \exp(-h/B)], \tag{1}$$

где B — константа, характеризующая скорость спада величины ε' при уменьшении толщины образца; A — безразмерная константа.

Константы данного выражения были найдены путем аппроксимации экспериментальных результатов; они имели следующие значения:



Рис. 2. Температурные зависимости действительной (*a*) и мнимой (*b*) частей комплексной диэлектрической проницаемости, а также величины $\varepsilon'_{norm} = \varepsilon'/\varepsilon'_{max}$ (*c*) для монокристаллов PMN разной толщины, мкм: 400 (сплошные линии), 25 (пунктирные линии) и 10 (точечные линии). Данные получены на частоте 0,1 Гц в режимах нагрева (кривые черного цвета) и охлаждения (серого цвета)

19

Сравнение полученных нами результатов с данными, которые известны из литературных источников для кристаллов с большей толщиной, указывает на их сходство. Применимость полученного нами феноменологического выражения мы проверили для данных статьи [8], относящихся к релаксору PMN-PT (см. рис. 1 в указанной статье). Несмотря на большую разницу в значениях величины ε'_{max} (для данных статьи [8] значение $A \approx 6000$), константа *B* имеет значение, близкое к полученному нами для PMN: $B = (57 \pm 20)$ мкм.



Рис. 3. Зависимость величины ε'_{max} от толщины образцов (точки) и ее аппроксимация феноменологическим выражением (1) (сплошная линия)

Заключение

В настоящей работе были подготовлены образцы ультратонких монокристаллов магнониобата свинца (111) толщиной от 400 до 10 мкм и измерены их температурные зависимости диэлектрической проницаемости (действительная (ε') и мнимая (ε') части) в диапазоне от 150 до 350 К. Установлено, что при уменьшении толщины монокристалла позиция пика на кривой $\varepsilon'(T)$ смещается в сторону повышения температуры, а его ширина значительно увеличивается. Для описания зависимости величины диэлектрической проницаемости от толщины монокристалла было предложено феноменологическое выражение $\varepsilon'_{max}(h)$. Показано, что полученное выражение можно использовать и для описания диэлектрической проницаемости другого сегнетоэлектрика – PMN-PT.

Результаты проведенного исследования являются шагом вперед к объяснению причин связи основных характеристик пьезоматериалов с их толщиной, что весьма полезно при разработке устройств на основе сегнетоэлектриков.

Благодарности

Авторы данной статьи А. Ф. Вакуленко, С. Б. Вахрушев, Е. Ю. Королева благодарят РФФИ (грант № 20-02-00724 А) за финансовую поддержку исследований.

Работа частично выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования научным оборудованием «Состав, структура и свойства конструкционных и функциональных материалов» НИЦ «Курчатовский институт» — ЦНИИ КМ «Прометей».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dubois M. A., Muralt P. PZT thin film actuated elastic fin micromotor // IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. 1998. Vol. 45. No. 5. Pp. 1169–1177.

2. Luginbuhl P., Collins S. D., Racine G.-A., Gretillat M.-A., De Rooij N. F., Brooks K. G., Setter N., Microfabricated Lamb wave device based on PZT sol-gel thin film for mechanical transport of solid particles and liquids // Journal of Microelectromechanical Systems. 1997. Vol. 6. No. 4. Pp. 337–346.

3. Bernstein J. J., Finberg S. L., Houston K., Niles L. C., Chen H. D., Cross L. E., Li K. K., Udayakumar K. Micromachined high frequency ferroelectric sonar transducers // IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. 1997. Vol. 44. No. 5. Pp. 960–969.

4. **Baasandorj L., Chen Z.** Recent developments on relaxor-PbTiO₃ ferroelectric crystals // Crystals. 2022. Vol. 12. No. 1. P. 56.

5. Chabok H. R., Zhou Q., Alagha Sh., Tian J., Han P., Shung K. K. Thickness dependent characteristics of high permittivity PMN-0.32 PT single crystal for high frequency medical imaging applications // Ferroelectrics. 2011. Vol. 422. No. 1. Pp. 70–76.

6. Liu G., Zhang Sh., Jiang W., Cao W. Losses in ferroelectric materials // Materials Science and Engineering: R: Reports. 2015. Vol. 89. March. Pp. 1–48.

7. Dammak H., Guennou M., Ketchazo C., Thi M. Ph., Brochin F., Delaunay T., Gaucher P., Le Clezio E., Feuillard G. Sample thickness dependence of electromechanical properties of PZN-PT and PMN-PT single crystals // Proceedings of the 2006 15th IEEE International Symposium on the Applications of Ferroelectrics. 30 July–2 August, Sunset Beach, NC, USA, 2006. Pp. 249–252.

8. Lee H. J., Zhang S., Shrout T. R. Scaling effects of relaxor-PbTiO₃ crystals and composites for high frequency ultrasound // Journal of Applied Physics. 2010. Vol. 107. No. 12. P. 124107.

9. **Oh H. T., Joo H-J., Kim M.-Ch., Lee H.-Y.** Thickness-dependent properties of undoped and Mn-doped (001) PMN-29PT [Pb (Mg_{1/3}Nb_{2/3}) O₃ 29PbTiO₃] single crystals // Journal of the Korean Ceramic Society. 2018. Vol. 55. No. 3. Pp. 290–298.

10. Ferri A., Detalle M., Blach J.-F., Warenghem M., Rémience D., Desfeux R. Thickness effect on nanoscale electromechanical activity in Pb $(Mg_{1/3}Nb_{2/3}) O_3 PbTiO_3$ thin films studied by piezoresponse force microscopy // Journal of Applied Physics. 2011. Vol. 110. No. 10. P. 104101.

11. Ihlefeld J. F., Harris D. T., Keech R., Jones J. L., Maria J.-P., Trolier-McKinstry S. Scaling effects in perovskite ferroelectrics: Fundamental limits and process-structure-property relations // Journal of the American Ceramic Society. 2016. Vol. 99. No. 8. Pp. 2537–2557.

12. Balke N., Maksymovych P., Jesse S., Kravchenko I. I., Li Q., Kalinin S. V. Exploring local electrostatic effects with scanning probe microscopy: Implications for piezoresponse force microscopy and triboelectricity // ACS Nano. 2014. Vol. 8. No. 10. Pp. 10229–10236.

REFERENCES

1. **Dubois M. A., Muralt P.,** PZT thin film actuated elastic fin micromotor, IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control. 45 (5) (1998) 1169–1177.

2. Luginbuhl P., Collins S. D., Racine G.-A., et al., Microfabricated Lamb wave device based on PZT sol-gel thin film for mechanical transport of solid particles and liquids, J. Microelectromech. Syst. 6 (4) (1997) 337–346.

3. Bernstein J. J., Finberg S. L., Houston K., et al., Micromachined high frequency ferroelectric sonar transducers, IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control. 44 (5) (1997) 960–969.

4. **Baasandorj L., Chen Z.,** Recent developments on relaxor-PbTiO₃ ferroelectric crystals, Crystals. 12 (1) (2022) 56.

5. **Chabok H. R., Zhou Q., Alagha Sh., et al.,** Thickness dependent characteristics of high permittivity PMN-0.32 PT single crystal for high frequency medical imaging applications, Ferroelectrics. 422 (1) (2011) 70–76.

6. Liu G., Zhang Sh., Jiang W., Cao W., Losses in ferroelectric materials, Mater. Sci. Eng. R Rep. 89 (March) (2015) 1–48.

7. Dammak H., Guennou M., Ketchazo C., et al., Sample thickness dependence of electromechanical properties of PZN-PT and PMN-PT single crystals, Proc. 2006 15th IEEE Int. Symp. Appl. Ferroelectr., 30 July–2 August, Sunset Beach, NC, USA (2006) 249–252.

8. Lee H. J., Zhang S., Shrout T. R., Scaling effects of relaxor-PbTiO₃ crystals and composites for high frequency ultrasound, J. Appl. Phys. 107 (12) (2010) 124107.

9. **Oh H. T., Joo H-J., Kim M.-Ch., Lee H.-Y.,** Thickness-dependent properties of undoped and Mn-doped (001) PMN-29PT [Pb (Mg_{1/3}Nb_{2/3}) O₃₋29PbTiO₃] single crystals, J. Korean Ceram. Soc. 55 (3) (2018) 290–298.

10. Ferri A., Detalle M., Blach J.-F., et al., Thickness effect on nanoscale electromechanical activity in Pb $(Mg_{1/3}Nb_{2/3}) O_3 PbTiO_3$ thin films studied by piezoresponse force microscopy, J. Appl. Phys. 110 (10) (2011) 104101.

11. **Ihlefeld J. F., Harris D. T., Keech R., et al.,** Scaling effects in perovskite ferroelectrics: Fundamental limits and process-structure-property relations, J. Am. Ceram. Soc. 99 (8) (2016) 2537–2557.

12. Balke N., Maksymovych P., Jesse S., et al., Exploring local electrostatic effects with scanning probe microscopy: Implications for piezoresponse force microscopy and triboelectricity, ACS Nano. 8 (10) (2014) 10229–10236.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ВАКУЛЕНКО Александр Феликсович — кандидат физико-математических наук, инженер Научно-образовательного центра «Физика нанокомпозитных материалов электронной техники» Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 sasha705@mail.ru ORCID: 0000-0001-5541-3409

ВАХРУШЕВ Сергей Борисович — доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией нейтронных исследований Физико-технического института им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26 s.vakhrushev@mail.ioffe.ru ORCID: 0000-0003-4867-1404

КОРОЛЕВА Екатерина Юрьевна — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Научно-образовательного центра «Физика нанокомпозитных материалов электронной техники» Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 e.yu.koroleva@mail.ioffe.ru ORCID: 0000-0003-4370-5417

ВАСИЛЬЕВА Евгения Андреевна — инженер Научно-исследовательского центра «Курчатовский институт» — Центральный научно- исследовательский институт конструкционных материалов (ЦНИИ КМ) «Прометей», Санкт-Петербург, Россия.

191015, Россия, г. Санкт-Петербург, Шпалерная ул., 49 mail@crism.ru

THE AUTHORS

VAKULENKO Aleksandr F. Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia sasha705@mail.ru

ORCID: 0000-0001-5541-3409

VAKHRUSHEV Sergey B.

Ioffe Institute of RAS 26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia s.vakhrushev@mail.ioffe.ru ORCID: 0000-0003-4867-1404 KOROLEVA Ekaterina Yu. Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia e.yu.koroleva@mail.ioffe.ru ORCID: 0000-0003-4370-5417

VASILYEVA Evgenia A. NRC "Kurchatov Institute" - Central Research Institute KM "Prometheus" 49 Shpalernaya St., St. Petersburg, 191015, Russia mail@crism.ru

Статья поступила в редакцию 15.12.2022. Одобрена после рецензирования 21.12.2022. Принята 21.12.2022. Received 15.12.2022. Approved after reviewing 21.12.2022. Accepted 21.12.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2023

Original article UDC 544.778.4:546.775 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16103

NANOSIZED VERTICAL NANOSHEETS MADE OF MOLYBDENUM DISULPHIDE: ELECTRICAL AND OPTOELECTRONIC PROPERTIES

S. E. Alexandrov [⊠], Y. Khattab

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

[⊠] sevgalexandrov@gmail.com

Abstract. In the paper, the results of the studies in the electrical and optoelectronic properties of vertical sheets made of MoS_2 have been presented for the first time. These objects are characterized by a high surface area, exposed edges, reasonable carrier mobility values and high light absorptance. Samples with an average size of about 150 nm were grown by the one-stage metal-organic chemical vapor deposition (MOCVD) technique. Vertically oriented MoS_2 sheets were investigated using the scanning electron and X-ray photoelectron microscopy, the X-ray diffraction and Raman spectroscopy. VI characteristics of the samples were obtained as well. Optoelectronic properties of the samples were studied using an argon laser (operates at a wavelength of 513 nm) with a mechanical light modulator. An analysis of the obtained results allows us to state that the studied V-MoS₂ sheets should be considered as a very promising material for optoelectronics needs.

Keywords: chemical vapor deposition, molybdenum disulphide, vertical nanosheet, optoelectronic and electrical properties

For citation: Alexandrov S. E., Khattab Y., Nanosized vertical nanosheets made of molybdenum disulphide: Electrical and optoelectronic properties, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1) (2023) 24–32. DOI: https://doi. org/10.18721/JPM.16103

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons. org/licenses/by-nc/4.0/)

Научная статья УДК 544.778.4:546.775 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16103

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ОПТОЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НАНОРАЗМЕРНЫХ ВЕРТИКАЛЬНЫХ НАНОЛИСТОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ ИЗ ДИСУЛЬФИДА МОЛИБДЕНА

С. Е. Александров 🖾, Ю. Хаттаб

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

[™] sevgalexandrov@gmail.com

Аннотация. В статье впервые представлены результаты исследования электрических и оптоэлектронных свойств вертикальных листов, изготовленных из дисульфида молибдена MoS_2 (V- MoS_2). Этим объектам свойственны большая удельная поверхность, открытые края, разумные значения подвижности носителей и высокий уровень поглощения света. Образцы со средним размером около 150 нм были выращены методом одностадийного XOГФ при использовании металлорганических исходных соединений (MOCVD). Листы V- MoS_2 изучены методами сканирующей электронной и рентгеновской фотоэлектронной микроскопии, рентгеновской дифракции и спектроскопии комбинационного светорассеяния. Получены вольтамперные характеристики образцов.

© Alexandrov S. E., Khattab Y., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Оптоэлектронные свойства V-MoS₂ исследованы с помощью аргонового лазера (длина волны – 513 нм) с механическим модулятором света. Анализ полученных результатов позволяет утверждать, что изученные листы V-MoS₂ следует рассматривать как весьма перспективный материал для нужд оптоэлектроники.

Ключевые слова: ХОГФ, дисульфид молибдена, вертикальный нанолист, оптические и электрооптические свойства

Ссылка при цитировании: Александров С. Е., Хаттаб Ю. Электрические и оптоэлектронные свойства наноразмерных вертикальных нанолистов, изготовленных из дисульфида молибдена // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 1. С. 24–32. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16103

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии СС BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Introduction

Among the family of transition metal dichalcogenides (TMDs), molybdenum disulphide MoS₂ is one of the most extensively studied materials due to attractive properties of its thin films, such as possibility to transform band structure from an indirect bandgap to a direct one by decreasing their thickness from bulk to a single layer [1, 2]; high room-temperature carrier mobility in MoS₂ (was measured to be about 200 cm² ·V⁻¹·s⁻¹) with a large switching on/off ratio exceeding 10⁸ value, strong interaction with light and low energy consumption [1 – 5]. Consequently, MoS₂ has attracted considerable interest as a promising candidate for manufacturing enhanced transistors, sensors, photodetection and electronic displays [5 – 8]. In addition, MoS₂ has a promising outlook in the fields of solar cells, energy storage, energy conversions and catalytic applications. For example, MoS₂ can be used as a highly efficient electrocatalyst for hydrogen evolution reaction [9 – 14].

Most of the papers published during the last decade have been devoted to formation of monoor few- layers planar MoS_2 structures deposited on the surface of the substrate (mainly sapphire or silicon oxide). However, recently the deposition of vertically aligned sheets of MoS_2 has been achieved and remarkable interest appeared in them due to their specific features including maximum surface area and extensively exposed edges [15 - 17].

The vertical MoS_2 sheets have a complicated structure that has many dongle bonds, in comparison to the layers grown horizontally on the substrate surface. Although many research groups have reported an formation of the MoS_2 vertical nanosheets, their electrical and optoelectronic properties have not been fully studied yet.

The purpose of this work was to make nanosized vertical sheets of MoS_2 (V-MoS₂) and to study their electrical and optoelectronic properties.

Materials and methods

The deposition process was carried out at a low pressure in a hot-wall horizontal tube reactor with a diameter of 56 mm and a length of about 300 mm made of quartz. $Mo(CO)_6$ powder and H_2S gas were used as precursors for metal-organic chemical vapor deposition (MOCVD) to grow MoS_2 films. The molybdenum containing the precursor $Mo(CO)_6$ was introduced into the deposition chamber from the evaporator maintained at the temperature of 30 °C by using argon as a carrier gas. To ensure the complete transfer of the precursor into the reactor, the vapor transport lines were maintained at about 120 °C. The total pressure in the reaction chamber was set to approximately 70 Pa, the substrate temperature was approximately 550 °C and the deposition time was 30 min. The substrates (silicon wafer, silicon wafer with deposited 100 nm SiO_2 film, fused quartz) were cleaned in acetone, alcohol and deionised water for 10 min.

The morphology and composition of the deposited films were studied with the use of scanning electron microscopy (Supra 55 VP with WDX and EDX spectrometers). X-ray photoelectron spectroscopy (SPECS HAS 3500) was used for chemical analysis. The presence of crystalline phases was investigated using X-ray diffraction (Super Nova Dual Wavelength

[©] Александров С. Е., Хаттаб Ю., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

(Agilent Technology), Cu K_{α} ($\lambda = 1.5405$ Å)) and Raman spectrum was measured by Raman spectrometer (Horiba 800).

Silver electrodes were deposited on the samples by electron beam evaporation using high vacuum system (10^{-6} Torr) and electrical properties were measured by Keithley 237 under pressure of about 10^{-4} Torr in Janis cryostat. Voltage-current (VI) measurements were carried out on three samples (repeated 5 times for each sample), and then the measurement results were averaged. Optoelectronic properties were measured using an argon laser (green light) with mechanical chopper.

Results and discussion

Structure and composition. The scanning electron microscopy (SEM) images of the deposited film made on the surface of SiO_2/Si substrate are presented in Fig. 1. As can be seen, the film consists of sheets grown perpendicular to the surface of the substrate. The sheet sizes vary and their average value is about 150 nm. The cross-section of the layer is shown in the inset of the same figure and it clearly shows the vertical growth of the sheets with a height of about 250 nm. Films deposited on the silicon and quartz substrates were characterized by similar morphology without any noticeable differences.

Crystal structure of the films was studied using powder X-ray diffraction (PXRD). As Fig. 2 suggests, all reflections can be attributed to the pure hexagonal phase of MoS_2 with the following



Fig. 1. SEM image (top-view) of vertical MoS₂ nanosheets: their sizes vary and the most are around 150 nm. Inset: the cross section of the objects

lattice parameters:

(standard file JCPDS No. 37-1492) and diffraction peaks from crystalline impurities were not observed. Since the X-ray spectrometer had "powder geometry", it was possible to observe reflections only from planes parallel to the substrate. In this connection, it seems highly probable that the strong reflection (00L) comes from the horizontal layer, while reflections (100) and (101) can refer to vertical sheets. Using the Scherer formula, the thickness of the horizontal layer was calculated from the FWHM value of the diffraction line (002). The minimum thickness of the horizontal layer was found to be about 37 nm.



Fig. 2. PXRD pattern of the MoS_2 film with vertical nanosheets on the silicon oxide substrate with peaks indexed

The Raman spectroscopy is widely used to study crystal structure, the quality of MoS_2 substance, the number of monolayers and texture of MoS_2 films. Two strong characteristic Raman modes E_{12g} and A_{1g} of MoS_2 were observed in the Raman spectra of the deposited films with vertical nanosheets at 381 cm⁻¹ and 407 cm⁻¹, corresponding to in-plane vibration of molybdenum and sulfur atoms, and out-of-plane vibration of sulfur atoms, respectively (Fig. 3). Both modes show a red shift of about 1 cm⁻¹ comparing to the values typical for the bulk MoS_2 probably due to strain in the films. The frequency difference between the E_{12g} and A_1 Raman modes is about 26 cm⁻¹, which indicates the presence of around seven or more layers in the MoS_2 nanosheets.

The energy dispersive X-ray (EDX) and X-ray photoemission (XP) spectra of the film consisting of vertical sheets have signals from Mo, S, C and O atoms only. It seems very likely that the presence of oxygen and carbon is caused by their adsorption from the surrounding



Fig. 3. Raman spectrum pattern of MoS_2 film with vertical nanosheets on silicon oxide substrate

atmosphere. The composition of the MoS₂ film is close to stoichiometric and it has been separately confirmed by the results of XP and EDX spectroscopies (the S/Mo ratio is about 2.01). High resolution XP spectroscopy analysis was carried out to investigate the chemical states of Mo atoms. The deconvolution of the Mo 3d core spectrum by peak fitting reveals two Mo 3d doublets (see Fig. 4). The Mo-atom signal mainly arises from Mo $3d_{5/2}$ (228.9 eV) and Mo $3d_{3/2}$ (232.1 eV) characterized the molybdenum³⁷Mo⁴⁺ sulphide components. The small doublet at lower binding energy (233.0 and 230.2 eV) can be related to defects or 1T phase of MoS₂, while the doublet at higher energy (233.4 and 235.7 eV) corresponds to higher oxidation states (Mo⁵⁺) and (Mo⁶⁺) due to the presence of molybdenum oxide and defects.



Fig. 4. XP spectrum of MoS_2 layer, high resolution spectrum of Mo 3d components with fitting (the red line is an experimental datum and the black one is a fitting result)

Thus, the results of the XRD analysis suggest that the vertical nanosheets are formed not directly on the substrate surface, but on the surface of the horizontally grown MoS_2 layer with a certain thickness. That issue has already been raised in our Ref. [18].

Electrical and optoelectronic properties. Silver films were used as the contact layer to the MoS_2 ones (the films were deposited on the SiO_2/Si substrates) since the ohmic nature of the contact can theoretically be expected considering the fact that Ag and MoS_2 have work function values of 4.5 eV and 5.2 eV, respectively. Voltage-current (VI) relationships measured for vertical sheets under vacuum are shown in Fig. 5. From this figure we notice that they are not linear.

Several models including the Schottky emission, direct tunneling, the Poole – Frenkel emission, and space-charge-limited-current (SCLC) state [19] were used for fitting them with experimental curves, and it was found that the Lampert theory of SCLC could be successfully used to explain the current behavior. As can be seen from Fig. 5, the VI curve plotted in the ($\lg V - \lg I$) coordinates has four distinct regions: ohmic where $I \sim V$ (region I), the Mott – Gurney's law $I \sim V^{3/2}$ (IV), and the trap-filled limit voltage (VTFL) (II). The III region corresponds to the transition from the trap-limited conduction to the trap-free one. $V_{\rm ON}$ and $V_{\rm TFL}$ are the voltage values for the transition from ohmic conducting to the Mott – Gurney's law and from trap-filled conducting to the Mott – Gurney's law and from trap-filled conducting to the Mott – Gurney's law.



Fig. 5. Current density plotted as a function of the applied voltage on the logarithmic scale, insert: the IV region for vertical sheets on linear scale. All measurements were made under vacuum

Using the SCLC method made it possible to calculate a lot of important transport parameters including the carrier mobility, the concentration of free charge carrier and the trap density. Based on the SCLC model for thin films and using the procedure described in Ref. [19], the electrical properties of vertical sheets of MoS, were calculated and tabulated.

Molybdenum disulphide MoS_2 is a material with moderated carrier mobility and the highest values usually correspond to the monolayers (the maximum value reported is about 200 cm²/(V·s) [1]). It should be noted that the mobility value of about 45 cm²/(V·s) measured in this work for vertical sheets is within the typical range. However, after filling the traps, a noticeable increase in the mobility is detected by more than an order of magnitude (region IV), demonstrating a strong effect of defects on mobility in MoS₂. Such value has to be considered as rather high taking into account the low deposition temperature (550 °C) of MoS₂ nanosheets and the complicated structure of the sheets. To confirm this high value of the carrier mobility time-dependent photoresponses were measured by exposing vertical sheets to the argon laser light (513 nm) with 10 V bias. Time responses were measured by real-time CW laser on/off using a variable speed-controlled mechanical chopper. The fulling time *t* was estimated by fitting with exponential function

$$y - y_0 = A \cdot \exp[(x_0 - x)/t],$$
 (1)

where x_0 and y_0 are the initial values, i. e. the time and current values for the moment when the light was turned off.

As can be seen from Fig. 6, the measured values of the rise time (0.65 ms) and the fall time (0.69 ms) are quite small and agree well with the relaxation time calculated using the SCLC method (see the Table).

Parameter	Unit	Curve region used	Parameter value
Carrier mobility	$cm^2/(V\cdot s)$	II	31.4
		IV	475.6
Carrier concentration (in thermal equilibrium)	cm ⁻³	Border I – II	1.0759e+16
Density of traps		Border II – III	6.673e+16
Dielectric relaxation time	S	II	1.41e-2
		IV	7.30e-4

Electrical properties of MoS₂ vertical sheets calculated from SCLC curves (see Fig. 5)

Footnotes. 1. The calculations were performed using the procedure given in Ref. [19]. 2. The dielectric relaxation time was obtained using the calculated carrier mobility as the base.



Fig. 6. Photoresponse curve of vertical nanosheets measured using a CW laser with mechanical chopper. The fulling time was estimated by fitting with exponential function (1)

Summary

The results obtained allow us to conclude that V-MoS₂ nanoscale vertical sheets should be considered as a promising material for the needs of optoelectronics. The study carried out has been demonstrated that MoS_2 nanosheets are able to provide high mobility and fast optoelectronic response.

REFERENCES

1. **Radisavljevic B., Radenovic A., Brivio J., et al.,** Single-layer MoS₂ transistors, Nat. Nanotechnol. 6 (30 January) (2011) 147–150.

2. Ganatra R., Zhang Q., Few-layer MoS₂: A promising layered semiconductor, ACS Nano. 8 (5) (2014) 4074–4099.

3. Yoon Y., Ganapathi K., Salahuddin S., How good can monolayer MoS₂ transistors be? Nano Lett. 11 (9) (2011) 3768–3773.

4. Fivaz R., Mooser E., Mobility of charge carriers in semiconducting layer structures, Phys. Rev. 163 (3) (1967) 743–755.

5. Xia F., Wang H., Xiao D., et al., Two-dimensional material nanophotonics, Nat. Photon. 8 (27 November) (2014) 899–907.

Table

6. Li H., Wu J., Yin Z., Zhang H., Preparation and applications of mechanically exfoliated singlelayer and multilayer MoS₂ and WSe₂ nanosheets, Acc. Chem. Res. 47 (4) (2014) 1067–1075.

7. Lembke D., Bertolazzi S., Kis Å., Single-layer MoS₂ electronics, Acc. Chem. Res. 48 (1) (2015) 100–110.

8. Tsai D. S., Lien D. H., Tsai M. L., et al., Trilayered MoS_2 metal-semiconductor-metal photodetectors: Photogain and radiation resistance, IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. 20 (1) (2014) 30–35.

9. Tsai M.-L., Su Sh.-H., Chang J.-K., et al., Monolayer MoS₂ heterojunction solar cells, ACS Nano. 8 (8) (2014) 8317–8322.

10. Merki D., Hu X., Recent developments of molybdenum and tungsten sulfides as hydrogen evolution catalysts, Energy Environ. Sci. 4 (10) (2011) 3878–3888.

11. Yu Y., Huang S.-Y., Li Y., et al., Layer-dependent electrocatalysis of MoS_2 for hydrogen evolution, Nano Lett. 14 (2) (2014) 553-558.

12. Li H., Tsai C., Koh A., et al., Activating and optimizing MoS_2 basal planes for hydrogen evolution through the formation of strained sulphur vacancies, Nat. Mater. 15 (9 November) (2015) 48–53.

13. Li S., Wang S., Salamone M. M., et al., Edge-enriched 2D MoS₂ thin films grown by chemical vapor deposition for enhanced catalytic performance, ACS Catal. 7 (1) (2017) 877–886.

14. Huang X., Zeng Z., Zhang H., Metal dichalcogenide nanosheets: Preparation, properties and applications, Chem. Soc. Rev. 42 (5) (2013) 1934–1946.

15. Li H., Wu H., Yuan S., Qian H., Synthesis and characterization of vertically standing MoS₂ nanosheets, Sci. Rep. 6 (18 February) (2016) 21171.

16. He M., Lei J., Zhou C., et al., Growth of vertical MoS₂ nanosheets on carbon materials by chemical vapor deposition: Influence of substrates, Mater. Res. Express. 6 (11) (2019) 1150c1.

17. **Khattab Y., Alexandrov S. E., Mukhin I.,** Luminescent vertically oriented nanosheets MoS₂ by low temperature MOCVD, J. Phys. Conf. Ser. 1695 (7th Int. School & Conf. "Saint Petersburg Open 2020": Optoelectron. Photon. Eng. & Nanostruct. April 27–30, 2020. St. Petersburg, Russia) (2020) 012029.

18. Khattab Y., Aleksandrov S. E., Fedorov V. V., Koval' O. Yu., Influence of the deposition temperature on the structure of thin molybdenum disulfide films formed by chemical vapor deposition, Russ. J. Appl. Chem. 94 (8) (2021) 1044–1051.

19. **Chiu F. C.,** Electrical characterization and current transportation in metal/ Dy₂O₃/Si structure, J. Appl. Phys. 102 (4) (2007) 044116.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Radisavljevic B., Radenovic A., Brivio J., Giacometti V., Kis A. Single-layer MoS₂ transistors // Nature Nanotechnology. 2011. Vol. 6. 30 January. Pp. 147–150.

2. Ganatra R., Zhang Q. Few-layer MoS₂: A promising layered semiconductor // American Chemical Society Nano. 2014. Vol. 8. No. 5. Pp. 4074–4099.

3. Yoon Y., Ganapathi K., Salahuddin S. How good can monolayer MoS₂ transistors be? // Nano Letters. 2011. Vol. 11. No. 9. Pp. 3768–3773.

4. Fivaz R., Mooser E. Mobility of charge carriers in semiconducting layer structures // Physical Review. 1967. Vol. 163. No. 3. Pp. 743–755.

5. Xia F., Wang H., Xiao D., Dubey M., Ramasubramaniam A. Two-dimensional material nanophotonics // Nature Photonics. 2014. Vol. 8. 27 November. Pp. 899–907.

6. Li H., Wu J., Yin Z., Zhang H. Preparation and applications of mechanically exfoliated singlelayer and multilayer MoS₂ and WSe₂ nanosheets // Accounts of Chemical Research. 2014. Vol. 47. No. 4. Pp. 1067–1075.

7. Lembke D., Bertolazzi S., Kis A. Single-layer MoS₂ electronics // Accounts of Chemical Research. 2015. Vol. 48. No. 1. Pp. 100–110.

8. **Tsai D. S., Lien D. H., Tsai M. L., Su S. H., Chen K. M., Ke J. J., Yu Y. C., Li L. J., He J. H.** Trilayered MoS₂ metal-semiconductor-metal photodetectors: Photogain and radiation resistance // IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics. 2014. Vol. 20. No. 1. Pp. 30–35. 9. Tsai M.-L., Su Sh.-H., Chang J.-K., Tsai D.-Sh., Chen Ch.-H., Wu Ch.-I., Li L.-J., Chen L.-J., He J.-H. Monolayer MoS, heterojunction solar cells // American Chemical Society Nano. 2014. Vol. 8. No. 8. Pp. 8317–8322.

10. Merki D., Hu X. Recent developments of molybdenum and tungsten sulfides as hydrogen evolution catalysts // Energy and Environmental Science. 2011. Vol. 4. No. 10. Pp. 3878–3888.

11. Yu Y., Huang S.-Y., Li Y., Steinmann S. N., Yang W., Cao L. Layer-dependent electrocatalysis of MoS₂ for hydrogen evolution // Nano Letters. 2014. Vol. 14. No. 2. Pp. 553–558.

12. Li H., Tsai C., Koh A., et al. Activating and optimizing MoS_2 basal planes for hydrogen evolution through the formation of strained sulphur vacancies // Nature Materials. 2015. Vol. 15. 9 November. Pp. 48–53.

13. Li S., Wang S., Salamone M. M., Robertson A. W., Nayak S., Kim H., Tsang C. E., Pasta M., Warner J. H. Edge-enriched 2D MoS₂ thin films grown by chemical vapor deposition for enhanced catalytic performance // American Chemical Society Catalysis. 2017. Vol. 7. No. 1. Pp. 877–886.

14. Huang X., Zeng Z., Zhang H. Metal dichalcogenide nanosheets: Preparation, properties and applications // Chemical Society Reviews. 2013. Vol. 42. No. 5. Pp. 1934–1946.

15. Li H., Wu H., Yuan S., Qian H. Synthesis and characterization of vertically standing MoS₂ nanosheets // Scientific Reports. 2016. Vol. 6. 18 February. P. 21171.

16. He M., Lei J., Zhou C., Shi H., Sun X., Gao B. Growth of vertical MoS₂ nanosheets on carbon materials by chemical vapor deposition: Influence of substrates // Materials Research Express. 2019. Vol. 6. No. 11. P. 1150c1.

17. Khattab Y., Alexandrov S. E., Mukhin I. Luminescent vertically oriented nanosheets MoS_2 by low temperature MOCVD // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1695. 7th International School and Conference "Saint Petersburg Open 2020": Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures. April 27–30, 2020. Saint Petersburg, Russia. P. 012029.

18. Хаттаб Ю., Александров С. Е., Федоров В. В., Коваль О. Ю. Влияние температуры осаждения на строение тонких пленок дисульфида молибдена, формируемых химическим осаждением из газовой фазы // Журнал прикладной химии. 2021. Т. 94. № 8. С. 993–1001.

19. **Chiu F. C.** Electrical characterization and current transportation in metal/ Dy₂O₃/Si structure // Journal of Applied Physics. 2007. Vol. 102. No. 4. P. 044116.

THE AUTHORS

ALEXANDROV Sergey E.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia sevgalexandrov@gmail.com ORCID: 0000-0003-0129-0479

KHATTAB Yossef

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia yossef.physics@gmail.com ORCID: 0000-0001-6116-7830

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АЛЕКСАНДРОВ Сергей Евгеньевич — доктор химических наук, профессор Высшей школы физики и технологий материалов Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 sevgalexandrov@gmail.com ORCID: 0000-0003-0129-0479 St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 1

ХАТТАБ Юссеф — аспирант Высшей школы физики и технологий материалов Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 yossef.physics@gmail.com ORCID: 0000-0001-6116-7830

Received 20.12.2022. Approved after reviewing 22.12.2022. Ассерted 22.12.2022. Статья поступила в редакцию 20.12.2022. Одобрена после рецензирования 22.12.2022. Принята 22.12.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2023

Математическое моделирование физических процессов

Научная статья УДК 538.911; 539.1.03 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16104

ИЗЛУЧЕНИЕ ВЫСОКОЭНЕРГИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ В ИСКРИВЛЕННЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ И ГЕРМАНИЯ

В. В. Гавриловец ¹ ⊠, А. В. Король ², Г. Б. Сушко ²,

В. К. Иванов³, А. В. Соловьев²

¹Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета,

г. Минск, Беларусь;

² Научно-исследовательский центр мезобионаносистем, г. Франкфурт-на-Майне, Германия;

³ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

г. Санкт-Петербург, Россия

[⊠]bycel@tut.by

Аннотация. В работе представлены результаты моделирования процесса распространения высокоэнергетических заряженных частиц в изогнутых кристаллических средах кремния и германия в рамках атомистического подхода. Проведено сравнение расчетных результатов с литературными экспериментальными данными по измерению выходного углового распределения релятивистских электронов с энергией 855 МэВ и очень малой начальной расходимостью, а также их спектров выходного излучения для коротких изогнутых монокристаллов кремния и германия, обладающих различными радиусами изгиба. Установлено хорошее согласие всех результатов.

Ключевые слова: ультрарелятивистский электрон, изогнутый монокристалл, кремний, германий, каналирование, излучение при каналировании электронов

Финансирование: Данная работа поддержана в рамках проекта H2020-MSCA-RISE-2019 N-LIGHT. Также работа частично поддержана грантом БРФФИ-МЦТФ, номер Ф22МЦ-006.

Для цитирования: Гавриловец В. В., Король А. В., Сушко Г. Б., Иванов В. К., Соловьев А. В. Излучение высокоэнергетических электронов при каналировании в искривленных монокристаллах кремния и германия // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 1. С. 33–50. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16104

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии СС BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16104

RADIATION OF HIGH-ENERGY ELECTRONS WHEN CHANNELING IN THE BENT SILICON AND GERMANIUM MONOCRYSTALS

V. V. Haurylavets ¹ [⊠], A. V. Korol ², G. B. Sushko ²,

V. K. Ivanov³, A. V. Solov'yov²

¹ Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University, Minsk, Belarus;

© Гавриловец В. В., Король А. В., Сушко Г. Б., Иванов В. К., Соловьев А. В., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

² MBN Research Center at Frankfurt Innovation Center of Biotechnology, Frankfurt am Main, Germany; ³ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia ^{IIII} bycel@tut.by

Abstract. In the paper, the simulation results on propagation of high-energy charged particles in the bent crystalline (Si and Ge) media have been presented within the atomistic approach. The calculation results were compared with literary experimental data obtained by measuring the output angular distribution of 855 MeV electrons with their very low initial divergence. Moreover, the literary experimental data on output radiation spectra for short bent Si and Ge crystals with different bending radii were taken into account. A good agreement between all the results was found.

Keywords: ultrarelativistic electron, bent monocrystal, silicon, germanium, channeling, radiation when electrons channeling

Funding: The present work is supported by the Project H2020-MSCA-RISE-2019 N- LIGHT. Moreover, the work is partly supported by Grant BRFFI-MCTF, No. F22MC-006.

For citation: Haurylavets V. V., Korol A. V., Sushko G. B., Ivanov V. K., Solov'yov A. V., Radiation of high-energy electrons when channeling in the bent silicon and germanium monocrystals, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1) (2023) 33–50. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16104

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons. org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

В течение многих лет процессы распространения заряженных частиц внутри вещества являются объектом повышенного внимания в теоретических и экспериментальных исследованиях, поскольку результаты таких исследований имеют большое прикладное значение помимо фундаментального. В частности, заряженные ультрарелятивистские частицы, которые распространяются внутри кристаллической решетки, могут проходить аномально большие расстояния в ориентированных кристаллах, двигаясь внутри потенциального канала, созданного электростатическим полем атомных плоскостей или осей. Этот процесс, названный каналированием, был предсказан Йенсом Линдхардом [1] в середине 1960-х годов. Такие частицы, захваченные в канал неизогнутого кристалла, могут пробегать значительные расстояния вследствие малой потери энергии на своем пути (см. монографию [2] и ссылки в ней). Длина пробега частиц, захваченных в монокристалл, существенно превышает среднюю длину их пробега в аморфной мишени. Направления таких каналов зависят от заряда ультрарелятивистских частиц: для электронов канал пролегает в пространных цепочек кристалла, в то время как для позитронов канал пролегает в пространстве между рядами атомов.

Будучи захваченной в канал, частица испытывает осцилляции в плоскости, поперечной направлению распространения частицы, что приводит к излучению при каналировании [3] (см. монографию [4], где дан подробный исторический обзор работ, посвященных этому явлению). Это излучение определяется поперечной энергией каналирующей частицы, его интенсивность зависит не только от энергии частицы, но и от типа монокристалла, ориентации его осей. При этом осцилляционное излучение не когерентно и имеет широкий энергетический спектр [2, 5 – 7].

За последнее время опубликовано большое количество как теоретических [2, 8 – 18], так и экспериментальных [19 – 28] работ, направленных на изучение механизмов каналирования и получение спектров излучения электронов и позитронов в прямых и изогнутых кристаллах кремния и алмаза.

Стабильность движения частиц вдоль каналов определяется малым значением энергии поперечного движения, по сравнению с величиной электростатического барьера. Таким образом, частица считается каналирующей, если длина пробега вдоль канала значительно

[©] Haurylavets V. V., Korol A. V., Sushko G. B., Ivanov V. K., Solov'yov A. V., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

превышает постоянную решетки кристалла. Однако в процессе движения частица может испытывать столкновения с ионами кристаллической решетки, при этом отклониться на значительный угол и выйти из режима каналирования. Такой процесс называется деканалированием. Наряду с деканалированием имеют место процессы реканалирования, когда частица после очередного столкновения может быть вновь захвачена и продолжить движение в другом канале кристалла.

Процессы каналирования, происходящие в изогнутых кристаллах, часто используются для поворота пучков заряженных частиц, ускоренных до релятивистских энергий [2]. Движение частицы складывается из двух компонент: осцилляционное движение в канале и распространение частицы вдоль средней линии искривленного канала. Стабильность последнего движения в таком искривленном канале достигается при дополнительном условии, а именно — когда радиус кривизны R значительно превышает критическую величину R_c , определяемую продольной энергией частицы [2]. Такое движение релятивистской частицы при каналировании в изогнутом канале приводит к дополнительному излучению синхротронного типа. Интенсивность и частота синхротронного излучения зависят от типа и энергии каналирующих частиц, а также от характеристик кристалла [8 – 18].

Исследование синхротронного излучения представляет большой интерес в связи с концепцией кристаллического ондулятора [2]. Возможность каналирования заряженных релятивистских частиц в периодически изогнутом кристалле (кристаллическом ондуляторе) может дать новый источник монохроматического излучения с энергией от сотен кэВ до нескольких МэВ. В некоторых лабораториях проводятся эксперименты по измерению параметров каналирования и характеристик спектров излучения ультрарелятивистских позитронов [29 – 31] и электронов [32, 33] в прямых и изогнутых кристаллах кремния и алмаза. Теоретические работы по исследованию процессов каналирования в этих кристаллах проводятся с использованием разработанного пакета прикладных программ MBN Explorer [34, 35]. Возможность применения этого пакета для моделирования и описания процессов каналирования электронов и позитронов была проверена для аморфного кремния и кристаллов кремния и германия [2, 7, 11, 36].

В связи с вышеизложенным, целью данной работы является моделирование физических процессов при каналировании ультрарелятивистских электронов с энергией 855 МэВ в прямых и изогнутых монокристаллах кремния и германия.

При описании прохождения заряженных частиц через кристаллическую среду используется атомистический подход, реализованный с позиций классической релятивистской физики. Указанный подход предполагает определение траектории распространения заряженных частиц в кристаллах и соответствующие спектры излучения с использованием квазиклассического метода Байера — Каткова [37]. Моделирование процесса каналирования электронов и позитронов в прямых и изогнутых каналах было выполнено с помощью универсального пакета вычислительных программ MBN Explorer [34, 35].

В следующем разделе кратко описана вычислительная процедура для расчета траектории частицы в кристалле. Статистическая обработка большого числа траекторий распространения частиц в кристалле позволяет определять основные параметры каналирования, а также спектры излучения частиц. В последующих разделах значения полученных параметров обсуждаются и сравниваются с экспериментальными данными.

Для сравнения с полученными нами расчетными результатами, экспериментальные данные по угловому рассеянию электронов были взяты из работ [11, 38], а по излучению – из работы [17]. Эти данные были получены на микротроне (МАМИ) в г. Майнце, Германия.

МАМИ представляет собой микротрон, который генерирует пучок релятивистских электронов с энергией 855 МэВ и очень малой их расходимостью (ею можно пренебречь при моделировании). В качестве мишени использовали тонкие изогнутые кристаллы германия и кремния. Технология производства последних хорошо отлажена и позволяет получать очень чистые кристаллы с малым количеством дефектов. Частицы, прошедшие через кристалл, разделялись магнитным полем на заряженные и нейтральные, при этом измерялся спектр их излучения. Экспериментальная установка более детально описана в работе [18].

Метод вычислений

В работе используется метод релятивистской молекулярной динамики, реализуемый в пакете программ MBN Explorer [34, 35]. Данный метод позволяет моделировать прохождение заряженных ультрарелятивистских частиц в электростатическом поле кристаллической среды $\mathbf{E}(\mathbf{r})$. Целью таких расчетов является построение большого количества случайных траекторий движения частиц в кристалле; при их статистической обработке определяются основные характеристики прохождения частиц и спектры их излучения.

Решаются классические уравнения релятивистской механики

$$d\mathbf{p} / dt = q\mathbf{E}, \, d\mathbf{r} / dt = \mathbf{v},\tag{1}$$

где q, \mathbf{r} – заряд частицы и ее координата; \mathbf{p} , \mathbf{v} – ее релятивистский импульс и скорость. Электростатическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ определяется через градиент от суммы атомных потенциалов U_{atom} ближайших атомов к моделируемой частице:

$$q\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -q\nabla_r U(\mathbf{r}),$$

$$U(\mathbf{r}) = \sum_j U_{atom}(\boldsymbol{\rho}_j) = \sum_j U_{atom}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j).$$
 (2)

Потенциал U_{atom} отдельного атома очень быстро спадает, и на некотором расстоянии

$$\rho_j = \left| \mathbf{r} - \mathbf{R}_j \right| \gg \alpha_{\rm TF}$$

где α_{TF} – радиус Томаса – Ферми (в расчетах им можно пренебречь), \mathbf{R}_{j} – радиус-вектор до атома.

Ввиду малости радиуса Томаса – Ферми а_{тг}, при расчете электростатического поля кристаллической среды достаточно ограничиться некоторой областью (конечный объем), в которой атомы расположены по узлам кристаллической решетки. При этом используемый пакет программ учитывает также случайные смещения атомов относительно узлов решетки вследствие тепловых колебаний.

В универсальном пакете MBN Explorer размер области расчета потенциала ρ_j является параметром, задаваемым при моделировании. При расчете потенциала $U(\mathbf{r})$ учитываются атомы в сфере радиуса ρ_j , причем расстояние от частицы до ближайшей стороны области моделирования равно или превышает величину ρ_j . Моделируемая область кристаллической среды является кубической и строится по мере продвижения частицы; изгиб кристалла реализуется как последовательное смещение кристаллической решетки по одной координате.

Использованный нами метод релятивистской молекулярной динамики реализован в программе моделирования MBN Explorer и подробно описан в работе [35]. При моделировании использовались два атомных потенциала: Мольера [39] и Пасиоса [40]. Последний основан на решении уравнений Хартри — Фока, поэтому он точнее описывает поведение атомного потенциала, в том числе на малых расстояниях.

Изгиб кристалла и ориентация кристаллических осей при моделировании задавались такими же значениями параметров, какие использовались на эксперименте, что наглядно показано на рис. 1. Пучок электронов (ЕВ) распространялся вдоль кристаллических плоскостей (CrBP), которые являются по сути вторичными изгибами кристаллической пластинки [41] при деформации кристалла. Именно вторичный изгиб использовался в эксперименте, и мы задавали его значение в настоящих расчетах.

Методами молекулярной динамики было получено большое количество (свыше 10 тыс.) траекторий прохождения электронов через кристалл с учетом случайного распределения тепловых колебаний атомов. Полученные траектории использовались для определения углового распределения электронов, пройденных через кристалл, а также для расчета их спектра излучения. Эти расчеты проводились с помощью вычислительных модулей в рамках MBN Explorer.

Излучение электронов в кристаллах кремния и германия промоделировано для различных радиусов изгиба и ориентации кристаллов; при этом рассмотрены два случая:


Рис. 1. Ориентации осей изогнутого кристалла (BCr) (*a*) и направления электронного пучка (EB) (*b*), использованные в экспериментах и при моделировании:

СгВР, RP – плоскости изгиба кристалла и вращения EB, соответственно; *R* – радиус вторичного изгиба кристалла; α, θ – углы поворота EB относительно плоскости (111) и от оси (112) для получения плоскости (111), соответственно

каналирование электронов, а также их объемное отражение от изогнутых плоскостей кристалла (при наиболее четко выраженном эффекте) [18]. Примеры полученных результатов представлены в иллюстрациях. Значения использованных при этом параметров сведены в таблицу.

Для определения статистических ошибок угловых распределений и излучения использовался следующий метод. Погрешность в определении угла вылета для угловых распределений и энергии гамма-квантов излучения равна соответственно шагу по углу и по энергии на графиках. Статистическая погрешность Δn_i для угловых распределений и излучения определялась по формуле

$$\Delta n_i = t_{\alpha} \left[n_i \left(1 - n_i \right) N \right]^{\frac{1}{2}}, \tag{3}$$

где N – число частиц; n_i – относительная доля частиц в *i*-м бине N_i , $n_i = N_i/N$; t_{α} – коэффициент Стьюдента, соответствующий вероятности α .

Таблица

Монокристалл	Радиус изгиба кристалла <i>R</i> , мм		
	Эксперимент	Расчет	
Германий	—	10,5	
	_	12,5	
	18,3	18,3	
Кремний	13,9		
	20,0		
	27,3		
	47,6		
Электронный пучок был сориентирован вдоль оси (112), а кристалл поворачивали на угол $\theta = 95$ мрад вокруг оси (11-1) при угле $\alpha = 0$ (см. рис. 1).			

Экспериментальные [11, 17, 38] и расчетные значения использованных параметров для двух монокристаллов

Для построения углового распределения использовалось от 40 до 150 тыс. траекторий; для определения спектра излучения — свыше 10 тыс. Экспериментальные данные определяли методом оцифровки графических данных из работ [11, 17]. Значения статистических ошибок для экспериментальных данных углового распределения имели порядок величины толщины линии, поэтому для них статистические ошибки не указаны. Для опубликованных экспериментальных данных по излучению статистические ошибки авторами не были указаны.

Результаты моделирования и их обсуждение

Геометрия кристаллов. Образцы, использованные в экспериментах [38], представляли собой тонкие монокристаллические пластинки кремния или германия толщиной 15 мкм; кристаллическая ось (112) образца была направлена перпендикулярно плоскости пластинки (см. рис. 1, *a*). Для получения изгиба монокристаллическую пластинку вставляли в держатель (разработан специально для этого (см. работу [38])), который обеспечивал равномерный изгиб и позволял варьировать величину радиуса изгиба кристалла в процессе эксперимента. Для достижения малого радиуса изгиба был использован специальный метод: плоскости монокристалла сами сильно изгибались вследствие квазимозаичного эффекта в результате небольшого первичного изгиба в другой плоскости [42].

Электронный пучок направлялся в область, где первичный изгиб кристалла был наименьшим. Направление кристаллических осей и однородность изгиба контролировались перед проведением экспериментов с помощью высокоточной рентгеновской дифракции. В экспериментальной установке держатель с кристаллом размещался в гониометре с тремя степенями свободы и ориентировался таким образом, чтобы каналирование электронов происходило в плоскости (111) [11] (см. рис. 1).

Относительная ориентация используемой плоскости изгиба кристалла (CrBP) и кристаллических осей показана на рис. 1, *a*, где R – радиус вторичного изгиба кристалла, параметр, который использовался и в эксперименте, и при моделировании. На рис. 1, *b* представлена ориентация кристаллических осей относительно направления падения пучка, где θ – угол поворота пучка электронов от оси (112), для получения плоскости (111), а α – угол поворота относительно плоскости (111).

В настоящей работе смоделированы процессы распространения высокоэнергетических электронов в кристаллах кремния и германия, для которых получены экспериментальные данные. Монокристаллы этих элементов обладают одинаковой кубической решеткой, однако существенно различаются зарядами ядер. При распространении электронов в кристалле минимум потенциальной ямы расположен вдоль кристаллических плоскостей атомов в решетке. В результате этого каналирующие электроны рассеиваются значительно сильнее, по сравнению с неканалирующими.

Толщина кристаллов соизмерима с длиной деканалирования для электронов, составляющей примерно 5 — 18 мкм [2]. Это позволяет выделить эффекты, связанные с каналированием отрицательно заряженных частиц, на фоне деканалировавших частиц. В самом деле, изгиб кристаллов позволяет в угловом распределении разделить пик электронов, за-хваченных в режим каналирования от надбарьерных электронов, которые имеют поперечную кинетическую энергию выше барьера усредненного потенциала. Кроме того, изгиб позволяет наблюдать эффект объемного отражения в угловом распределении электронов. Изменение радиуса изгиба кристаллов позволит проверить динамику изменения в угловом распределении электронов в зависимости от изгиба кристалла, а также в зависимости от зарядового числа атома.

Основной пик в угловом распределении электронов содержит надбарьерные деканалировавшие электроны, а также электроны, отраженные от изогнутых кристаллических плоскостей в результате эффекта объемного отражения. Второй пик в угловом распределении формируется электронами, находящимися в режиме каналирования при выходе из кристалла.

Излучение электронов в кристаллах кремния и германия было промоделировано для различных радиусов изгиба в ориентации кристаллов для двух случаев: каналирование электронов, а также их объемное отражение от изогнутых плоскостей кристалла (при наиболее четко выраженном эффекте).

Для моделирования траекторий электронов, использованных при построении углового распределения, мы применяли потенциалы Мольера и Пасиоса.

Учитывая вывод, сделанный в работе [2], о преимуществе потенциала Пасиоса над потенциалом Мольера для описания интенсивности излучения при каналировании в монокристаллах кремния, мы использовали для расчета излучения траектории, полученные расчетным путем с помощью потенциала Пасиоса.

Угловое распределение электронов в изогнутых кристаллах кремния и германия. Сначала рассмотрим прохождение электронов в *режиме каналирования*. Угловое распределение электронов, прошедших вдоль канала через изогнутые монокристаллы кремния и германия, показано на рис. 2. Эти данные приведены в одинаковом масштабе, чтобы наглядно продемонстрировать разницу между объектами, состоящими из атомов разной природы и с различными зарядами ядра.

Основной пик в угловом распределении электронов в монокристалле кремния выше и более острый, чем в монокристалле германия. Это связано с тем, что электроны рассеиваются сильнее на атомах германия, обладающего бо́льшим зарядом ядра. В результате рассеяния меньшая доля электронов остается в режиме каналирования при движении до конца монокристалла, на что указывает высота второго пика.



Рис. 2. Вычисленные (символы, соединенные линиями) и измеренные (линии) угловые распределения [11] электронов с энергией 855 МэВ, прошедших через изогнутые монокристаллы Si (*a*) и Ge (*b*), использованные как мишени.
Моделирование проведено с использованием потенциалов Мольера и Пасиоса (кривые с квадратами и кружками соответственно);

R = 47,6 мм (*a*) и 18,3 мм (*b*) (см. рис. 1 и табл.)

На рис. 2 также представлены результаты моделирования с применением потенциалов Мольера и Пасиоса, которые использовали для расчета траекторий электронов. Для монокристалла кремния разница в распределениях, полученных с помощью этих потенциалов, не выходит за границы статистической погрешности, тогда как для монокристалла германия наблюдается заметное различие результатов. Анализ полученных данных позволяет заключить, что применение потенциала Пасиоса приводит к лучшему согласию с экспериментом.

Отметим, что графики, отражающие результаты моделирования, нормированы на единицу на всем угловом интервале. Так, в диапазоне от -0,38 до 1,40 мрад, в котором находятся основные данные, мы вычисляли площадь под полученной кривой моделирования (см. рис. 2). При этом экспериментальные данные нормировались так, чтобы площади под кривыми экспериментальных измерений совпадали с соответствующими площадями под расчетными кривыми. Каждое рассчитанное угловое распределение нормировалась аналогичным образом, поскольку экспериментальные данные не охватывают все возможные углы отклонения. Кроме того, следует отметить, что для монокристалла кремния второй пик в угловых распределениях, обусловленный электронами, которые находятся в режиме каналирования, расположен ближе к основному максимуму и имеет бо́льшую площадь, чем у соответствующих кривых для кристалла германия.

На рис. 3 представлено сравнение результатов серии расчетов угловых распределений электронов, проведенных при различных значениях радиуса изгиба монокристалла кремния, с экспериментальными данными. С увеличением радиуса изгиба второй пик на указанных распределениях постепенно сдвигается в область бульших углов отклонения и его амплитуда плавно снижается, что соответствует экспериментальным данным.

Различия угловых распределений электронов для кремния и германия с близкими значениями радиусов изгиба монокристалла видны при сравнении результатов, представленных на рис. 2 и 3. Так, значения радиусов изгиба в 18,3 и 20,0 мм для монокристаллов германия и кремния (соответственно) близки, и соответствующие вторые пики на кривых угловых распределений возникают при близких значениях углов отклонения электронов. Однако форма кривых углового распределения существенно различна вследствие более сильного рассеяния электронов на атомах германия, по сравнению с таковым на атомах кремния. Позиции и амплитуды вторых пиков на угловых распределениях электронов хорошо совпадают с полученными на эксперименте (см. рис. 3).



Рис. 3. Вычисленные (символы, соединенные линиями) и измеренные (линии) угловые распределения электронов с энергией 855 МэВ после взаимодействия с изогнутым кристаллом Si. *R*, мм: 27,3 (*a*), 20,0 (*b*) и 13,9 (*c*) (см. рис. 1 и табл.); использован потенциал Пасиоса

Основные пики на кривых распределений, обусловленные электронами, совершающими надбарьерное движение, совпадают для разных радиусов изгиба кристалла (в пределах статистической погрешности). Однако в вершинах этих пиков наблюдается некоторое систематическое отклонение числа электронов, полученных при моделировании, от экспериментальных данных. Следует также отметить, что максимум пиков для экспериментальных данных расположен при значении угла отклонения -0,08 мрад. Кроме того, кривые, относящиеся к результатам моделирования и расположенные между двумя пиками, пролегают немного выше соответствующих кривых, относящихся к экспериментальным данным. Это означает, что при моделировании процесса каналирования доля электронов, переходящих в надбарьерное движение в результате деканалирования, превышает долю, полученную в эксперименте.

На рис. 4 приведены угловые распределения электронов после их прохождения через монокристаллы германия с разными значениями радиуса изгиба. Экспериментальные данные получены только для радиуса изгиба 18,3 мм. В целом можно утверждать, что смоделированная зависимость хорошо описывает экспериментальные данные. При уменьшении радиуса изгиба монокристалла высота максимума второго пика на угловых распределениях, соответствующего каналирующим электронам, снижается и, смещаясь в область бо́льших углов, пик становится все менее выраженным.



Рис. 4. Сравнение вычисленных (символы, соединенные линиями) и измеренных (линии) угловых распределений электронов с энергией 855 МэВ после взаимодействия с изогнутым кристаллом Ge. *R*, мм: 18,3 (линии и кружки), 10,5 (треугольники) и 12,5 (квадратики) (см. рис. 1 и табл.); использован потенциал Пасиоса

Основной пик углового распределения электронов совпадает для разных радиусов изгиба кристалла, что ожидаемо и соответствует теории. На рис. 4 хорошо видно упомянутое выше отличие результатов моделирования от экспериментальных данных, которое состоит в разных направлениях смещения позиции основного пика распределения электронов: при моделировании наблюдается смещение в область положительного значения угла отклонения, тогда как на эксперименте основной пик смещается в область отрицательных значений углов. Кроме того, в области кривых между двумя пиками теоретические значения несколько превышают экспериментальные. Характер различий между результатами моделирования и эксперимента для монокристаллов германия и кремния сохраняется для различных радиусов изгиба.

Теперь рассмотрим поведение электронов в *режиме объемного отражения от изогнутых плоскостей монокристалла* (при наиболее четко выраженном эффекте).

На рис. 5 приведено сравнение между результатами моделирования угловых распределений электронов (использован пакет прикладных программ MBN Explorer) и экспериментальными данными для случая объемного отражения в изогнутых монокристаллах кремния и германия. Смоделированная зависимость была рассчитана при значениях $\alpha = 0,45$ мрад, $\theta = 95$ мрад и радиусе изгиба 47,6 мм, чтобы соответствовать условиям эксперимента. Моделирование проведено с использованием потенциалов Пасиоса и Мольера.

Для монокристалла кремния результаты моделирования с применением двух указанных потенциалов совпадают очень хорошо. Для германия наблюдается различие в области максимума пика объемного отражения. Положение максимума смещено в область большего отклонения. Позиция, высота и ширина второго максимума в распределении электронов, попавших в режим каналирования после объемного захвата, довольно хорошо совпадают с экспериментальными данными.

Далее ведется обсуждение результатов вычислений с использованием потенциала Пасиоса.

Угловые распределения электронов в кристаллах кремния и германия различаются по высоте и ширине пиков объемного отражения, что вызвано более сильным рассеянием электронов на атомах германия. Позиция второго пика на распределении, сформированном электронами в режиме каналирования после объемного захвата, совпадает с соответствующими экспериментальными данными для обоих элементов, однако высота этого пика у кремния заметно выше по абсолютной величине, тогда как у германия различие небольшое.



Рис. 5. Вычисленные (символы, соединенные линиями) и измеренные (линии) угловые распределения электронов с энергией 855 МэВ после взаимодействия с изогнутыми кристаллами Si (R = 47,6 мм) (a) и Ge (R = 18,3 мм) (b).
Расчет выполнен с использованием потенциалов атомов Пасиоса и Мольера (кривые с квадратами и кружками соответственно) при α = 0,45 мрад, θ = 95 мрад

Высота пиков, относящихся к объемному отражению, на кривых углового распределения электронов для обоих элементов ниже, чем на эксперименте, однако их положения совпадают. Для монокристалла кремния на графике углового распределения наблюдается суперпозиция основных и сопутствующих пиков углового распределения.

Спектры излучения при каналировании в изогнутых монокристаллах кремния и германия

Спектральное распределение интенсивности излучения рассчитывалось при распространении электронов в кристаллах кремния и германия в режиме каналирования. Для расчета интенсивности излучения в режиме каналирования использовали полученные ранее траектории электронов при определении углового распределения электронов (см. раздел «Угловое распределение электронов в изогнутых кристаллах кремния и германия», режим каналирования). С целью удобства анализа и сравнения графиков излучения применялось нормирование данных, при котором спектральные значения умножались на энергию фотонов. В таком представлении тормозное излучение по формуле Бете — Гайтлера приобретает вид горизонтальной прямой, а отклонения от нее указывают либо на усиление, либо на ослабление этого излучения. Поскольку интенсивность излучения зависит от заряда ядер атомов монокристалла, в случае германия интенсивность выше, чем в случае кремния.

На рис. 6, a - c приведены спектры излучения электронов для режима каналирования при различных значениях радиуса изгиба монокристалла кремния. По вертикальным осям отложены значения интенсивности излучения в безразмерных единицах E(dN/dE), где E – энергия гамма-кванта, dN – число квантов гамма-излучения в интервале энергии dE. Экспериментальные данные взяты из работы [17].



Рис. 6. Вычисленные (символы, соединенные линиями) и экспериментальные [17] (линии) спектры излучения, испускаемого электронными пучками с исходной энергией 855 МэВ, после взаимодействий с изогнутыми кристаллами Si (*a* - *c*) и Ge (*d* - *f*) под углами θ = 95 мрад и α = 0; *R*, мм: 27,3 (*a*), 20,0 (*b*), 13,9 (*c*), 18,3 (*d*), 12,5 (*e*), 10,5 (*f*) (см. табл.). Моделирование выполнено с использованием потенциала Пасиоса

При уменьшении радиуса изгиба бо́льшая часть электронов находится в режиме надбарьерного движения и, соответственно, интенсивность излучения ниже. Важно отметить, что результаты моделирования повторяют все характерные особенности экспериментальных данных. Однако заметим, что в низкоэнергетической области спектра экспериментальные данные отсекаются, поэтому ниже энергии в 1 МэВ сравнение с результатами моделирования было невозможным.

На рис. 6, d - f показаны спектры излучения из монокристалла германия с различными значениями радиуса изгиба для режима каналирования. Ввиду большей величины заряда ядра германия, интенсивность этого излучения выше, чем соответствующая интенсивность для кремния. Помимо этого, изменения интенсивности излучения в зависимости от энергии фотона в случае кристалла германия менее выражены, по сравнению с кристаллом кремния.



Рис. 7. Расчетные низкоэнергетические части спектров излучения для изогнутого кристалла Si (см. рис. 6, a - c) для тех же радиусов изгиба, т. е. R, мм: 27,3 (квадраты), 20,0 (треугольники), 13,9 (линия без символов), а также R = 47,6 мм (кружки)

Особенности низкоэнергетической части спектра (интервал 20 – 500 кэВ) для кремния представлены на рис. 7. Видно, что здесь имеет место рост интенсивности излучения при уменьшении радиуса изгиба кристалла. Это происходит в результате эффекта синхротронного излучения, обусловленного поворотом траектории электронов изогнутым кристаллом. При самом малом радиусе изгиба монокристалла (13,9 мм) траектория искривляется сильней и наблюдается более интенсивное излучение. Полученный результат можно рассматривать в качестве прогноза, ввиду отсутствия соответствующих экспериментальных данных.

Полученные результаты моделирования показывают, что интенсивность излучения зависит от радиуса изгиба монокристалла и от заряда ядер его атомов.

Заключение

Проведено моделирование процесса прохождения электронов через тонкие изогнутые монокристаллы кремния и германия в рамках атомистического подхода, который основан на релятивистской молекулярной динамике в рамках классической релятивистской физики и рассчитаны параметры их излучения. Вычисления выполнены с помощью пакета прикладных программ MBN Explorer.

Результаты моделирования для углового распределения электронов в целом хорошо описывают экспериментальные данные. Некоторое отличие наблюдается в высоте основного пика углового распределения при анализе эффекта объемного отражения. Для обоих элементов вторые максимумы углового распределения электронов имеют хорошее согласие с экспериментальными данными при различных радиусах изгиба кристалла как по положению наблюдаемых пиков, так и по их высоте.

Возможной причиной отклонения расчетных угловых распределений от экспериментальных данных является неидеальность кривизны кристаллических плоскостей [43], которая увеличивается с ростом поперечной ширины пучка. Другой причиной могут быть квантовые эффекты, которые не учитывались в рамках используемого атомистического подхода [44, 45].

Результаты моделирования спектров излучения очень хорошо совпадают с экспериментальными данными для различных радиусов изгиба кристаллов и обоих кристаллических материалов. На теоретических кривых для кремния в низкоэнергетической части наблюдается изменение интенсивности излучения для различных радиусов изгиба кристалла, обусловленное, вероятно, радиационным излучением, возникающим в результате поворота электронов изогнутыми кристаллическими плоскостями.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lindhard J. Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles // Matematisk-Fysiske Meddelelser udgivet af Det Konglige Danske Videnskabernes Selskab. 1965. Vol. 34. No. 14. Pp. 1–64.

2. Korol A. V., Solov'yov A. V., Greiner W. Channeling and radiation in periodically bent crystals. 2nd ed. Berlin, Heildeberg: Springer-Verlag, 2014. 240 p.

3. **Kumakhov M. A.** On the theory of electromagnetic radiation of charged particles in a crystal // Physics Letters A. 1976. Vol. 57. No. 1. Pp. 17–18.

4. Базылев В. А., Жеваго Н. К. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. М.: Наука, 1987. 267 с.

5. Sáenz A. W., Überall H. Coherent radiation sources. Berlin, Heildeberg: Springer-Verlag, 1985. 235 p.

6. **Кумахов М. А., Комаров Ф. Ф.** Излучение заряженных частиц в твердых телах. Минск: Университетское, 1985. 383 с.

7. **Baryshevsky V. G., Tikhomirov V. V.** Crystal undulators: from the prediction to the mature simulations // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. 2013. Vol. 309. 15 August. Pp. 30–36.

8. Sushko G. B., Bezchastnov V. G., Korol A. V., Greiner W., Solov'yov A. V., Polozkov R. G., Ivanov V. K. Simulations of electron channeling in bent silicon crystal // Journal of Physics: Conference Series. 2013. Vol. 438. 14 June. P. 012019.

9. Polozkov R. G., Ivanov V. K., Sushko G. B., Korol A. V., Solov'yov A. V. Radiation emission by electrons channeling in bent silicon crystals // European Physics Journal D. 2014. Vol. 68. No. 9. P. 268.

10. Sushko G. B., Korol A. V., Solov'yov A. V. Multi-GeV electron and positron channeling in bent silicon crystals // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2015. Vol. 355. 15 July. Pp. 39–43.

11. Sytov A. I., Bandiera L., De Salvador D., et al. Steering of sub-GeV electrons by ultrashort Si and Ge bent crystals // European Physics Journal C. 2017. Vol. 77. No. 12. P. 901.

12. Korol A. V., Bezchastnov V. G., Sushko G. B., Solov'yov A. V. Simulation of channeling and radiation of 855 MeV electrons and positrons in a small-amplitude short-period bent crystal // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2016. Vol. 387. 15 November. Pp. 41–53.

13. Shen H., Zhao Q., Zhang F. S., Sushko G. B., Korol A. V., Solov'yov A. V. Channeling and radiation of 855 MeV electrons and positrons in straight and bent tungsten (110) crystals // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2018. Vol. 424. 1 June. Pp. 26–36.

14. Korol A. V., Bezchastnov V. G., Solov'yov A. V. Channeling and radiation of the 855 MeV electrons enhanced by the re-channeling in a periodically bent diamond crystal // European Physics Journal D. 2017. Vol. 71. No. 6. P. 174.

15. Павлов А. В., Король А. В., Иванов В. К., Соловьев А. В. Излучение позитронов и электронов с энергией 375 МэВ при каналировании в прямых и периодически изогнутых кристаллах алмаза // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 108–118.

16. Pavlov A. V., Korol A. V., Ivanov V. K., Solov'yov A. V. Interplay and specific features of radiation mechanisms of electrons and positrons in crystalline undulators // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2019. Vol. 52. No. 11. Pp. 11–16.

17. **Bandiera L., Sytov A., De Salvador D., et al.** Investigation on radiation generated by sub-GeV electrons in ultrashort silicon and germanium bent crystals // European Physics Journal C. 2021. Vol. 81. No. 4. P. 284.

18. Haurylavets V. V., Leukovich A., Sytov A., Bandiera L., Mazzolari A., Romagnoni M., Guidi V., Sushko G. B., Korol A. V., Solov'yov A. V. MBN explorer atomistic simulations of 855 MeV electron propagation and radiation emission in oriented silicon bent crystal: Theory versus experiment // The European Physical Journal Plus. 2022. Vol. 137. No. 1. P. 34.

19. Bandiera L., Bagli E., Germogli G., et al. Investigation of the electromagnetic radiation emitted by sub-GeV electrons in a bent crystal // Physical Review Letters. 2015. Vol. 115. No. 2. P. 025504.

20. Mazzolari A., Bagli E., Bandiera L., et al. Steering of a sub-GeV electron beam through planar channeling enhanced by rechanneling // Physical Review Letters. 2014. Vol. 112. No. 13. P. 135503.

21. Wistisen T. N., Andersen K. K., Yilmaz S., Mikkelsen R., Hansen J. L., Uggerhøj U. I., Lauth W., Backe H. Experimental realization of a new type of crystalline undulator // Physical Review Letters. 2014. Vol. 112. No. 25. P. 254801.

22. Yabashi M., Tanaka H. The next ten 2023s of X-ray science // Nature Photonics. 2017. Vol. 11. No. 1. Pp. 12–14.

23. Backe H., Lauth W. Channeling experiments with sub-GeV electrons in flat silicon single crystals // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2015. Vol. 355. 15 July. Pp. 24–29.

24. **Backe H., Lauth W.** Channeling experiments with electrons at the Mainz Microtron MAMI // 4th International Conference "Dynamics of Systems on the Nanoscale" (Bad Ems, Germany. October 3–7, 2016). Book of Abstracts. 2016. P. 58.

25. Wistisen T. N., Uggerhøj U. I., Wienands U., et al. Channeling, volume reflection, and volume capture study of electrons in a bent silicon crystal // Physical Review Accelerators and Beams. 2016. Vol. 19. No. 7. P. 071001.

26. **Bagli E., Bandiera L., Bellucci V., et al.** Experimental evidence of planar channeling in a periodically bent crystal // The European Physical Journal C. 2014. Vol. 74. No. 10. P. 3114.

27. Wienands U., Markiewicz T. W., Nelson J., et al. Observation of deflection of a beam of multi-GeV electrons by a thin crystal // Physical Review Letters. 2015. Vol. 114. No. 7. P. 074801.

28. Uggerhøj U. I., Wistisen T. N. Intense and energetic radiation from crystalline undulators // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2015. Vol. 355. 15 July. Pp. 35–38.

29. Baranov V. T., Bellucci S., Biryukov V. M., et al. Preliminary results on the study of radiation from positrons in a periodically deformed crystal // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2006. Vol. 252. No. 1. Pp. 32–35.

30. Backe H., Krambrich D., Lauth W., et al. Future aspects of X-ray emission from crystal undulators at channeling of positrons // Il Nuovo Cimento C. 2011. Vol. 34. No. 4. Pp. 175–180.

31. Backe H., Kunz P., Lauth W., Rueda A. Planar channeling experiments with electrons at the 855 MeV Mainz Microtron MAMI // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2008. Vol. 266. No. 17. Pp. 3835–3851.

32. Backe H., Krambrich D., Lauth W., Lundsgaard J., Hansen J. L., Uggerhøj U. I. X-ray emission from a crystal undulator – Experimental results at channeling of electrons // Il Nuovo Cimento C. 2011. Vol. 34. No. 4. Pp. 157–165.

33. Backe H., Krambrich D., Lauth W., Andersen K. K., Hansen J. L., Uggerhøj U. I. Channeling and radiation of electrons in silicon single crystals and $Si_{1-x}Ge_x$ crystalline undulators // Journal of Physics: Conference Series. 2013. Vol. 438. 14 June. P. 012017.

34. Solov'yov I. A., Yakubovich A. V., Nikolaev P. V., Volkovets I., Solov'yov A. V. MesoBioNano explore – A universal program for multiscale computer simulations of complex molecular structure and dynamics // Journal of Computational Chemistry. 2012. Vol. 33. No. 30. Pp. 2412–2439.

35. Sushko G. B., Bezchastnov V. G., Solov'yov I. A., Korol A. V., Greiner W., Solov'yov A. V. Simulation of ultra-relativistic electrons and positrons channeling in crystals with MBN Explorer // Journal of Computational Physics. 2013. Vol. 252. 1 November. Pp. 404–418.

36. Полозков Р. Г., Иванов В. К., Сушко Г. Б., Король А. В., Соловьев А. В. Каналирование ультрарелятивистских позитронов в изогнутых кристаллах алмаза // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2015. № 2 (218). С. 167–178.

37. Байер В. Н., Катков В. М., Страховенко В. М. Электромагнитные процессы при высокой энергии в ориентированных монокристаллах. Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние, 1989. 396 с.

38. De Salvador D., Carturan S., Mazzolari A., et al. Innovative remotely-controlled bending device for thin silicon and germanium crystals // Journal of Instrumentation. 2018. Vol. 13. No. 4. P. C04006.

39. **Moli'ere G.** Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I: Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld // Zeitschrift für Naturforschung A. 1947. Vol. 2a. No. 3. Pp. 133–145.

40. **Pacios L. F.** Analytical density-dependent representation of Hartree – Fock atomic potentials // Journal of Computational Chemistry. 1993. Vol. 14. No. 4. Pp. 410–421.

41. Camattari R., Guidi V., Bellucci V., Mazzolari A. The 'quasi-mosaic' effect in crystals and its applications in modern physics // Journal of Applied Crystallography. 2015. Vol. 48. Part 4. Pp. 977–989.

42. Иванов Ю. М., Петрунин А. А., Скоробогатов В. В. Наблюдение эффекта упругой квазимозаичности в изогнутых монокристаллах кремния // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2005. Т. 81. № 3. С. 129–132.

43. Sushko G. B., Korol A. V., Solov'yov A. V. Ultra-relativistic electron beams deflection by quasimosaic crystals arxiv.org/abs/2110.12959. Accessed October 12, 2022.

44. Artru X. Quantum versus classical approach of dechanneling and incoherent electromagnetic processes in aligned crystals (draft) // Journal of Instrumentation. 2020. Vol. 15. April 3. P. C04010.

45. Tikhomirov V. V. Relativistic particle incoherent scattering in oriented crystals arxiv.org/ abs/2004.06020. Accessed October 12, 2022.

REFERENCES

1. Lindhard J., Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 34 (14) (1965) 1–34.

2. Korol A. V., Solov'yov A. V., Greiner W., Channeling and radiation in periodically bent crystals. 2nd ed., Springer-Verlag, Berlin, Heildeberg, 2014.

3. Kumakhov M. A., On the theory of electromagnetic radiation of charged particles in a crystal, Phys. Lett. A. 57 (1) (1976) 17–18.

4. **Bazylev V. A., Zhevago N. K.,** Izlucheniye bystrykh chastits v veshchestve i vo vneshnikh polyakh [Emission from fast particles in matter and in external fields], Nauka Publishing, Moscow, 1987 (in Russian).

5. Sáenz A. W., Überall H., Coherent radiation sources, Springer-Verlag, Berlin, Heildeberg, 1985.

6. Kumakhov M. A., Komarov F. F., Radiation from charged particles in solids, American Institute of Physics, New York, 1989.

7. Baryshevsky V. G., Tikhomirov V. V., Crystal undulators: from the prediction to the mature simulations, Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 309 (15 August) (2013) 30–36.

8. Sushko G. B., Bezchastnov V. G., Korol A. V., et al., Simulations of electron channeling in bent silicon crystal, J. Phys. Conf. Ser. 438 (14 June) (2013) 012019.

9. Polozkov R. G., Ivanov V. K., Sushko G. B., et al., Radiation emission by electrons channeling in bent silicon crystals, Eur. Phys. J. D. 68 (9) (2014) 268.

10. Sushko G. B., Korol A. V., Solov'yov A. V., Multi-GeV electron and positron channeling in bent silicon crystals, Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 355 (15 July) (2015) 39–43.

11. Sytov A. I., Bandiera L., De Salvador D., et al., Steering of sub-GeV electrons by ultrashort Si and Ge bent crystals, Eur. Phys. J. C. 77 (12) (2017) 901.

12. Korol A. V., Bezchastnov V. G., Sushko G. B., Solov'yov A. V., Simulation of channeling and radiation of 855 MeV electrons and positrons in a small-amplitude short-period bent crystal, Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 387 (15 November) (2016) 41–53.

13. Shen H., Zhao Q., Zhang F. S., et al., Channeling and radiation of 855 MeV electrons and positrons in straight and bent tungsten (110) crystals, Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 2018. Vol. 424 (1 June) (2018) 26–36.

14. Korol A. V., Bezchastnov V. G., Solov'yov A. V., Channeling and radiation of the 855 MeV electrons enhanced by the re-channeling in a periodically bent diamond crystal, Eur. Phys. J. D. 71 (6) (2017) 174.

15. Pavlov A. V., Ivanov V. K., Korol A. V., Solov'yov A. V., Radiation of 375 MeV electrons and positrons during channeling in straight and periodically bent diamond crystals, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 12 (4) (2019) 108–118.

16. **Pavlov A. V., Korol A. V., Ivanov V. K., Solov'yov A. V.,** Interplay and specific features of radiation mechanisms of electrons and positrons in crystalline undulators, J. Phys. B. 52 (11) (2019) 11–16.

17. Bandiera L., Sytov A., De Salvador D., et al., Investigation on radiation generated by sub-GeV electrons in ultrashort silicon and germanium bent crystals, Eur. Phys. J. C. 81 (4) (2021) 284.

18. Haurylavets V. V., Leukovich A., Sytov A., et al., MBN explorer atomistic simulations of 855 MeV electron propagation and radiation emission in oriented silicon bent crystal: Theory versus experiment, Eur. Phys. J. Plus. 137 (1) (2022) 34.

19. Bandiera L., Bagli E., Germogli G., et al., Investigation of the electromagnetic radiation emitted by sub-GeV electrons in a bent crystal, Phys. Rev. Lett. 115 (2) (2015) 025504.

20. Mazzolari A., Bagli E., Bandiera L., et al., Steering of a sub-GeV electron beam through planar channeling enhanced by rechanneling, Phys. Rev. Lett. 112 (13) (2014) 135503.

21. Wistisen T. N., Andersen K. K., Yilmaz S., et al., Experimental realization of a new type of crystalline undulator, Phys. Rev. Lett. 112 (25) (2014) 254801.

21. Wistisen T. N., Andersen K. K., Yilmaz S., et al., Experimental realization of a new type of crystalline undulator, Phys. Rev. Lett. 112 (25) (2014) 254801.

22. Yabashi M., Tanaka H., The next ten 2023s of X-ray science, Nat. Photonics. 11 (1) (2017) 12–14.

23. Backe H., Lauth W., Channeling experiments with sub-GeV electrons in flat silicon single crystals, Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 355 (15 July) (2015) 24–29.

24. **Backe H., Lauth W.,** Channeling experiments with electrons at the Mainz Microtron MAMI, In book: The 4th Intern. Conf. "Dynamics of Systems on the Nanoscale" (Bad Ems, Germany, Oct. 3–7, 2016), Book of Abstracts (2016) 58.

25. Wistisen T. N., Uggerhøj U. I., Wienands U., et al., Channeling, volume reflection, and volume capture study of electrons in a bent silicon crystal, Phys. Rev. Acc. Beams. 19 (7) (2016) 071001.

26. **Bagli E., Bandiera L., Bellucci V., et al.,** Experimental evidence of planar channeling in a periodically bent crystal, Europ. Phys. J. C. 74 (10) (2014) 3114.

27. Wienands U., Markiewicz T.W., Nelson J., et al., Observation of deflection of a beam of multi-GeV electrons by a thin crystal, Phys. Rev. Lett. 114 (7) (2015) 074801.

28. Uggerhøj U. I., Wistisen T. N., Intense and energetic radiation from crystalline undulators, Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 355 (15 July) (2015) 35–38.

29. Baranov V. T., Bellucci S., Biryukov V. M., et al., Preliminary results on the study of radiation from positrons in a periodically deformed crystal, Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 252 (1) (2006) 32–35.

30. Backe H., Krambrich D., Lauth W., et al., Future aspects of X-ray emission from crystal undulators at channeling of positrons, Il Nuovo Cimento C. 34 (4) (2011) 175–180.

31. Backe H., Kunz P., Lauth W., Rueda A., Planar channeling experiments with electrons at the 855 MeV Mainz Microtron MAMI, Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 266 (17) (2008) 3835–3851.

32. Backe H., Krambrich D., Lauth W., et al., X-ray emission from a crystal undulator – Experimental results at channeling of electrons, Il Nuovo Cimento C. 34 (4) (2011) 157–165.

33. Backe H., Krambrich D., Lauth W., et al., Channeling and radiation of electrons in silicon single crystals and $Si_{1-x}Ge_x$ crystalline undulators, J. Phys. Conf. Ser. 438 (14 June) (2013) 012017.

34. Solov'yov I. A., Yakubovich A. V., Nikolaev P. V., et al., MesoBioNano explore – A universal program for multiscale computer simulations of complex molecular structure and dynamics, J. Comput. Chem. 33 (30) (2012) 2412–2439.

35. Sushko G. B., Bezchastnov V. G., Solov'yov I. A., et al., Simulation of ultra-relativistic electrons and positrons channeling in crystals with MBN Explorer, J. Comput. Phys. 252 (1 November) (2013) 404–418.

36. Polozkov R. G., Ivanov V. K., Sushko G. B., et al., Channeling of ultrarelativistic positrons in bent diamond crystals, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (2 (218)) (2015) 167–178.

37. Baier V. N., Katkov V. M., Strakhovenko V. M., Electromagnetic processes at high energies in oriented single crystals, World Scientific, Singapore, 1998.

38. De Salvador D., Carturan S., Mazzolari A., et al., Innovative remotely-controlled bending device for thin silicon and germanium crystals, J. Instrum. 13 (4) (2018) C04006.

39. Moli'ere G., Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I: Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld, Z. Naturforsch. A. 2a (3) (1947) 133–145.

40. **Pacios L. F.,** Analytical density-dependent representation of Hartree – Fock atomic potentials, J. Comput. Chem. 14 (4) (1993) 410–421.

41. Camattari R., Guidi V., Bellucci V., Mazzolari A., The 'quasi-mosaic' effect in crystals and its applications in modern physics, J. Appl. Crystallogr. 48 (4) (2015) 977–989.

42. Ivanov Yu. M., Petrunin A. A., Skorobogatov V. V., Observation of the elastic quasi-mosaicity effect in bent silicon single crystals, JETP Lett. 81 (3) (2005) 99–101.

43. Sushko G. B., Korol A. V., Solov'yov A. V., Ultra-relativistic electron beams deflection by quasimosaic crystals arxiv.org/abs/2110.12959. Accessed Oct. 12, 2022.

44. Artru X., Quantum versus classical approach of dechanneling and incoherent electromagnetic processes in aligned crystals (draft), J. Instrum. 15 (April 3) (2020) C04010.

45. Tikhomirov V. V., Relativistic particle incoherent scattering in oriented crystals arxiv.org/ abs/2004.06020. Accessed Oct. 12, 2022.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГАВРИЛОВЕЦ Виктор Васильевич — научный сотрудник отраслевой лаборатории радиационной безопасности Института ядерных проблем Белорусского государственного университета, г. Минск, Беларусь.

220006, Беларусь, г. Минск, Бобруйская ул., 11 bycel@tut.by ORCID: 0000-0002-9452-7465

КОРОЛЬ Андрей Владимирович — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Научно-исследовательского центра мезобионаносистем (MBN), г. Франкфурт-на-Майне, Германия.

Altenhöferallee 3, Frankfurt am Main, 60438, Germany korol@mbnexplorer.com

СУШКО Геннадий Борисович — научный сотрудник Научно-исследовательского центра мезобионаносистем (MBN), г. Франкфурт-на-Майне, Германия. Altenhöferallee 3, Frankfurt am Main, 60438, Germany sushko@mbnexplorer.com ORCID: 0000-0003-3591-7276

ИВАНОВ Вадим Константинович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 ivanov@physics.spbstu.ru ORCID: 0000-0002-3584-4583

СОЛОВЬЕВ Андрей Владимирович — доктор физико-математических наук, профессор, научный и исполнительный директор Научно-исследовательского центра мезобионаносистем (MBN), г. Франкфурт-на-Майне, Германия.

Altenhöferallee 3, Frankfurt am Main, 60438, Germany solovyov@mbnresearch.com ORCID: 0000-0003-1602-6144

THE AUTHORS

HAURYLAVETS Viktor V.

Institute for Nuclear Problems of Belarusian State University 11 Bobruiskaya St., Minsk, 220006, Belarus bycel@tut.by ORCID: 0000-0002-9452-7465

KOROL Andrei V.

MBN Research Center at Frankfurt Innovation Center of Biotechnology Altenhöferallee 3, 60438 Frankfurt am Main, Germany korol@mbnexplorer.com

SUSHKO Gennady B.

MBN Research Center at Frankfurt Innovation Center of Biotechnology Altenhöferallee 3, 60438 Frankfurt am Main, Germany sushko@mbnexplorer.com ORCID: 0000-0003-3591-7276

IVANOV Vadim K.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia ivanov@physics.spbstu.ru ORCID: 0000-0002-3584-4583

SOLOV'YOV Andrey V.

MBN Research Center at Frankfurt Innovation Center of Biotechnology Altenhöferallee 3, 60438 Frankfurt am Main, Germany solovyov@mbnresearch.com ORCID: 0000-0003-1602-6144

Статья поступила в редакцию 19.10.2022. Одобрена после рецензирования 13.01.2023. Принята 13.01.2023. Received 19.10.2022. Approved after reviewing 13.01.2023. Accepted 13.01.2023. Научная статья УДК 539.312: 004.942 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16105

СВОБОДНЫЕ КОЛЕБАНИЯ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ПЛАСТИНЫ С ЗАЩЕМЛЕННЫМИ ПРОТИВОПОЛОЖНЫМИ КРАЯМИ (СFCF-ПЛАСТИНА)

М. В. Сухотерин¹ [⊠], В. В. Лалин², Л. Н. Кондратьева³, С. О. Барышников¹, И. В. Войтко¹

 ¹ Государственный университет морского и речного флота имени адмирала С. О. Макарова, Санкт-Петербург, Россия;
 ² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия;

³ Санкт-Петербургский государственный архитектурно-строительный университет,

Санкт-Петербург, Россия [⊠] sukhoterinmv@gumrf.ru

Аннотация. В работе предложен итерационный метод отыскания собственных частот симметричных колебаний для прямоугольной CFCF-пластины с помощью двух гиперболо-тригонометрических рядов по двум координатам. При этом получена разрешающая однородная бесконечная система линейных алгебраических уравнений, которая содержит в качестве параметра искомую собственную частоту. Вместо вывода и решения частотного уравнения предложено использовать метод перебора значений частоты («метод стрельбы») в сочетании с методом последовательных приближений. Численные результаты получены для первых трех симметричных собственных форм. Исследовано влияние на точность результатов количества членов рядов и числа итераций. Проведено сравнение с результатами других авторов и опубликованными экспериментальными данными.

Ключевые слова: прямоугольная CFCF-пластина, колебания, собственная частота, гиперболо-тригонометрический ряд, итерационный процесс

Для цитирования: Сухотерин М. В., Лалин В. В., Кондратьева Л. Н., Барышников С. О., Войтко И. В. Свободные колебания прямоугольной пластины с защемленными противоположными краями (CFCF-пластина) // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 1. С. 51–64. DOI: https://doi. org/10.18721/ JPM.16105

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии СС BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article

DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16105

FREE VIBRATIONS OF A RECTANGULAR PLATE WITH CLAMPED OPPOSITE EDGES (A CFCF-PLATE) M. V. Sukhoterin¹ [⊠], V. V. Lalin², L. N. Kondratjeva³, S. O. Baryshnikov¹, I. V. Voytko¹

¹ Admiral Makarov State University of Maritime and Inland Shipping, St. Petersburg, Russia;

² Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

³ St. Petersburg State University of Architecture and Civil Engineering, St. Petersburg, Russia;

[⊠] sukhoterinmv@gumrf.ru

© Сухотерин М. В., Лалин В. В., Кондратьева Л. Н., Барышников С. О., Войтко И. В., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого. Abstract. The paper proposes an iterative method for finding the natural frequencies of symmetric oscillations for a rectangular CFCF plate using two hyperbolic-trigonometric series in two coordinates. In this case, a resolving homogeneous infinite system of linear equations which contains the desired natural frequency as a parameter has been obtained. Instead of deriving and solving the frequency equation, it was proposed to use the sequential search for the desired frequency values (the "shooting method") in combination with the method of successive approximations. Numerical results were found for the first three symmetric eigenforms. The influence of the number of series terms and the number of iterations on the accuracy of the results was investigated. The obtained results were compared with those of other authors and the published experimental data.

Keywords: rectangular CFCF-plate, oscillations, natural frequency, hyperbolic-trigonometric series, iterative process

For citation: Sukhoterin M. V., Lalin V. V., Kondratjeva L. N., Baryshnikov S. O., Voytko I. V., Free vibrations of a rectangular plate with clamped opposite edges (a CFCF-plate), St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1) (2023) 51–64. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16105

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons. org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Прямоугольные пластины с двумя защемленными (clamped) противоположными краями и остальными двумя свободными (free), называемые для краткости «CFCF-пластины», находят широкое применение в различных областях промышленности и в нанотехнике.

Важной составляющей расчетов пластин на прочность является учет их возможных поперечных колебаний в процессе эксплуатации, что предполагает, прежде всего, определение спектра их собственных частот. Эти сведения необходимы для определения динамических напряжений, вызываемых переменной внешней нагрузкой. Внешние воздействия (возбуждения) на пластину могут носить периодический характер с различной частотой. В случае совпадения частоты возбуждения с собственной частотой колебаний пластины наступает, как известно, явление резонанса, которое может привести к ее разрушению за короткое время. При изменяющейся частоте возбуждения важно знать не только частоту первого (основного) тона свободных колебаний, но и частоты нескольких последующих обертонов, при которых также может последовать резонанс.

Точное решение задачи свободных колебаний прямоугольной пластины получено лишь для шарнирно-опертой пластины (SSSS-пластина) [1] и пластины, две параллельные грани которой свободно опираются, а две другие защемлены или свободны (SCSC- и SFSF-пластины). Здесь в общепринятых английских обозначениях S (supported) — шарнирноопертый край (остальные обозначения уже указаны выше). Известные приближенные решения [2 – 12] для рассматриваемой здесь CFCF-пластины требуют анализа точности полученных численных результатов.

В работах [2 – 5, 8, 9] для решения задачи применялся метод Ритца (Рэлея – Ритца) и его различные модификации. Американский ученый А. У. Лейсса [2] искомую функцию прогибов представлял в виде 36 слагаемых: комбинаций тригонометрических и гиперболических функций. Л. Монтеруббио и С. Иланко [3] применяли метод Рэлея – Ритца в сочетании с методом штрафных функций. Решение содержало до 40 слагаемых, представляющих собой комбинации полиномов низкого порядка и тригонометрических функций. Ю. Нарита и М. Иннами [4, 5] использовали полиномы для различных вариантов граничных условий в сочетании с теорией Полиа. В работе К. Лю и Дж. Банерджи [6] в аналитическом методе спектральной динамической жесткости использовались два типа одномерных модифицированных рядов Фурье для случаев плоских напряжений и плоских деформаций. Г. Ван и Н. Уэрли [7] применяли вариационный метод Канторовича – Крылова. Искомая функция прогибов выбиралась в виде линейной комбинации тригонометрических функции. К. Лью и др. [8] разработали

© Sukhoterin M. V., Lalin V. V., Kondratjeva L. N., Baryshnikov S. O., Voytko I. V., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

эффективный в вычислительном отношении метод функции ортогональной пластины в процедуре Рэлея — Ритца. Функция ортогональной пластины строится с использованием соотношения ортогональности Грама — Шмидта. Т. Мидзусава [9] строил решение с помощью В-сплайнов.

С. Кширсагар и К. Бхаскар [10] применяли разновидность метода суперпозиции с решением в тригонометрических рядах. В работе М. Айзенбергера и А. Дойча [11] использовались особые комбинации тригонометрических и гиперболических функций синуса и косинуса. Утверждается, что они дают точное решение задачи для многих вариантов граничных условий. Р. Ли и др. [12] предложили новый симплектический метод суперпозиции (модификация метода Эйлера при решении уравнений Гамильтона) для решения задачи колебаний прямоугольных пластин.

В работе Р. Сингала и др. [13] проведены экспериментальные исследования для получения собственных частот колебаний прямоугольных пластин с различными вариантами граничных условий.

В работах [2 – 13] приводятся найденные собственные частоты колебаний прямоугольных пластин, имеющих шарнирно-опертые, защемленные и свободные края в различных комбинациях. Из этих результатов в таблице помещены первые две частоты симметричного решения для CFCF-пластины для сравнения с полученными в настоящей работе.

Используемый в настоящей статье метод перебора частотного параметра в сочетании с итерационным процессом получения ненулевых решений бесконечной однородной системы линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов гиперболо-тригонометрических рядов успешно применялся авторами для решения ряда задач колебаний и устойчивости прямоугольных пластин [14, 15].

Постановка задачи

Рассмотрим прямоугольную пластину постоянной толщины *h* с размерами $a \times b$ в плане. Поместим начало прямоугольной системы координат *XOY* в центр пластины. Оси координат проведем параллельно ее краям. Пусть края $x = \pm a/2$ защемлены, а края $y = \pm b/2$ свободны. При переходе к безразмерным координатам x = X/b, y = Y/b размеры пластины будут $\gamma \times 1$, где $\gamma = a/b$ – отношение сторон пластины (рис. 1).



Рис. 1. Схема к постановке задачи: СFCF-пластина размером $a \times b \times h$, или $\gamma \times 1 \times h$, где $\gamma = a/b$

Начальные условия задачи в общем случае имеют вид (начальное поле перемещений и скоростей):

$$W\big|_{t=0} = W_0(X,Y), \quad \frac{\partial W}{\partial t}\big|_{t=0} = V_0(X,Y), \quad (1)$$

где W_0 — начальный прогиб точек срединной поверхности пластины, V_0 — их начальные скорости в направлении нормалей, t — время.

Часто в начальных условиях задается нулевое поле скоростей (например, действует стационарная равномерная поперечная нагрузка, которая затем мгновенно снимается). Далее пластина совершает поперечные колебания. Если отсутствуют силы сопротивления и возмущения, то колебания будут свободными незатухающими (собственные колебания).

Дифференциальное уравнение собственных колебаний пластины имеет вид [1]:

$$D\nabla^2 \nabla^2 W + \rho h \frac{\partial^2 W}{\partial t^2} = 0, \qquad (2)$$

где D – цилиндрическая жесткость пластины, $D = \frac{Eh^3}{12(1-v^2)}$ (E – модуль Юнга, v –

коэффициент Пуассона); ρ – плотность вещества пластины; $\nabla^2 \nabla^2$ – бигармонический оператор, $\nabla^2 \nabla^2 = \frac{\partial^4}{\partial X^4} + 2 \frac{\partial^4}{\partial X^2 \partial Y^2} + \frac{\partial^4}{\partial Y^4}$.

В безразмерных координатах уравнение (2) перепишется следующим образом:

$$\nabla^4 W + \eta^2 \frac{\partial^2 W}{\partial t^2} = 0, \tag{3}$$

где $\eta^2 = \frac{\rho h b^4}{D}, \ \nabla^4 = \frac{\partial^4}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4}{\partial y^4}.$

Относительные размеры пластины лежат в интервалах

$$-\gamma / 2 \le x \le \gamma / 2, -1 / 2 \le y \le 1 / 2.$$

Граничные условия на защемленных краях $x = \pm \gamma/2$ имеют вид

$$W = 0, \quad \frac{\partial W}{\partial x} = 0, \tag{4}$$

а на свободных краях $y = \pm 1/2$ имеют следующий вид:

$$M_{y} = \frac{\partial^{2} W}{\partial y^{2}} + \nu \frac{\partial^{2} W}{\partial x^{2}} = 0, \quad V_{y} = \frac{\partial^{3} W}{\partial y^{3}} + (2 - \nu) \frac{\partial^{3} W}{\partial x^{2} \partial y} = 0.$$
(5)

Задача состоит в определении функции прогибов W(x, y, t), удовлетворяющей дифференциальному уравнению (3), начальным (1) и граничным ((4), (5)) условиям.

Построение решения

Согласно методу Фурье, искомую функцию прогибов представим в виде произведения двух функций: от времени и от координат срединной поверхности:

$$W(x, y, t) = w^{*}(t)w(x, y),$$
 (6)

Для функции координат граничные условия будут аналогичными условиям (4), (5), а именно —

для
$$x = \pm \gamma / 2$$
: $w = 0$, $\partial w / \partial x = 0$, (7)

для
$$y = \pm 1/2$$
: $M_y = \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + v \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = 0$, $V_y = \frac{\partial^3 w}{\partial y^3} + (2 - v) \frac{\partial^3 w}{\partial x^2 \partial y} = 0.$ (8)

Функция времени представляется в следующем виде [1]:

$$w'(t) = c_1 \cos pt + c_2 \sin pt,$$
 (9)

где p – искомая частота колебаний пластины; c_1, c_2 – произвольные постоянные, которые определяются из начальных условий (1).

Подставляя выражение (9) в формулу (6), а затем (6) в уравнение (3), получим дифференциальное уравнение, которому должна удовлетворять координатная функция прогибов:

$$\nabla^2 \nabla^2 w(x, y) - p^2 \eta^2 w(x, y) = 0.$$
(10)

Обозначим относительную частоту собственных колебаний через $\Omega = p\eta$. Тогда уравнение (10) примет вид

$$\nabla^2 \nabla^2 w(x, y) - \Omega^2 w(x, y) = 0.$$
⁽¹¹⁾

Симметричное решение (SS-форма). Функцию w(x, y) будем разыскивать в виде суммы двух рядов:

$$w(x, y) = w_{1}(x, y) + w_{2}(x, y) =$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k} A_{k} \operatorname{ch}(\beta_{k} x) \cos(\lambda_{k} y) + \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^{\tilde{s}} C_{s} \operatorname{ch}(\xi_{s} y) \cos(\mu_{s} x).$$
(12)

Здесь коэффициенты A_k , β_k , C_s , ξ_s подлежат определению; $\lambda_k = 2\pi k$, $\mu_s = \pi s/\gamma$, $\tilde{s} = (s+1)/2$. Первая форма колебаний должна быть симметричной (точнее, симметрично-симметричной (SS)), ввиду соответствия форме изогнутой поверхности под действием равномерной поперечной нагрузки (этим объясняется выбор четных координатных функций).

Другие формы колебаний – антисимметричные (АА) и смешанные (АS и SA) получаются при соответствующих сочетаниях четных и нечетных слагаемых. Это означает, что, помимо представления (12), следует рассмотреть в дальнейшем и три перечисленных случая.

Таким образом, функция (12) позволит найти только симметричные собственные частоты, в том числе основную частоту.

Потребуем, чтобы обе функции удовлетворяли дифференциальному уравнению (11); тогда для определения коэффициентов β_k и ξ_s получим уравнения

$$\left(\beta_k^2-\lambda_k^2\right)^2=\Omega^2, \quad \left(\xi_s^2-\mu_s^2\right)^2=\Omega^2;$$

отсюда находим пары корней, зависящих от неизвестной частоты *p*:

$$\beta_k = \sqrt{\lambda_k^2 + \Omega}, \quad \overline{\beta}_k = \sqrt{\lambda_k^2 - \Omega}, \tag{13}$$

$$\xi_s = \sqrt{\mu_s^2 + \Omega}, \quad \overline{\xi}_s = \sqrt{\mu_s^2 - \Omega}. \tag{14}$$

С учетом полученных выражений, функции, входящие в выражение (12), перепишутся в следующем виде:

$$w_{1}(x, y) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k} \left(A_{k} \operatorname{ch}(\beta_{k} x) + B_{k} \operatorname{ch}(\overline{\beta}_{k} x) \right) \cos(\lambda_{k} y).$$

$$w_{2}(x, y) = \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^{s} \left(C_{s} \operatorname{ch}(\xi_{s} y) + D_{s} \operatorname{ch}(\overline{\xi}_{s} y) \right) \cos(\mu_{s} x).$$
(15)

Заметим, что функция $w_{2}(x, y)$ удовлетворяет условию отсутствия прогибов на гранях $x = \pm \gamma/2$. Потребуем, чтобы и функция $w_1(x, y)$ имела нулевые прогибы на этих гранях. Тогда должно выполняться равенство

$$A_k \operatorname{ch} \frac{\beta_k \gamma}{2} + B_k \operatorname{ch} \frac{\overline{\beta}_k \gamma}{2} = 0, \qquad (16)$$

и коэффициенты B_k можно выразить через коэффициенты A_k :

$$B_{k} = -A_{k} \frac{\mathrm{ch}\overline{\beta}_{k}^{*}}{\mathrm{ch}\overline{\beta}_{k}^{*}},\tag{17}$$

где $\beta_k^* = \beta_k \gamma / 2$, $\overline{\beta}_k^* = \overline{\beta}_k \gamma / 2$. Функция $w_1(x, y)$, в свою очередь, удовлетворяет условию отсутствия перерезывающих сил на гранях $y = \pm 1/2$. Потребуем, чтобы и функция $w_2(x, y)$ также удовлетворяла этому условию. Тогда, опуская знак суммирования, получим:

$$C_{s}\xi_{s}\left[\xi_{s}^{2}-(2-\nu)\mu_{s}^{2}\right]\mathrm{sh}\xi_{s}^{*}+D_{s}\overline{\xi}_{s}\left[\overline{\xi}_{s}^{2}-(2-\nu)\mu_{s}^{2}\right]\mathrm{sh}\overline{\xi}_{s}^{*}=0,$$
(18)

где $\xi_s^* = \xi_s / 2, \ \overline{\xi}_s^* = \overline{\xi}_s / 2.$ Откуда

$$D_{s} = -\frac{\xi_{s} \left[\xi_{s}^{2} - (2 - \nu)\mu_{s}^{2}\right] \mathrm{sh}\xi_{s}^{*}}{\overline{\xi}_{s} \left[\overline{\xi}_{s}^{2} - (2 - \nu)\mu_{s}^{2}\right] \mathrm{sh}\overline{\xi}_{s}^{*}} C_{s}.$$
(19)

55

Итак, искомая функция прогибов (12) примет вид:

$$w(x, y) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k} A_{k} \left[\operatorname{ch}(\beta_{k} x) - \frac{\operatorname{ch}\beta_{k}^{*}}{\operatorname{ch}\overline{\beta}_{k}^{*}} \operatorname{ch}(\overline{\beta}_{k} x) \right] \operatorname{cos}(\lambda_{k} y) + \\ + \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^{s} C_{s} \left\{ \operatorname{ch}(\xi_{s} y) - \frac{\xi_{s} \left[\xi_{s}^{2} - (2 - \nu)\mu_{s}^{2} \right] \operatorname{sh}\xi_{s}^{*}}{\overline{\xi_{s}} \left[\overline{\xi_{s}^{2}} - (2 - \nu)\mu_{s}^{2} \right] \operatorname{sh}\overline{\xi_{s}}^{*}} \operatorname{ch}(\overline{\xi}_{s} y) \right\} \operatorname{cos}(\mu_{s} x).$$

$$(20)$$

Эта функция теперь содержит лишь две последовательности неизвестных коэффициентов: A_k и C_s .

Потребуем, чтобы функция прогибов (20) удовлетворяла двум оставшимся граничным условиям (второе условие (7) и первое условие (8)). Тогда для углов поворота заделанных краев и изгибающих моментов на свободных краях получаем два уравнения:

$$\sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k} A_{k} \operatorname{ch} \beta_{k}^{*} \left(\beta_{k} \operatorname{th} \beta_{k}^{*} - \overline{\beta}_{k} \operatorname{th} \overline{\beta}_{k}^{*} \right) \operatorname{cos}(\lambda_{k} y) + \\ + \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} \mu_{s} C_{s} \left\{ \operatorname{ch}(\xi_{s} y) - \frac{\xi_{s} \left[\xi_{s}^{2} - (2 - \nu) \mu_{s}^{2} \right] \operatorname{sh} \xi_{s}^{*}}{\overline{\xi}_{s}^{2} - (2 - \nu) \mu_{s}^{2}} \right] \operatorname{sh} \overline{\xi}_{s}^{*}} \operatorname{ch}(\overline{\xi}_{s} y) \right\} = 0,$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} A_{k} \left[\left(\nu \beta_{k}^{2} - \lambda_{k}^{2} \right) \operatorname{ch}(\beta_{k} x) - \left(\nu \overline{\beta}_{k}^{2} - \lambda_{k}^{2} \right) \frac{\operatorname{ch} \beta_{k}^{*}}{\operatorname{ch} \overline{\beta}_{k}^{*}} \operatorname{ch}(\overline{\beta}_{k} x) \right] + \\ + \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^{s} C_{s} \operatorname{ch} \xi_{s}^{*} \left\{ \left(\xi_{s}^{2} - \nu \mu_{s}^{2} \right) - \frac{\xi_{s} \left[\xi_{s}^{2} - (2 - \nu) \mu_{s}^{2} \right]}{\overline{\xi}_{s} \left[\overline{\xi}_{s}^{2} - (2 - \nu) \mu_{s}^{2} \right]} \left(\overline{\xi}_{s}^{2} - \nu \mu_{s}^{2} \right) \operatorname{th} \xi_{s}^{*} \operatorname{ch} \overline{\xi}_{s}^{*} \right\} \operatorname{cos}(\mu_{s} x) = 0.$$

$$(21)$$

Для упрощения системы (21) необходимо в первом уравнении (во втором ряду) разложить гиперболические функции в ряды Фурье по $\cos(\lambda_k y)$, а во втором уравнении (в первом ряду) — по $\cos(\mu_k x)$.

Воспользуемся известными разложениями [15]:

$$ch(\xi_{s}y) = \frac{2}{\xi_{s}} sh\xi_{s}^{*} + 4\xi_{s} sh\xi_{s}^{*} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k} \frac{\cos(\lambda_{k}y)}{\xi_{s}^{2} + \lambda_{k}^{2}},$$

$$ch(\overline{\xi}_{s}y) = \frac{2}{\overline{\xi}_{s}} sh\overline{\xi}_{s}^{*} + 4\overline{\xi}_{s} sh\overline{\xi}_{s}^{*} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k} \frac{\cos(\lambda_{k}y)}{\overline{\xi}_{s}^{2} + \lambda_{k}^{2}},$$

$$ch(\beta_{k}x) = -\frac{4}{\gamma} ch\beta_{k}^{*} \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^{\tilde{s}} \frac{\mu_{s} \cos(\mu_{s}x)}{\beta_{k}^{2} + \mu_{s}^{2}},$$

$$ch(\overline{\beta}_{k}x) = -\frac{4}{\gamma} ch\overline{\beta}_{k}^{*} \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^{\tilde{s}} \frac{\mu_{s} \cos(\mu_{s}x)}{\overline{\beta}_{k}^{2} + \mu_{s}^{2}}.$$
(22)

Первые два разложения в системе (22) имеют свободные члены, поэтому при подстановке их в первое уравнение (21) также появится свободный член, который мы обозначим как

$$G = 2 \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} \frac{\mu_s}{\xi_s} \operatorname{sh} \xi_s^* \left\{ 1 - \frac{\xi_s^2 \left[\xi_s^2 - (2 - \nu) \mu_s^2 \right]}{\overline{\xi}_s^2 \left[\overline{\xi}_s^2 - (2 - \nu) \mu_s^2 \right]} \right\} C_s.$$
(23)

Чтобы компенсировать эту часть углов поворота заделанных краев, добавим к функции (20) дополнительный прогиб:

$$w_0(x) = R_1 \operatorname{ch}(\omega x) + R_2 \cos(\omega x), \qquad (24)$$

где R_1, R_2, ω — неопределенные коэффициенты.

Математическое моделирование физических процессов

Подчиним функцию (24) основному уравнению задачи (11). Тогда получим. что $\omega = \sqrt{\Omega}$. Потребуем выполнения граничных условий на защемленных гранях с учетом свободного члена (23):

$$R_1 \operatorname{ch} \omega_* + R_2 \cos \omega_* = 0,$$

$$\omega(R_1 \operatorname{sh} \omega_* - R_2 \sin \omega_*) = -G.$$
(25)

Отсюда

$$R_1 = -\frac{G}{\omega} \frac{1}{\operatorname{ch}\omega_*(\operatorname{th}\omega_* + \operatorname{tg}\omega_*)}, \quad R_2 = \frac{G}{\omega} \frac{1}{\operatorname{cos}\omega_*(\operatorname{th}\omega_* + \operatorname{tg}\omega_*)}, \quad (26)$$

где $\omega^* = \omega \gamma/2$.

Теперь первое уравнение (21) (уже без свободных членов) примет следующий вид:

$$\sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k} A_{k} \operatorname{ch} \beta_{k}^{*} \left(\beta_{k} \operatorname{th} \beta_{k}^{*} - \overline{\beta}_{k} \operatorname{th} \overline{\beta}_{k}^{*} \right) \operatorname{cos}(\lambda_{k} y) + \\ + \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} \mu_{s} C_{s} \left\{ \begin{aligned} 4\xi_{s} s \operatorname{h} \xi_{s}^{*} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k} \frac{\operatorname{cos}(\lambda_{k} y)}{\xi_{s}^{2} + \lambda_{k}^{2}} - \\ - \frac{\xi_{s} \left[\xi_{s}^{2} - (2 - \nu) \mu_{s}^{2} \right] \operatorname{sh} \xi_{s}^{*}}{\overline{\xi}_{s} \left[\overline{\xi}_{s}^{2} - (2 - \nu) \mu_{s}^{2} \right] \operatorname{sh} \overline{\xi}_{s}^{*}} 4\overline{\xi}_{s} \operatorname{sh} \overline{\xi}_{s}^{*} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k} \frac{\operatorname{cos}(\lambda_{k} y)}{\overline{\xi}_{s}^{2} + \lambda_{k}^{2}} \right\} = 0. \end{aligned}$$

$$(27)$$

Переставляя знаки суммирования по индексам k и s и освобождаясь затем от знака суммирования по индексу k во всем выражении, получим, что

$$\operatorname{ch}\beta_{k}^{*}\left(\beta_{k}\operatorname{th}\beta_{k}^{*}-\overline{\beta}_{k}\operatorname{th}\overline{\beta}_{k}^{*}\right)A_{k}+$$

$$+4\sum_{s=1,3,\dots}^{\infty}\mu_{s}\xi_{s}\left\{\frac{1}{\xi_{s}^{2}+\lambda_{k}^{2}}-\frac{\left[\xi_{s}^{2}-(2-\nu)\mu_{s}^{2}\right]}{\left[\overline{\xi}_{s}^{2}-(2-\nu)\mu_{s}^{2}\right]}\frac{1}{\overline{\xi}_{s}^{2}+\lambda_{k}^{2}}\right\}C_{s}\operatorname{sh}\xi_{s}^{*}=0.$$

$$(28)$$

Функция (24) нарушает первое граничное условие (8) по изгибающему моменту на краях $y = \pm 1/2$:

$$M_{y0} = v\omega^2 \left[R_1 \operatorname{ch}(\omega x) - R_2 \cos(\omega x) \right].$$
⁽²⁹⁾

Разложим эту невязку в ряд Фурье по cos($\mu_{e}x$). Воспользуемся известными формулами

$$ch(\omega x) = -\frac{4}{\gamma} ch \,\omega_* \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} \frac{(-1)^{\tilde{s}} \mu_s \cos(\mu_s x)}{\mu_s^2 + \omega^2},$$

$$cos(\omega x) = -\frac{4}{\gamma} cos \,\omega_* \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} \frac{(-1)^{\tilde{s}} \mu_s \cos(\mu_s x)}{\mu_s^2 - \omega^2}.$$
(30)

Тогда

$$M_{y0} = -\frac{4\nu\omega^2}{\gamma} \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^{\tilde{s}} \mu_s \left(R_1 \frac{\operatorname{ch} \omega_*}{\mu_s^2 + \omega^2} - R_2 \frac{\cos\omega_*}{\mu_s^2 - \omega^2} \right) =$$

$$= -G \frac{8\nu}{\gamma} \frac{\omega}{\operatorname{th} \omega_* + \operatorname{tg} \omega_*} \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} \frac{(-1)^{\tilde{s}} \mu_s^3}{\mu_s^4 - \omega^4} \cos(\mu_s x).$$
(31)

Подставим теперь два последних разложения (22) во второе уравнение (21) и добавим невязку (31) от w_0 :

$$-G\frac{8\nu}{\gamma}\frac{\omega}{\mathrm{th}\omega_{*}+\mathrm{tg}\omega_{*}}\sum_{s=1,3,\dots}^{\infty}\frac{(-1)^{\tilde{s}}\mu_{s}^{3}}{\mu_{s}^{4}-\omega^{4}}\cos(\mu_{s}x) + \\ +\frac{4}{\gamma}\sum_{k=1}^{\infty}A_{k}\mathrm{ch}\beta_{k}^{*}\left[-\left(\nu\beta_{k}^{2}-\lambda_{k}^{2}\right)\sum_{s=1,3,\dots}^{\infty}\left(-1\right)^{\tilde{s}}\frac{\mu_{s}\cos(\mu_{s}x)}{\beta_{k}^{2}+\mu_{s}^{2}}+\right] + \\ +\left(\nu\overline{\beta}_{k}^{2}-\lambda_{k}^{2}\right)\sum_{s=1,3,\dots}^{\infty}\left(-1\right)^{\tilde{s}}\frac{\mu_{s}\cos(\mu_{s}x)}{\overline{\beta}_{k}^{2}+\mu_{s}^{2}}\right] + \\ +\sum_{s=1,3,\dots}^{\infty}\left(-1\right)^{\tilde{s}}C_{s}\mathrm{ch}\xi_{s}^{*}\left\{\frac{\left(\xi_{s}^{2}-\nu\mu_{s}^{2}\right)-}{\frac{\xi_{s}\left[\xi_{s}^{2}-(2-\nu)\mu_{s}^{2}\right]}{\overline{\xi}_{s}\left[\overline{\xi}_{s}^{2}-(2-\nu)\mu_{s}^{2}\right]}\left(\overline{\xi}_{s}^{2}-\nu\mu_{s}^{2}\right)\mathrm{th}\xi_{s}^{*}\mathrm{cth}\overline{\xi}_{s}^{*}\right\}}\cos(\mu_{s}x)=0.$$

Аналогично выкладкам, представленным выше, переставим знаки суммирования и освободимся затем от знака внешней суммы. Получим:

$$-G\frac{8\nu}{\gamma}\frac{\omega}{\mathrm{th}\omega_{*}+\mathrm{t}g\omega_{*}}\frac{\mu_{s}^{3}}{\mu_{s}^{4}-\omega^{4}}+\frac{4\mu_{s}}{\gamma}\sum_{k=1}^{\infty}A_{k}\mathrm{ch}\beta_{k}^{*}\left(-\frac{\nu\beta_{k}^{2}-\lambda_{k}^{2}}{\beta_{k}^{2}+\mu_{s}^{2}}+\frac{\nu\overline{\beta}_{k}^{2}-\lambda_{k}^{2}}{\overline{\beta}_{k}^{2}+\mu_{s}^{2}}\right)+$$
$$+C_{s}\mathrm{ch}\xi_{s}^{*}\left\{\left(\xi_{s}^{2}-\nu\mu_{s}^{2}\right)-\frac{\xi_{s}\left[\xi_{s}^{2}-(2-\nu)\mu_{s}^{2}\right]}{\overline{\xi}_{s}\left[\overline{\xi}_{s}^{2}-(2-\nu)\mu_{s}^{2}\right]}\left(\overline{\xi}_{s}^{2}-\nu\mu_{s}^{2}\right)\mathrm{th}\xi_{s}^{*}\mathrm{cth}\overline{\xi}_{s}^{*}\right\}=0.$$
$$(33)$$

Из уравнения (28) следует, что

$$A_{k}^{*} = -4 \frac{\sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} \mu_{s} \xi_{s} \left\{ \frac{1}{\xi_{s}^{2} + \lambda_{k}^{2}} - \frac{\left\lfloor \xi_{s}^{2} - (2 - \nu) \mu_{s}^{2} \right\rfloor}{\left\lfloor \overline{\xi}_{s}^{2} - (2 - \nu) \mu_{s}^{2} \right\rfloor} \frac{1}{\overline{\xi}_{s}^{2} + \lambda_{k}^{2}} \right\} C_{s}^{*}}{\beta_{k} \text{th} \beta_{k}^{*} - \overline{\beta}_{k} \text{th} \overline{\beta}_{k}^{*}},$$
(34)

где введены обозначения $A_k^* = A_k ch\beta_k^*$, $C_s^* = C_s sh\xi_s^*$. Из уравнения (33) следует, что

$$C_{s}^{*} = \frac{G\frac{8\nu}{\gamma}\frac{\omega}{\mathrm{th}\omega_{*} + \mathrm{tg}\omega_{*}}\frac{\mu_{s}^{3}}{\mu_{s}^{4} - \omega^{4}} - \frac{4\mu_{s}}{\gamma}\sum_{k=1}^{\infty}A_{k}^{*}\left(-\frac{\nu\beta_{k}^{2} - \lambda_{k}^{2}}{\beta_{k}^{2} + \mu_{s}^{2}} + \frac{\nu\overline{\beta}_{k}^{2} - \lambda_{k}^{2}}{\overline{\beta}_{k}^{2} + \mu_{s}^{2}}\right)}{\mathrm{cth}\xi_{s}^{*}\left\{\left(\xi_{s}^{2} - \nu\mu_{s}^{2}\right) - \frac{\xi_{s}\left[\xi_{s}^{2} - (2 - \nu)\mu_{s}^{2}\right]}{\overline{\xi}_{s}\left[\overline{\xi}_{s}^{2} - (2 - \nu)\mu_{s}^{2}\right]}\left(\overline{\xi}_{s}^{2} - \nu\mu_{s}^{2}\right)\mathrm{th}\xi_{s}^{*}\mathrm{cth}\overline{\xi}_{s}^{*}\right\}},$$
(35)

и тогда выражение (23) примет вид

$$G = 2 \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} \frac{\mu_s}{\xi_s} C_s^* \left\{ 1 - \frac{\xi_s^2 \left[\xi_s^2 - (2 - \nu) \mu_s^2 \right]}{\overline{\xi}_s^2 \left[\overline{\xi}_s^2 - (2 - \nu) \mu_s^2 \right]} \right\}.$$
 (36)

Если подставить в выражение (35) коэффициенты A_k^* из формулы (34) и величину G из формулы (36), то выражение (35) будет представлять собой бесконечную однородную систему линейных алгебраических уравнений относительно одной последовательности коэффициентов C_s^* , которая содержит в качестве параметра искомую частоту собственных колебаний Ω . Бесконечное множество этих частот можно найти из условия равенства нулю определителя системы (35) и решения соответствующего частотного уравнения.

Данная задача весьма сложна. Для ее решения предлагаем использовать итерационный процесс вычисления коэффициентов C_s^* для отыскания собственной частоты методом перебора этого параметра. Коэффициенты C_s^* в левой части системы (35) можно считать последующей итерацией, а те же коэффициенты под знаком суммы в правой части –

предыдущей итерацией. Для начальной итерации все коэффициенты C_{s0}^* можно положить равными единице или членам произвольной убывающей последовательности, например $C_{s0}^* = 1/\mu_s^2$.

Вычисляя правые части уравнений системы (35), получим коэффициенты C_{s1}^* первой итерации, которые затем подставим в правые части, и процесс повторяется. Коэффициенты выводятся на печать на каждой итерации, и та частота, при которой, начиная с некоторой итерации, соответствующие коэффициенты не отличаются друг от друга и отличны от нуля, является искомой собственной частотой. Численная реализация метода предполагает, что рассматривается редуцированная система (35), число уравнений которой можно менять в широких пределах, так же как и число членов в рядах, сходимость которых анализируется.

Окончательное выражение для функции прогибов пластины запишется следующим образом:

$$w(x,y) = \frac{G}{\omega} \frac{1}{(\mathrm{th}\omega_* + \mathrm{tg}\omega_*)} \left[-\frac{\mathrm{ch}(\omega x)}{\mathrm{ch}\omega_*} + \frac{\mathrm{cos}(\omega x)}{\mathrm{cos}\,\omega_*} \right] + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k A_k^* \left[\frac{\mathrm{ch}(\beta_k x)}{\mathrm{ch}\beta_k^*} - \frac{\mathrm{ch}(\overline{\beta}_k x)}{\mathrm{ch}\overline{\beta}_k^*} \right] \mathrm{cos}(\lambda_k y) +$$

$$\sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^{\tilde{s}} C_s^* \left\{ \frac{\mathrm{ch}(\xi_s y)}{\mathrm{sh}\xi_s^*} - \frac{\xi_s \left[\xi_s^2 - (2-\nu)\mu_s^2 \right] \mathrm{ch}(\overline{\xi}_s y)}{\overline{\xi}_s \left[\overline{\xi}_s^2 - (2-\nu)\mu_s^2 \right] \mathrm{sh}\overline{\xi}_s^*} \right\} \mathrm{cos}(\mu_s x).$$
(37)

Численные результаты и их обсуждение

Для отыскания собственных частот и форм колебаний CFCF-пластины в вычислительной среде Maple нами была составлена программа, в которой можно варьировать отношение сторон пластины γ , коэффициент Пуассона, число членов в рядах и число итераций для достижения заданной точности вычислений. Основным параметром служит частота колебаний, которую перебирали методом «стрельбы» в сочетании с методом последовательных приближений, до нахождения собственной частоты. Критерием принятия назначенной частоты за собственную служила неизменяемость соответствующих коэффициентов рядов во всех итерациях, начиная с некоторой, при условии, что эти коэффициенты отличны от нуля.

В таблице приведены найденные первые три собственные относительные частоты для симметричных форм колебаний квадратной пластины (о третьем значении Ω_7 см. в Примечании 2). Коэффициент Пуассона был принят равным 0,3. Для сравнения представлены экспериментальные данные, а также соответствующие частоты, полученные другими авторами с помощью приближенных методов. Нумерация в таблице собственных частот (1, 3, 7) соответствует их порядковому номеру и учитывает антисимметричные формы (AA) (в таблице не представлены), а также смешанные формы (AS и SA), полученные разными авторами.

Отметим, что в экспериментальных данных статьи [13] фигурируют абсолютные значения собственных частот колебаний пластины с конкретными размерами и свойствами. Эти значения приведены нами к стандартному безразмерному виду и помещены в таблицу. На рис. 2 показаны соответствующие 3D-формы собственных симметричных колебаний.

При отыскании собственных частот, в рядах удерживалось последовательно 25, 35 и 50 слагаемых. Число итераций составляло 20. Значения первой частоты при этом менялись следующим образом:

Дальнейшее увеличение слагаемых в рядах и числа итераций не изменяло последней цифры.

Значения второй частоты:

Значения третьей частоты:

87,4371; 87,4371; 87,4370.

Таблица

Сравнение полученных значений собственных частот симметричных колебаний квадратной CFCF-пластины с литературными данными

Относительная собственная частота		Авторы исследования	
Ω_1	Ω_3	-	
Эксперимент			
22,206	42,840	Р. К. Сингал и др. [13]	
Расчетные результаты			
22,1166	43,5410	Данная статья	
22,272	43,664	А. У. Лейсса [2]	
22,03	43,20	Т. Мидзусава [9]	
22,22	43,91	К. М. Лью и др. [8]	
22,17	43,60	С. Кширсагар и др. [10]	
22,168	43,596	Л. Монтеруббио и др. [3]	

Примечания. 1. $\Omega = p \sqrt{\rho h b^4} / D$, , где p — искомая частота колебаний пластины; ρ — плотность ее вещества; h, b — толщина и сторона квадратной пластины; D — ее цилиндрическая жесткость. 2. Согласно нашим данным, $\Omega_{\gamma} = 87,4370$ (получено впервые).



Рис. 2. Первая (*a*), вторая (*b*) и третья (*c*) SS-формы собственных колебаний CFCF-пластины (значения Ω₁, Ω₃, Ω₇ представлены в таблице)

Представленные данные свидетельствуют о том, что собственные частоты найдены весьма точно.

Сравнение с экспериментальными данными [13] (для двух частот) показывает, что результаты весьма близки, но значение второй частоты в работе [13] несколько ниже, очевидно, ввиду невозможности обеспечить в эксперименте строгую жесткую заделку двух параллельных сторон пластины.

Приближенные вычисления вариационными методами (например, методы Ритца или Канторовича) дают, как правило, завышенные значения искомых параметров, что и наблюдается в данном случае (см. результаты работ [2, 3, 8]). Исключением является статья [9], в которой значения частоты меньше, чем в настоящей работе. Это, скорее всего, результат нижней оценки частот, который проистекает из-за использования В-сплайнов.

Учет начальных условий задачи

Задача о свободных колебаниях прямоугольной CFCF-панели будет решена до конца, если будут найдены произвольные постоянные c_1 и c_2 функции времени (9) из начальных условий (1). Поскольку задача о собственных значениях имеет бесконечное множество корней p_1 , то исходная функция прогибов (6) примет вид:

$$W(x, y, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \left[c_{1i} \cos(p_i t) + c_{2i} \sin(p_i t) \right] w_i(x, y),$$
(38)

где $w_i(x, y)$ — собственные функции задачи вида (37) для собственных чисел p_i .

Отметим, что начальные условия не могут задаваться произвольно. Прежде всего, начальные прогибы $W_0(X, Y)$ и начальные скорости $V_0(X, Y)$ должны быть равными нулю на защемленных краях пластины. Определение (или задание) начальных условий часто представляет собой отдельную проблему.

Наиболее простым является случай, когда начальная форма пластины — это форма ее изогнутой поверхности под действием равномерной поперечной нагрузки. После мгновенного снятия такой нагрузки пластина начинает совершать свободные колебания. Эти начальные условия часто имеют место в процессе эксплуатации конструкции.

Однако это предполагает, что задача изгиба пластины под действием данной стационарной нагрузки решена. Если речь идет о свободно-опертой пластине либо пластине, у которой оперты две параллельные грани, а две другие произвольно закреплены, то решение этой задачи получено в замкнутой форме, и им можно воспользоваться.

Для CFCF-пластины такого замкнутого решения нет. Тогда можно использовать одно из известных приближенных решений соответствующей задачи изгиба CFCF-пластины; обозначим его как $w_{et}(x, y)$.

Если начальные скорости точек пластины равны нулю, то все произвольные постоянные $c_{2i} = 0$ и можно записать равенство

$$\sum_{i=1}^{\infty} c_{1i} w_i(x, y) = w_{si}(x, y).$$
(39)

Для отыскания коэффициентов c_{1i} следует представить координатные функции в левой и правой частях равенства двойными рядами Фурье, что приведет к бесконечной системе линейных алгебраических уравнений относительно указанных коэффициентов.

Таким образом, задача о свободных поперечных колебаниях прямоугольной пластины может быть решена до конца.

При других видах начальных условий алгоритм решения аналогичен.

Заключение

В настоящей работе построен эффективный алгоритм отыскания собственных частот симметричных форм колебаний прямоугольной пластины с двумя защемленными противоположными и двумя остальными свободными параллельными краями. С высокой точностью получены численные значения частот, приведены соответствующие 3D-формы колебаний.

Результаты проведенных исследований можно использовать в проектных организациях при расчетах на резонанс плоских элементов различных конструкций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лехницкий С. Г. Анизотропные пластинки. М.-Л.: ОГИЗ – ГИТТЛ, 1947. 355 с.

2. Leissa A. W. The free vibration of rectangular plates // Journal of Sound and Vibration. 1973. Vol. 31. No. 3. Pp. 257–293.

3. Monterrubio L. E., Ilanko S. Proof of convergence for a set of admissible functions for the Rayleigh – Ritz analysis of beams and plates and shells of rectangular planform // Computers & Structures. 2015. Vol. 147. 15 January. Pp. 236–243.

4. Narita Y. Polya counting theory applied to combination of edge conditions for generally shaped isotropic plates // EPI International Journal of Engineering. 2019. Vol. 2. No. 2. Pp.194–202.

5. Narita Y., Innami M. Identifying all combinations of boundary conditions for in-plane vibration of isotropic and anisotropic rectangular plates // Thin-Walled Structures. 2021. Vol. 164. July. P. 107320.

6. Liu X., Banerjee J. R. A spectral dynamic stiffness method for free vibration analysis of plane elastodynamic problems // Mechanical Systems and Signal Processing. 2017. Vol. 87. Part A. 15 March. Pp. 136–160.

7. Wang G., Wereley N. M. Free in-plane vibration of rectangular plates // AIAA Journal. 2002. Vol. 40. No. 5. Pp. 953–959.

8. Liew K. M., Lam K. Y., Chow S. T. Free vibration analysis of rectangular plates using orthogonal plate function // Computers & Structures. 1990. Vol. 34. No. 1. Pp. 79–85.

9. Mizusawa T. Natural frequencies of rectangular plates with free edges // Journal of Sound and Vibration. 1986. Vol. 105. No. 3. Pp. 451–459.

10. **Kshirsagar S., Bhaskar K.** Accurate and elegant free vibration and buckling studies of orthotropic rectangular plates using untruncated infinite series // Journal of Sound and Vibration. 2008. Vol. 314. No. 3–5. Pp. 837–850.

11. Eisenberger M., Deutsch A. Solution of thin rectangular plate vibrations for all combinations of boundary conditions // Journal of Sound and Vibration. 2019. Vol. 452. 21 July. Pp. 1–12.

12. Li R., Zheng X., Wang P., Wang B., Wu H., Cao Y., Zhu Zh. New analytic free vibration solutions of orthotropic rectangular plates by a novel symplectic approach // Acta Mechanica. 2019. Vol. 230. No. 9. Pp. 3087–3101.

13. Singal R. K., Gorman D. J., Forques S. A. A comprehensive analytical solution for free vibration of rectangular plates with classical edge conditions: Experimental verification // Experimental Mechanics. 1992. Vol. 32. No. 1. Pp. 21–23.

14. Sukhoterin M. V., Baryshnikov S. O., Knysh T. P., Rasputina E. I. Stability of rectangular cantilever plates with high elasticity // E3S Web of Conferences. 2021. Vol. 244. XXII International Scientific Conference Energy Management of Municipal Facilities and Sustainable Energy Technologies (EMMFT-2020). Voronezh, Russia, December 8–10, 2020. P. 04004.

15. Сухотерин М. В., Масленников А. М., Распутина Е. И., Войтко И. В. Сравнительный анализ определения частот собственных колебаний прямоугольных панелей с защемленносвободными краями // Вестник гражданских инженеров. 2022. № 2 (91). С. 45–57.

REFERENCES

1. Lekhnitsky S. G., Anisotropic plates, Gordon & Breach, New York, 1968.

2. Leissa A. W., The free vibration of rectangular plates, J. Sound Vib. 31 (3) (1973) 257–293.

3. Monterrubio L. E., Ilanko S., Proof of convergence for a set of admissible functions for the Rayleigh – Ritz analysis of beams and plates and shells of rectangular planform, Comput. Struct. 147 (15 January) (2015) 236–243.

4. Narita Y., Polya counting theory applied to combination of edge conditions for generally shaped isotropic plates, EPI Int. J. Eng. 2 (2) (2019) 194–202.

5. Narita Y., Innami M., Identifying all combinations of boundary conditions for in-plane vibration of isotropic and anisotropic rectangular plates, Thin-Walled Struct. 164 (July) (2021) 107320.

6. Liu X., Banerjee J. R., A spectral dynamic stiffness method for free vibration analysis of plane elastodynamic problems, Mech. Syst. Signal Process. 87A (15 March) (2017) 136–160.

7. Wang G., Wereley N. M., Free in-plane vibration of rectangular plates, AIAA J. 40 (5) (2002) 953–959.

8. Liew K. M., Lam K. Y., Chow S. T., Free vibration analysis of rectangular plates using orthogonal plate function, Comput. Struct. 34 (1) (1990) 79–85.

9. Mizusawa T., Natural frequencies of rectangular plates with free edges, J. Sound Vib. 105 (3) (1986) 451-459.

10. Kshirsagar S., Bhaskar K., Accurate and elegant free vibration and buckling studies of orthotropic rectangular plates using untruncated infinite series, J. Sound Vib. 314 (3–5) (2008) 837–850.

11. Eisenberger M., Deutsch A., Solution of thin rectangular plate vibrations for all combinations of boundary conditions, J. Sound Vib. 452 (21 July) (2019) 1–12.

12. Li R., Zheng X., Wang P., et al., New analytic free vibration solutions of orthotropic rectangular plates by a novel symplectic approach, Acta Mech. 230 (9) (2019) 3087–3101.

13. Singal R. K., Gorman D. J., Forques S. A., A comprehensive analytical solution for free vibration of rectangular plates with classical edge conditions: Experimental verification, Exp. Mech. 32 (1) (1992) 21–23.

14. Sukhoterin M. V., Baryshnikov S. O., Knysh T. P., Rasputina E. I., Stability of rectangular cantilever plates with high elasticity, E3S Web of Conf. 244 (XXII Int. Sci. Conf. Energy Management of Municipal Facilities & Sustainable Energy Technologies (EMMFT-2020), Voronezh, Russia, December 8–10, 2020) (2021) 04004.

15. Sukhoterin M. V., Maslennikov A. M., Rasputina E. I., Voytko I. V., Comparative analysis of assessing natural vibration frequencies of rectangular panels with freely pinched edges, Bulletin of Civil Engineering. (2 (91)) (2022) 45–57 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СУХОТЕРИН Михаил Васильевич — доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой высшей математики Государственного университета морского и речного флота имени адмирала С. О. Макарова, Санкт-Петербург, Россия.

198135, Россия, г. Санкт-Петербург, Двинская ул., 5/7 sukhoterinmv@gumrf.ru ORCID: 0000-0002-8295-7089

ЛАЛИН Владимир Владимирович — доктор технических наук, профессор Высшей школы промышленно-гражданского и дорожного строительства Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 Lalin_vv@spbstu.ru ORCID: 0000-0003-3850-424X

КОНДРАТЬЕВА Лидия Никитовна — доктор технических наук, профессор кафедры геотехники Санкт-Петербургского государственного архитектурно-строительного университета, Санкт-Петербург, Россия.

190005, Россия, г. Санкт-Петербург, 2-я Красноармейская ул., 4 condratjevaln@yandex.ru ORCID: 0000-0001-6174-5565

БАРЫШНИКОВ Сергей Олегович — доктор технических наук, профессор, ректор Государственного университета морского и речного флота имени адмирала С. О. Макарова, Санкт-Петербург, Россия.

198135, Россия, г. Санкт-Петербург, Двинская ул., 5/7 rector@gumrf.ru ORCID: 0000-0001-6377-5581

ВОЙТКО Ирина Викторовна — кандидат технических наук, доцент кафедры математики Государственного университета морского и речного флота имени адмирала С. О. Макарова, Санкт-Петербург, Россия.

198135, Россия, г. Санкт-Петербург, Двинская ул., 5/7 voytkoiv@gumrf.ru ORCID: 0000-0003-2342-2209

THE AUTHORS

SUKHOTERIN Mikhail V.

Admiral Makarov State University of Maritime and Inland Shipping 5/7 Dvinskaya St., St. Petersburg, 198135, Russia sukhoterinmv@gumrf.ru ORCID: 0000-0002-8295-7089

LALIN Vladimir V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia Lalin vv@spbstu.ru ORCID: 0000-0003-3850-424X

KONDRATJEVA Lidia N.

St. Petersburg State University of Architecture and Civil Engineering 4, 2nd Krasnoarmeiskaya St., St. Petersburg, 190005, Russia condratjevaln@yandex.ru ORCID: 0000-0001-6174-5565

BARYSHNIKOV Sergey O.

Admiral Makarov State University of Maritime and Inland Shipping 5/7 Dvinskaya St., St. Petersburg, 198135, Russia rector@gumrf.ru ORCID: 0000-0001-6377-5581

VOYTKO Irina V.

Admiral Makarov State University of Maritime and Inland Shipping 5/7 Dvinskaya St., St. Petersburg, 198135, Russia voytkoiv@gumrf.ru ORCID: 0000-0003-2342-2209

Статья поступила в редакцию 22.08.2022. Одобрена после рецензирования 23.10.2022. Принята 23.10.2022.

Received 22.08.2022. Approved after reviewing 23.10.2022. Accepted 23.10.2022.

Original article UDC 536.251 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16106

THE TWO-TEMPERATURE EFFECT ON A SEMICONDUCTING THERMOELASTIC SOLID CYLINDER BASED ON THE MODIFIED MOORE – GIBSON – THOMPSON HEAT TRANSFER

I. Kaur ¹[∞], K. Singh ²

¹Government College for Girls (Palwal), Kurukshetra, India;

² Kurukshetra University, Kurukshetra, India

[™] bawahanda@gmail.com

Abstract. This study introduces a new modified Moore – Gibson – Thompson Photo-Thermal (MGTPT) theory with two temperatures for semiconductor material. The photo-thermoelastic effects have been been investigated in an infinitely constrained semiconducting solid cylinder subjected to variable heat flux in the form of an exponential laser pulse. The Laplace transforms were used for the solution of the mathematical model in the transformed domain. The numerical inversion was applied to obtain the displacement components, the conductive temperature, the carrier density, and the thermal stresses in the physical domain. The impact of different theories of thermoelasticity with two temperatures on the displacement, temperature, thermal stresses and carrier density were represented graphically and discussed using Matlab software.

Keywords: semiconducting media, two-temperature effect, modified Moore – Gibson – Thompson heat transfer

For citation: Kaur I., Singh K., The two-temperature effect on a semiconducting thermoelastic solid cylinder based on the modified Moore – Gibson – Thompson heat transfer, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1) (2023) 65–81. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16106

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons. org/licenses/by-nc/4.0/)

Научная статья

УДК 536.251 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16106

ДВУХТЕМПЕРАТУРНЫЙ ПОДХОД К АНАЛИЗУ СВОЙСТВ ПОЛУПРОВОДЯЩЕГО ТЕРМОУПРУГОГО СПЛОШНОГО ЦИЛИНДРА, ОСНОВАННЫЙ НА МОДИФИЦИРОВАННОЙ ТЕОРИИ ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ МУРА – ГИБСОНА – ТОМПСОНА

И. Каур ¹⊠, К. Сингх ²

¹Государственный колледж для девушек (Палвал), г. Курукшетра, Индия;

² Университет Курукшетры, г. Курукшетра, Индия

[™] bawahanda@gmail.com

Аннотация. В работе вводится новая модифицированная двухтемпературная фототермическая теория Мура – Гибсона – Томпсона (MGTPT) для полупроводникового материала. Исследованы фототермоупругие эффекты в полупроводниковом твердом круговом цилиндре бесконечной длины, который подвергается переменному тепловому потоку, образованному экспоненциальным лазерным импульсом. Для решения математической модели в преобразованной области используются преобразования Лапласа. Для определения компонент смещения, температуры проводимости, плотно-

© Kaur I., Singh K., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

сти носителей и тепловых напряжений в физической области применяется численная инверсия. Влияние различных двухтемпературных моделей с термоупругостью на смещение, температуру, тепловые напряжения и плотность носителей представлено графически с помощью программного обеспечения Matlab, и полученные результаты обсуждаются.

Ключевые слова: полупроводниковая среда, двухтемпературная модель, модифицированная модель теплопередачи Мура – Гибсона – Томпсона

Ссылка при цитировании: Каур И., Сингх К. Двухтемпературный подход к анализу свойств полупроводящего термоупругого сплошного цилиндра, основанный на модифицированной теории теплопередачи Мура – Гибсона – Томпсона // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 16. № 1. С. 65–81. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16106

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии СС BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Introduction

In recent years, a lot of attention has been paid to semiconductor materials due to their physical properties. Unlike copper or aluminum, semiconductor materials are not very good conductors at room temperature. At room temperature, they are also not good insulators too, for example, such as glass. The resistance of semiconductor materials gradually decreases with increasing temperature. As a consequence, they provide great electrical conductivity. Because of this property, semiconductor materials become important in modern very large-scale integration logic (VLSI)/electronics/Electrical industries. Under high temperatures, semiconductor materials deform and their physical properties change internally. Two major changes occur as a result of thermal effects: one is thermoelastic deformation and another is electronic deformation. The thermal effect occurs when semiconductor media are exposed to focused laser beams or sunlight beams and, owing to this effect, they will vibrate. These materials have many uses in renewable energy, especially in the solar cells industry which depends heavily on semiconductor materials.

J. M. Duhamel [1] presented the theory of classical uncoupled thermoelasticity. This theory has two limitations. To begin with, the elastic state of material is not related to temperature. Moreover, the parabolic heat equation predicts that the temperature travels at an infinite speed, which is again contradictory to physical experiments. M. A. Biot [2] set up the hypothesis of coupled thermoelasticity to conquer these impediments. According to his theory, the heat conduction equations and the equations of elasticity are related. However, the shortcoming of this theory is that it only predicts heat waves with an unlimited speed of propagation. C. Cattaneo [3] and P. Vernotte [4, 5] suggested a wider form of the Fourier law for the homogeneous and isotropic medium by introducing thermal relaxation time τ_0 to the heat flux vector **q** to establish a steady state at a point when a temperature gradient ∇T is abruptly imposed on it, as,

$$(1 + \tau_0 \partial/\partial t)\mathbf{q} = -K_{ii}\nabla T, \tag{1}$$

where K_{ii} is the coefficient of thermal conductivity, t is the time.

Then the generalized theory of thermoelasticity with one relaxation time was put forward by H. W. Lord and V. Shulman [6] for the particular case of an isotropic body. According to this theory, the heat equation being hyperbolic has a finite speed of propagation for temperature. After that a more precise version of thermoelasticity was presented by the two-temperature theory of thermoelasticity introduced by P. J. Chen and M. E. Gurtin [7]. This model includes the conductive temperature φ (the outcome of thermodynamic processes) and the thermodynamic temperature T (the result of mechanical processes). A. E. Green and K. A. Lindsay [8] showed that the linear heat conduction tensor is symmetric. R. S. Dhaliwal and H. H. Sherief [9] gave the equations of generalized thermoelasticity for an anisotropic medium. However, A. E. Green and P. M. Naghdi [10 – 12] further contributed to the thermoelastic theories with and without energy dissipation and further developed the Fourier law as

[©] Каур И., Сингх К., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

$$q = -K_{ij} \nabla T - K_{ij}^* \nabla \Theta, \ \dot{\Theta} = T, \ T = \varphi - a_{ij} \varphi_{ij}, \tag{2}$$

where K_{ii}^{*} is the materialistic constant; a_{ii} is the two-temperature parameter.

Now the law can be formulated as follows:

Based on entropy equality, they proposed three new thermoelastic theories. Their theories are known as the thermoelasticity theory of type I, the thermoelasticity theory of type II (i.e., thermoelasticity without energy dissipation), and the thermoelasticity theory of type III (i.e., thermoelasticity with energy dissipation). On linearization, type I becomes the classical heat equation whereas on linearization of type-II, as well as type-III theories, give the finite speed of thermal wave propagation.

Recently, there has been a myriad of academic articles that study and interpret the Moore – Gibson – Thompson (MGT) equation. I. Lasiecka and X. Wang [13] founded their theory on a 3^{rd} -order differential equation, important to various fluid dynamics. Using the MGT equation with 2T, R. Quintanilla [14, 15] devised a novel heat conduction model. MGT equation of the modified Fourier law is, as follows:

$$(1 + \tau_0 \partial/\partial t)\mathbf{q} = -K_{ii} \nabla T - K_{ii}^* \nabla \theta, \text{ where } \dot{\theta} = T.$$
(3)

J. R. Fernandez and R. Quintanilla [16] discussed linear thermoelastic deformations of dielectrics. N. Bazarra et al. [17] studied a thermoelastic problem using MGT thermoelastic equation. Suppose that the semiconductor elastic media is exposed to external laser beams and which create carrier-free charge density due to excited free electrons with semiconductor gap energy E_g . In response to absorbed optical energy, there is a change in the electronic deformation and the elastic vibration. In this case, heat conductivity equations will be affected by thermal-elastic-plasma waves. The revised Fourier law for semiconductor materials with plasma impact in a generalized form can be written as

$$(1 + \tau_0 \partial/\partial t)\mathbf{q} = -K_{ij}\nabla T - K_{ij}^*\nabla \theta - \int (E_g N/\tau)dx, \text{ where } \dot{\theta} = T;$$
(4)

here N is the carrier density.

The photoexcitation effect is represented by the final term in Eq. (4). When the above equation is differentiated with respect to x, the result is

$$(1 + \tau_0 \partial/\partial t) \nabla \cdot \mathbf{q} = -\nabla \cdot (K_{ij} \nabla T - K_{ij}^* \nabla \theta) - E_g N/\tau, \text{ where } \dot{\theta} = T.$$
(5)

Some other researchers also worked on similar research on Hall current effect and semiconductor medium such as M. Marin [18], P. Lata et al. [19], A. M. S. Mahdy et al. [20], I. Kaur and K. Singh [21, 22], M. Marin et al. [23, 24], I. Kaur et al. [25, 26], M. M. Bhatti et al. [27, 28], M. Conti et al. [29], M. I. A. Othman and M. Marin [30], J. A. Conejero et al. [31], M. Marin et al. [32], E. M. Craciun et al. [33], M. E. Nasr et al. [34], A. E. Abouelregal et al. [35]. However, from the literature review, it has been observed that no work has been carried out in the transient study of semiconductor cylinders exposed to ultrashort pulsed laser heating and photogenerated plasma with two temperatures. The importance of this issue is the main motivation for its in-depth review in this study.

This study aimed to explore the photo-thermoelastic interactions in an infinite semiconducting solid cylinder acted upon by the variable heat flux in the form of an exponential laser pulse along the boundary surface.

The governing equations are expressed using a new generalized photo-thermoelastic model as MGTPT heat transfer for semiconducting medium with two temperatures. The Laplace transforms are used for the solution of the mathematical model in the transformed domain. And the numerical inversion is applied to obtain the displacement components, the conductive temperature, the carrier density and the thermal stresses in the physical domain. The impact of different theories of thermoelasticity with two temperatures on the displacement, temperature, thermal stresses, and the carrier density are represented graphically using Matlab software.

Basic equations

Following the work of A. E. Abouelregal and D. Atta [36], we present below the constitutive relations, the equation of motion, the plasma diffusion equation governing the plasma transportation process in semiconductor nanostructure medium, the MGTPT heat conduction equation with thermal-plasma-elastic interaction.

The constitutive relations:

$$\sigma_{ij} = (\lambda u_{kk} - \beta T - \delta_n N) \delta_{ij} + \mu (u_{i,j} + u_{j,i}),$$

$$\beta = (3\lambda - 2\mu) \alpha_T \delta_n = (3\lambda + 2\mu) d_n, T = \varphi - a_{ij} \varphi_{ij},$$

(6)

where σ_{ij} , N/m², are the stress tensor components; λ , μ , Pa, are the Lame's elastic constants; u_{ij} , $u_{j,i}$, m, are the displacement tensor components; d_n is the coefficient of electronic deformation; δ_{ij} is the Kronecker delta; α_T , K⁻¹, is the linear thermal expansion coefficient.

The equation of motion:

$$\sigma_{ii,i} + F_i = \rho \ddot{u}_i,\tag{7}$$

where F_i , N, is the body force; ρ , kg/m³, is the medium density; \ddot{u}_i , m/s², are components of the body acceleration.

The plasma diffusion equation:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D_E \nabla^2 N - \frac{N}{\tau} + \kappa \left(1 - a \nabla^2\right) \phi, \tag{8}$$

where D_E is the carrier diffusion coefficient; τ , s, is the photo-generated carrier lifetime; *a* is the measure of thermoelastic diffusion effect; κ is the coupling parameter for thermal activation, $\kappa = (T/\tau) \partial N_0 / \partial T$ (N_0 is the carrier concentration at equilibrium position).

The modified Moore – Gibson –Thompson heat conduction equation with two temperature quantities:

$$\left(K_{ij}\varphi_{j}\right)_{,i} + \left(K_{ij}^{*}\varphi_{,j}\right)_{,i} + \frac{E_{g}N}{\tau} = \left(1 + \tau_{0}\frac{\partial}{\partial t}\right) \left[\rho C_{E}\left(1 - a\nabla^{2}\right)\ddot{\varphi} + \beta_{ij}T_{0}e_{ij} - \rho\dot{Q}\right],\tag{9}$$

where C_E is the specific heat at constant strain; e_{ij} are the strain tensor components; Q is the source of heat; $K_{ij} = K_i \delta_{ij}$, $K_{ij}^* = K_i^* \delta_{ij}$, *i* is not summed. The subscripts marked by commas mean the partial derivatives with respect to the spatial co-

The subscripts marked by commas mean the partial derivatives with respect to the spatial coordinates, whereas one or two dots on top of the notation mean the first or second derivative with respect to the time variable t.

Formulation and solution of the problem

A one-dimensional (1D) symmetrical, thermally homogenous, semiconductor solid cylinder of radius r_0 was considered (Fig. 1). An external laser pulse heating system was used to irradiate the external surface of the solid cylinder. A cylindrical coordinate system (r, θ, z) with the z-axis arranged along the cylinder axis was taken. Initially, it was believed the cylinder to maintain constant and uniform temperature T_0 .

Furthermore, all examined fields were assumed to be finite within the medium for the regularity condition. Due to symmetry, and for the 1D problem, all the functions considered depended on the radial distance r and the time t.

For the 1D problem, displacement components of \mathbf{u} and the displacement-strain relations are given by

$$\mathbf{u} = (u,0,0) \ (r, t), \ e_{rr} = u/r, \ e_{\theta\theta} = \partial u/\partial r, \ e_{r\theta} = e_{rz} = e_{\theta z} = e_{zz} = 0, \tag{10}$$

where e_{ii} are the strain tensor components.



Fig. 1. The illustration to the problem formulation: a semiconductor solid cylinder of radius r_0 and an external laser heat

The stress-strain-temperature-carrier relations (6) using Eqs. (10) will be the form

$$\sigma_{rr} = 2\mu \frac{\partial u}{\partial r} + \lambda e - \left[\beta \left(1 - a\nabla^2\right)\phi + \delta_n N\right],\tag{11}$$

$$\sigma_{\theta\theta} = 2\mu \frac{u}{r} + \lambda e - \left[\beta \left(1 - a\nabla^2\right)\phi + \delta_n N\right], \tag{12}$$

$$\sigma_{zz} = \lambda e - \left[\beta \left(1 - a\nabla^2\right)\phi + \delta_n N\right], \tag{13}$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}$$

where e_{kk} is the cubical dilatation, $e_{kk} = e = (1/r) \partial(ru) / \partial r$. Hence, the dynamic motion equation becomes

$$\frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{1}{r} \left(\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta} \right) = \rho \left(\frac{\partial u^2}{\partial t^2} - \Omega^2 u \right).$$
(14)

Using Eqs. (11) - (13), in Eqs. (14) and (8), (9), the governing equations for the considered semiconducting medium are:

$$\left(\lambda + 2\mu\right)\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial(ru)}{\partial r}\right] - \beta\frac{\partial}{\partial r}\left[\left(1 - a\nabla^{2}\right)\varphi\right] - \delta_{n}\frac{\partial N}{\partial r} = \rho\left(\frac{\partial^{2}u}{\partial t^{2}}\right),\tag{15}$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D_E \left(\nabla^2 N \right) - \frac{N}{\tau} + \kappa \left(1 - a \nabla^2 \right) \varphi, \tag{16}$$

$$K\frac{\partial}{\partial t}\nabla^{2}\varphi + K^{*}\nabla^{2}\varphi + \frac{E_{g}\dot{N}}{\tau} = \left(1 + \tau_{0}\frac{\partial}{\partial t}\right) \left\{\rho C_{E}\frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}}\left[\left(1 - a\nabla^{2}\right)\varphi\right] + \beta T_{0}\frac{\partial^{2}e}{\partial t^{2}}\right\},\tag{17}$$

Pre-operating both sides of Eq. (15) by $(1/r + \partial/\partial r)$, we get:

$$(\lambda + 2\mu)\nabla^2 e - \beta\nabla^2 (1 - a\nabla^2)\varphi - \delta_n \nabla^2 N = \left(\frac{\partial^2 e}{\partial t^2}\right).$$
(18)

In order to obtain the above equations in dimensionless form, the dimensionless quantities are given by the following: 1 / `

$$(r',u') = v_0 \eta(r,u), \ (T',N',\sigma'_{ij},\phi') = \frac{1}{\rho v_0^2} (\beta T, \delta_n N, \sigma_{ij},\phi),$$

$$(\tau'_0,\tau',t') = v_0^2 \eta(\tau'_0,\tau',t'), \ \eta = \frac{\rho C_E}{K}, \ \rho v_0^2 = \lambda + 2\mu, \ \gamma = \sqrt{\frac{\mu}{\lambda + 2\mu}}.$$
 (19)

Here, the magnetic parameter M (also known as the Hartmann number) measures the strength

of the magnetic field. Using Eq. (19) in Eqs. (16) - (18) and after suppressing the primes, yields:

$$\nabla^2 e - \nabla^2 \left(1 - a \nabla^2 \right) \varphi - \nabla^2 N = \left(\frac{\partial^2 e}{\partial t^2} \right), \tag{20}$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \delta_1 \left(\nabla^2 N \right) - \delta_2 N + \delta_3 \left(1 - a \nabla^2 \right) \phi, \tag{21}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\nabla^2 \varphi + \delta_4 \nabla^2 \varphi + \delta_5 N = \left(1 + \tau_0 \frac{\partial}{\partial t}\right) \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(1 - a\nabla^2\right) \varphi + \delta_6 \frac{\partial^2 e}{\partial t^2}\right],\tag{22}$$

where δ_n are the electronic deformation coefficients that follow the expressions

$$\delta_{1} = D_{E}\eta, \ \delta_{2} = \frac{1}{\tau}, \ \delta_{3} = \frac{\kappa\delta_{n}}{\beta}, \ \delta_{4} = \frac{K^{*}}{(\lambda + 2\mu)C_{E}},$$

$$\delta_{5} = \frac{E_{g}}{\delta_{n}C_{E}(\lambda + 2\mu)\eta\tau}, \ \delta_{6} = \frac{\beta^{2}T_{0}}{\rho C_{E}(\lambda + 2\mu)}.$$
(23)

Making use of dimensionless quantities defined by Eq. (19) in Eqs. (10) - (12) and after suppressing the primes, yields:

$$\sigma_{rr} = 2\gamma^2 \frac{\partial u}{\partial r} + (1 - 2\gamma^2)e - \left[(1 - a\nabla^2)\phi + N \right],$$
(24)

$$\sigma_{\theta\theta} = 2\gamma^2 \frac{u}{r} + (1 - 2\gamma^2)e - \left[(1 - a\nabla^2)\phi + N\right],$$
(25)

$$\sigma_{zz} = (1 - 2\gamma^2)e - \left[(1 - a\nabla^2)\phi + N\right].$$
(26)

The initial conditions of the problem are taken as

$$u(r,0) = 0 = \frac{\partial u}{\partial r}(r,0), \qquad (27)$$

$$\varphi(r,0) = 0 = \frac{\partial \varphi}{\partial r}(r,0), \qquad (28)$$

$$N(r,0) = 0 = \frac{\partial N}{\partial r}(r,0).$$
⁽²⁹⁾

The Laplace transform of a function f with respect to the time variable t, with s as a Laplace transform variable, is defined as

$$\mathcal{L}(f(t)) = \overline{f}(s) = \int_{0}^{\infty} f(t)e^{-st}dt.$$
(30)

Using Laplace transforms on Eq. (30) to Eqs. (20) - (22) we obtain:

$$\left(\nabla^2 - s^2\right)\overline{e} - \nabla^2\left(1 - a\nabla^2\right)\overline{\phi} - \nabla^2\overline{N} = 0,$$
(31)

$$\left[\delta_{1}\nabla^{2} - (\delta_{2} + s)\right]\overline{N} + \delta_{3}\left(1 - a\nabla^{2}\right)\overline{\varphi} = 0,$$
(32)

$$(1+\tau_0 s)\delta_6 s^2 \overline{e} + \left[-(s+\delta_4)\nabla^2 + (1+\tau_0 s)s^2(1-a\nabla^2)\right]\overline{\varphi} - \delta_5 \overline{N} = 0.$$
(33)

Using Laplace transforms on Eq. (30) to Eqs. (24) - (26), we obtain:

$$\overline{\sigma}_{rr} = 2\gamma^2 \frac{\partial \overline{u}}{\partial r} + (1 - 2\gamma^2)\overline{e} - \left[\left(1 - a\nabla^2 \right)\overline{\varphi} + \overline{N} \right], \tag{34}$$

$$\overline{\sigma}_{\theta\theta} = 2\gamma^2 \frac{\overline{u}}{r} + (1 - 2\gamma^2)\overline{e} - \left[(1 - a\nabla^2)\overline{\phi} + \overline{N} \right], \tag{35}$$

$$\overline{\sigma}_{zz} = (1 - 2\gamma^2)\overline{e} - \lfloor (1 - a\nabla^2)\overline{\phi} + \overline{N} \rfloor.$$
(36)

When Eqs. (31) to (33) are decoupled, we get

$$\left(\nabla^{6} - B\nabla^{4} + C\nabla^{2} - D\right)\left(\overline{e}, \overline{\varphi}, \overline{N}\right) = 0,$$
(37)

where

$$A = -\delta_{1}\delta_{11},$$

$$B = -\left[a\delta_{3}\delta_{5}s + \left(-A\delta_{7} - \delta_{1}\delta_{10} - \delta_{1}\delta_{9} + \delta_{8}\delta_{11} - a\delta_{8}\delta_{9}\right)\right] / A,$$

$$C = \left(-\delta_{3}\delta_{5}s + a\delta_{3}\delta_{5}\delta_{7} + \delta_{3}\delta_{9} - \delta_{1}\delta_{7}\delta_{10} + \delta_{8}\delta_{7}\delta_{11} + \delta_{8}\delta_{10} + \delta_{8}\delta_{9}\right) / A,$$

$$D = \left(\delta_{3}\delta_{7}\delta_{5}s - \delta_{8}\delta_{7}\delta_{10}\right) / A,$$

$$\delta_{7} = \left(-s^{2}\right), \ \delta_{8} = \delta_{2} + s, \ \delta_{9} = \left(1 + \tau_{0}s\right)\delta_{6}s^{2},$$

$$\delta_{10} = \left(1 + \tau_{0}s\right)s^{2}, \ \delta_{11} = -\left(s + \delta_{4}\right) - \left(1 + \tau_{0}s\right)s^{2}a.$$

Presenting λ_i (*i* = 1, 2, 3) in Eqs. (39) we obtain:

$$\left(\nabla^2 - \lambda_1^2\right) \left(\nabla^2 - \lambda_2^2\right) \left(\nabla^2 - \lambda_3^2\right) \left(\overline{e}, \overline{\varphi}, \overline{N}\right) = 0, \tag{38}$$

where λ_i^2 (*i* = 1, 2, 3) are the roots of the equation

$$\left(\lambda^{6} - B\lambda^{4} + C\lambda^{2} - D\right) = 0,$$

$$\lambda_{1}^{2} = \frac{1}{3} \left(2\omega\sin\xi + B\right),$$
(39)

that are given by

$$\lambda_2^2 = \frac{1}{3} \Big(-\omega \sin \xi - \sqrt{3} \omega \cos \xi + B \Big), \tag{40}$$

$$\lambda_3^2 = \frac{1}{3} \left(-\omega \sin \xi + \sqrt{3}\omega \cos \xi + B \right) \tag{41}$$

with

$$\omega = \sqrt{B^2 - 3C}, \ \xi = \frac{1}{3} \left[\sin \left(-\frac{2B^3 - 9BC + 27D}{2\omega} \right) \right]^{-1}.$$

The general solution of Eq. (38) can be written in the form

$$(\overline{e},\overline{\varphi},\overline{N}) = \sum_{i=1}^{3} (1,\zeta_i,\eta_i) g_i I_0(\lambda_i r), \qquad (42)$$

where $I_n()$ indicates the second type of modified Bessel functions of order *n*. We get the following relations by inserting Eq. (42) into Eqs. (31) – (33):

$$\zeta_{i} = \frac{-\left(\lambda_{i}^{2} + \delta_{7}\right)\left(\delta_{9}\lambda_{i}^{2} - \delta_{5}\right)}{\delta_{3}\delta_{5} + \left(\delta_{11}\lambda_{i}^{2} + \delta_{10}\right)\left(\delta_{1}\lambda_{i}^{2} - \delta_{8}\right)},\tag{43}$$

71

$$\eta_{i} = \frac{-\left(\lambda_{i}^{2} + \delta_{7}\right)\delta_{3}}{\delta_{3}\delta_{5} + \left(\delta_{11}\lambda_{i}^{2} + \delta_{10}\right)\left(\delta_{1}\lambda_{i}^{2} - \delta_{8}\right)}.$$
(44)

The displacement **u** may be represented in the Laplace transform domain, as follows:

$$\overline{u} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\lambda_i} g_i I_1(\lambda_i r).$$
(45)

We obtained Eq. (45) with the help of the Bessel function relation

$$\int x I_0(x) dx = x I_1(x). \tag{46}$$

Differentiating Eq. (45) in terms of r gives

$$\frac{\partial \overline{u}}{\partial r} = \sum_{i=1} g_i \left[I_0(\lambda_i r) - \frac{1}{\lambda_i r} I_1(\lambda_i r) \right].$$
(47)

Thus, the final thermal stress solutions are generated in closed form as follows:

$$\overline{\sigma}_{rr} = \sum_{i=1}^{3} g_i \left[l_i I_0(\lambda_i r) - \frac{2\gamma^2}{\lambda_i r} I_1(\lambda_i r) \right], \tag{48}$$

$$\overline{\sigma}_{\theta\theta} = \sum_{i=1}^{3} g_i \left[\frac{2\gamma^2}{\lambda_i r} I_1(\lambda_i r) + l_i I_0(\lambda_i r) \right], \tag{49}$$

$$\overline{\sigma}_{zz} = \sum_{i=1}^{n} g_i l_i I_0(\lambda_i r), \qquad (50)$$

$$l_i = 1 - 2\gamma^2 - \left[\zeta_i \left(1 - a\lambda_i^2\right) + \eta_i\right].$$

Boundary conditions

We presume that the cylinder's outside surface is compelled. Therefore, the mechanical boundary condition can be expressed as

$$u(r, t) = 0 \text{ at } r = r_0.$$
 (51)

Also, the boundary condition for variable heat flux (exponentially laser pulsed heat) is applied to the boundary surface:

$$q_{p} = q_{0} \frac{t^{2}}{16t_{p}^{2}} e^{-\frac{t}{t_{p}}} \text{at } r = r_{0}.$$
(52)

Using dimensionless variables (32) on Eq. (3) yields the equation

$$\left(1+\tau_0\frac{\partial}{\partial t}\right)\dot{q}_p = -\left(\frac{\partial}{\partial t}+\delta_4\right)\frac{\partial T}{\partial r},\tag{53}$$

Eqs. (52) and (53) give the following boundary condition:

$$\frac{q_0}{16t_p^2} \left(1 + \tau_0 \frac{\partial}{\partial t}\right) \frac{\partial}{\partial t} \left(t^2 e^{-\frac{t}{t_p}}\right) = -\left(\frac{\partial}{\partial t} + \delta_4\right) \frac{\partial T}{\partial r} \quad \text{at } r = r_0.$$
(54)
The carriers can reach the sample surface during the diffusion phase, with a finite probability of recombination.

The boundary condition for the carrier density:

$$D_E \frac{\partial N}{\partial r} = s_v N \text{ at } r = r_0,$$
(55)

where D_E is the carrier diffusion coefficient, s_y is the surface recombination velocity. The boundary conditions (51), (54), and (55) have the following forms after performing the Laplace transform:

$$\overline{u}(r_0,s) = 0,\tag{56}$$

$$\frac{\partial \left(1-a\nabla^{2}\right)\overline{\varphi}}{\partial r}\bigg|_{r=r_{0}} = -\frac{q_{0}\left(1+\tau_{0}s\right)s}{8\left(1+st_{p}\right)^{3}\left(s+\delta_{4}\right)} = -\overline{G}\left(s\right),\tag{57}$$

$$D_E \frac{\partial \overline{N}}{\partial r} \bigg|_{r=r_0} = s_v \overline{N} (r_0, s).$$
⁽⁵⁸⁾

Eqs. (42) and (45) are substituted into Eqs. (56) - (58), giving

$$\sum_{i=1}^{3} g_i \frac{1}{\lambda_i} I_1(\lambda_i r_0) = 0, \qquad (59)$$

$$\sum_{i=1}^{3} g_{i} I_{1}(\lambda_{i} r_{0}) \zeta_{i} \lambda_{i} (1 - a \lambda_{i}^{2}) = -\frac{q_{0} (1 + \tau_{0} s) s t_{p}}{8 (1 + s t_{p})^{3} (s + \delta_{4})} = -\overline{G}(s),$$
(60)

$$\sum_{i=1}^{3} \eta_i g_i \Big[D_E \lambda_i I_1(\lambda_i r_0) - s_v I_0(\lambda_i r_0) \Big] = 0.$$
⁽⁶¹⁾

The values of g_i (i = 1, 2, 3) can be obtained by solving Eqs. (59) – (61) by the Cramer's rule:

$$g_{i}(s)\frac{\Delta_{i}}{\Delta},$$

$$\Delta = G_{1}[G_{5}G_{9} - G_{8}G_{6}] - G_{2}[G_{4}G_{9} - G_{6}G_{7}] + G_{3}[G_{4}G_{8} - G_{5}G_{7}],$$

$$\Delta_{1} = \overline{G}(s)[G_{2}G_{9} - G_{8}G_{3}],$$

$$\Delta_{2} = -\overline{G}(s)[G_{1}G_{9} - G_{7}G_{3}],$$

$$\Delta_{3} = \overline{G}(s)[G_{1}G_{8} - G_{2}G_{7}],$$

$$G_{i} = \frac{1}{\lambda_{i}}\varphi_{i},$$

$$G_{i+3} = \varphi_{i}\zeta_{i}\lambda_{i}(1 - a\lambda_{i}^{2}),$$

$$G_{i+6} = \eta_{i}[D_{E}\lambda_{i}\varphi_{i} - s_{v}\psi_{i}],$$

$$I_{1}(\lambda_{i}r_{0}) = \varphi_{i}, I_{0}(\lambda_{i}r_{0}) = \psi_{i}, i = 1, 2, 3,$$

and putting the values of $g_{(s)}$ into Eqs. (42), (45), (48) – (50), the various components of displacement, temperature distribution, carrier density, and stresses are

$$\overline{u} = \frac{\overline{G}(s)}{\Delta} \left\{ \left[G_2 G_9 - G_8 G_3 \right] \frac{\theta_1}{\lambda_1} - \left[G_1 G_9 - G_7 G_3 \right] \frac{\theta_2}{\lambda_2} + \left[G_1 G_8 - G_2 G_7 \right] \frac{\theta_3}{\lambda_3} \right\},\tag{62}$$

73

St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 1

$$\overline{T} = \frac{\overline{G}(s)}{\Delta} \{ [G_2 G_9 - G_8 G_3] \zeta_1 \vartheta_1 - [G_1 G_9 - G_7 G_3] \zeta_2 \vartheta_2 + [G_1 G_8 - G_2 G_7] \zeta_3 \vartheta_3 \},$$
(63)

$$\overline{N} = \frac{G(s)}{\Delta} \left\{ \left[G_2 G_9 - G_8 G_3 \right] \eta_1 \vartheta_1 - \left[G_1 G_9 - G_7 G_3 \right] \eta_2 \vartheta_2 + \left[G_1 G_8 - G_2 G_7 \right] \eta_3 \vartheta_3 \right\},$$
(64)

$$\overline{\sigma}_{rr} = \frac{G(s)}{\Delta} \{ [G_2 G_9 - G_8 G_3] (l_1 \vartheta_1 - \mu_1) - [G_1 G_9 - G_7 G_3] (l_2 \vartheta_2 - \mu_2) + [G_1 G_8 - G_2 G_7] (l_3 \vartheta_3 - \mu_3) \},$$
(65)

$$\overline{\sigma}_{\theta\theta} = \frac{\overline{G}(s)}{\Delta} \{ [G_2 G_9 - G_8 G_3] (\mu_1 + l_1 \vartheta_1) - [G_1 G_9 - G_7 G_3] (\mu_2 + l_2 \vartheta_2) + [G_1 G_8 - G_2 G_7] (\mu_3 + l_3 \vartheta_3) \},$$
(66)

$$\overline{\sigma}_{zz} = \frac{G(s)}{\Delta} \{ [G_2 G_9 - G_8 G_3] l_1 \vartheta_1 - [G_1 G_9 - G_7 G_3] l_2 \vartheta_2 + [G_1 G_8 - G_2 G_7] l_3 \vartheta_3 \},$$
(67)

where

$$\Theta_i = I_0(\lambda_i r), \ \Theta_i = I_1(\lambda_i r), \ \mu_i = \frac{2\gamma^2}{\lambda_i r} I_1(\lambda_i r), \ i = 1, 2, 3$$

Inversion of the transforms

In order to obtain the result of the problem in the physical domain, transforms in Eqs. (62) – (67) are inverted using $\frac{1}{100}$

$$f(x,t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{e^{-ix}}^{e^{+ix}} \tilde{f}(x,s) e^{-st} ds.$$
(68)

Finally, let us evaluate the integral in Eq. (68) using the Romberg's integration (W. H. Press et al. [37]) with an adaptive step size.

Particular cases:

i. If $K^* \neq 0$, $K \neq 0$ and $\tau_0 \neq 0$, $a \neq 0$ in Eqs. (62) – (67), the results for the MGTPT + 2TT can be obtained (2TT are the two temperature quantities).

ii. If $K^* \neq 0$, $K \neq 0$ and $\tau_0 = 0$, $a \neq 0$ in Eqs. (62) – (67), the results for the Photothermal Green and Naghdi III model (PGN-III) [12] with 2TT can be obtained.

iii. If $K \neq 0$ and $\tau_0 = 0$, $a \neq 0$ in Eqs. (62) – (67), the results for the Photothermal Green and Naghdi II model (PGN-II) [11] with 2TT can be obtained. *iv.* If $K^* = 0$ and $\tau_0 = 0$, $a \neq 0$ in Eqs. (62) – (67), the results for the Coupled Photothermo-

iv. If $K^* = 0$ and $\tau_0 = 0$, $a \neq 0$ in Eqs. (62) – (67), the results for the Coupled Photothermoelasticity theory (CPTE) with 2*TT* are obtained.

v. If $K^* = 0$ and $a \neq 0$ in Eqs. (62) – (67), the results for the generalized Lord and Shulman Photothermoelasticity model (PLS) [6] with 2TT are obtained.

vi. If a = 0 in Eqs. (62) – (67), the results for the MGTPT model are obtained.

Numerical results and discussion

In order to demonstrate the theoretical results and to show the effect of Hall current, rotation, and the effect of the modified photothermal heat equation (MGTPT) graphically using Matlab software, the isotropic silicon material (Si) with its physical properties was taken. The used data are listed in Table.

Fig. 2, a depicts the variation in the radial displacement **u** for MGTPT and PGN-III theories with two temperatures. Notice that the radial displacement is minimum in the absence of two temperature quantities in the MGTPT theory. However, as the value of the two-temperature parameters in the MGTPT theory increases, the radial displacement increases as well. Moreover, PGN-III theories with and without two temperatures show a higher variation in the radial displacement. Furthermore, as the radial distance increases, the radial displacement decreases.

Table

Parameter	Notation	Unit	Value	
Lama'a alastia constants	λ	CDa	36.4	
Lame's elastic constants	μ	GPa	54.6	
Thermal elastic coupling	β	MPa/(deg)	7.04	
Electronic deformation coefficient	δ_n	m ³	-9.10^{-31}	
Medium density	ρ	kg/m ³	2.33·10 ³	
Specific heat at constant strain	$C_{_E}$	J/(kg·K)	695	
Coefficient of thermal conductivity	K	W/(m·K)	150	
Materialistic constant	<i>K</i> *	kW∙s	1.54	
Carrier diffusion coefficient	D_{E}	m²/s	2.5.10-3	
Magnetic constant	μ_0	H/m	1.257.10-6	
Reference temperature	T	17	300	
(s. t. $ T/T_0 <<1$)		K		
Photo-generated carrier lifetime	τ	μs	50	
Carrier concentration	37	2	1.020	
at equilibrium position	IN ₀	m-5	1020	
Electric constant	ε	F/m	8.854.10-12	
Semiconductor gap energy	Eg	eV	1.11	
Linear thermal expansion		IZ_1	2 10 6	
coefficient	α_{T}	К-1	3.10-0	
Surface recombination velocity	S _v	m/s	2	

Parameter values of silicon material [36] used in our study



Fig. 2. The radial displacement (a) and temperature (b) variations for various models with two temperature quantities (a is the two-temperature parameter)

Fig. 2, *b* illustrates the variation in the temperature distribution for MGTPT and PGN-III theories with two temperatures. Note that temperature distribution is higher in the inner core of the cylinder as compared to the outer one of the cylinder. In addition, the presence of two temperatures causes a higher temperature distribution.



Fig. 3. The variation in the carrier density for various models with two temperature quantities

Fig. 3 shows the variation in the carrier density for MGTPT and PGN-III theories with two temperatures. It should be noted that PGN-III depicts the minimum variation in carrier density than MGTPT theory in the absence of two temperature quantities. At the same time, PGN-III theory results in maximum variation in carrier density. Notice that variation in the carrier density sharply decreases as the radial distance r increases.

Fig. 4 shows the variation in the stress components for MGTPT and PGN-III theories with two temperatures. It has been noticed that in the absence of two temperature quantities in the MGTPT theory, the variation in the stress components are minimum as compared to the PGN-III theory. However, as the value of the



Fig. 4. The deviations in radial (*a*), hoop (*b*) and vertical (*c*) stresses for various models with two temperatures

two- temperature parameter increases, there is a sharp increase in the stress components. Note that the variation in the stress components decreases drastically as the radial distance r increases.

Conclusions

This study lays out several photo-thermoelasticity models that are generalized in the Moore – Gibson – Thompson photo-thermal (MGTPT) model with two temperatures. In addition, this study included the photo-thermoelastic Green – Naghdi type III model. The generalized MGTPT model is used to solve some of the physical consequences of some earlier models. In this study, the infinite semiconducting solid cylinder subjected to the exponential laser pulse on its boundary surface has been studied. The governing equations are expressed with the help of the MGTPT with two temperatures.

Effects of different thermoelastic theories with two temperatures on the components of displacement, temperature field, carrier density, and thermal stresses are represented graphically. As seen in the graphs, all of the domains examined are significantly impacted by the two temperatures. The thermal effect occurs when semiconductor media are exposed to focused laser beams or sunlight ones and, because of the thermal effect, they will vibrate. These materials have many uses in renewable energy, especially in the solar cells industry which depends heavily on semiconductor materials.

Photothermal methods are not only simple and sensitive but they can also be used to gain some insight into the process of de-excitation in materials with optical absorption. The ideas presented in this paper will come in handy for physicists, material designers, thermal engineers, and geo-physicists. A wide range of photo-thermoelasticity and thermodynamic problems can be solved using the technique used in the above study.

REFERENCES

1. **Duhamel J. M.**, Memories of the molecular actions developed by changes in temperatures in solids, Mummy Div. Sav. (l'Acad. des Sci., Paris). 5 (1938) 440–498.

2. Biot M. A., Thermoelasticity and irreversible thermodynamics, J. Appl. Phys. 27 (3) (1956) 240-253.

3. Cattaneo C., A form of heat-conduction equations which eliminates the paradox of instantaneous propagation, Comptes Rendus Acad. Sci. Paris. Ser. II. 247 (01 January) (1958) 431–433.

4. Vernotte P., Les paradoxes de la theorie continue de l'equation de lachaleur, Comptes Rendus Acad. Sci. Paris. Ser. II. 246 (1958) 3154–3155.

5. Vernotte P., Some possible complications in the phenomena of thermal conduction, Comptes Rendus Acad. Sci. Paris. Ser. II. 252 (1961) 2190–2191.

6. Lord H. W., Shulman Y., A generalized dynamical theory of thermoelasticity, J. Mech. Phys. Solids. 15 (5) (1967) 299–309.

7. Chen P. J., Gurtin M. E., On a theory of heat conduction involving two temperatures, Zeitschrift für Angew. Math. Phys. 19 (4) (1968) 614–627.

8. Green A. E., Lindsay K. A., Thermoelasticity, J. Elast. 2 (1) (1972) 1-7.

9. Dhaliwal R. S., Sheriff H. H., Generalized thermoelasticity for anisotropic media, Q. Appl. Math. 38 (1) (1980) 1–8.

10. Green A. E., Naghdi P. M., A re-examination of the basic postulates of thermomechanics, Proc. R. Soc. A: Math. Phys. Eng. Sci. 432 (1885) (1991) 171–194.

11. Green A. E., Naghdi P. M., On undamped heat waves in an elastic solid, J. Therm. Stress. 15 (2) (1992) 253–264.

12. Green A. E., Naghdi P. M., Thermoelasticity without energy dissipation, J. Elast. 31 (3) (1993) 189–208.

13. Lasiecka I., Wang X., Moore – Gibson – Thompson equation with memory, part II: General decay of energy, J. Diff. Eq. 259 (12) (2015) 7610–7635.

14. Quintanilla R., Moore – Gibson – Thompson thermoelasticity, Math. Mech. Solids. 24 (12) (2019) 4020–4031.

15. Quintanilla R., Moore – Gibson – Thompson thermoelasticity with two temperatures, Appl. Eng. Sci. 1 (March) (2020) 100006.

16. Fernández J. R., Quintanilla R., Moore – Gibson – Thompson theory for thermoelastic dielectrics, Appl. Math. Mech. 42 (2) (2021) 309–316.

17. Bazarra N., Fernández J. R., Quintanilla R., Analysis of a Moore –Gibson – Thompson thermoelastic problem, J. Comput. Appl. Math. 382 (15 January) (2021) 113058.

18. Marin M., On weak solutions in elasticity of dipolar bodies with voids, J. Comput. Appl. Math. 82 (1–2) (1997) 291–297.

19. Lata P., Kaur I., Singh K., Propagation of plane wave in transversely isotropic magnetothermoelastic material with multi-dual-phase lag and two temperature, Coupled Syst. Mech. 9 (5) (2020) 411–432.

20. Mahdy A. M. S., Lotfy K., Ahmed M. H., et al., Electromagnetic Hall current effect and fractional heat order for microtemperature photoexcited semiconductor medium with laser pulses, Res. Phys. 17 (June) (2020) 103161.

21. Kaur I., Singh K., Fiber-reinforced magneto-thermoelastic composite material with hyperbolic two-temperature, fractional-order three-phase lag and new modified couple stress theory, Waves Random Complex Media. 2021 (October) (2021) 1–24.

22. Kaur I., Singh K., Thermoelastic damping in a thin circular transversely isotropic Kirchhoff – Love plate due to GN theory of type III, Arch. Appl. Mech. 91 (5) (2021) 2143–2157.

23. Marin M., Öchsner A., Craciun E. M., A generalization of the Saint-Venant's principle for an elastic body with dipolar structure, Contin. Mech. Thermodyn. 32 (1) (2020) 269–278.

24. Marin M., Öchsner A., Craciun E. M., A generalization of the Gurtin's variational principle in thermoelasticity without energy dissipation of dipolar bodies, Contin. Mech. Thermodyn. 32 (6) (2020) 1685–1694.

25. Kaur I., Lata P., Singh K., Memory-dependent derivative approach on magneto-thermoelastic transversely isotropic medium with two temperature, Int. J. Mech. Mater. Eng. 15 (2020) 10.

26. Kaur I., Lata P., Singh K., Reflection of plane harmonic wave in rotating media with fractional order heat transfer and two temperature, Part. Differ. Eq. Appl. Math. 4 (December) (2021) 100049.

27. Bhatti M. M., Ellahi R., Zeeshan A., et al., Numerical study of heat transfer and Hall current impact on peristaltic propulsion of particle-fluid suspension with compliant wall properties, Mod. Phys. Lett. B. 33 (35) (2019) 1950439.

28. Bhatti M. M., Yousif M. A., Mishra S. R., Shahid A., Simultaneous influence of thermodiffusion and diffusion-thermo on non-Newtonian hyperbolic tangent magnetised nanofluid with Hall current through a nonlinear stretching surface, Pramana. 93 (6) (2019) 88.

29. Conti M., Pata V., Quintanilla R., Thermoelasticity of Moore – Gibson –Thompson type with history dependence in temperature, Asymptot. Anal. 120 (1–2) (2020) 1–21.

30. Othman M. I. A., Marin M., Effect of thermal loading due to laser pulse on thermoelastic porous medium under G-N theory, Res. Phys. 7 (2017) 3863–3872.

31. Conejero J. A., Lizama C., Rodenas F., Ramos J. S., Chaotic behaviour of the solutions of the Moore – Gibson – Thompson equation, Appl. Math. Inf. Sci. 9 (5) (2015) 2233–2238.

32. Marin M., Othman M. I. A., Seadawy A. R., Carstea C., A domain of influence in the Moore – Gibson – Thompson theory of dipolar bodies, J. Taibah Univ. Sci. 14 (1) (2020) 653–660.

33. **Craciun E. M., Baesu E., Soys E.,** General solution in terms of complex potentials for incremental antiplane states in prestressed and prepolarized piezoelectric crystals: Application to Mode III fracture propagation, IMA J. Appl. Math. (The Institute of Mathematics and its Applications). 70 (1) (2005) 39–52.

34. Nasr M. E., Abouelregal A. E., Light absorption process in a semiconductor infinite body with a cylindrical cavity via a novel photo-thermoelastic MGT model, Arch. Appl. Mech. 92 (5) (2022) 1529–1549.

35. Abouelregal A. E., Sedighi H. M., Sofiyev A. H., Modeling photoexcited carrier interactions in a solid sphere of a semiconductor material based on the photothermal Moore – Gibson – Thompson model, Appl. Phys. A. 127 (11) (2021) 845.

36. Abouelregal A. E., Atta D., A rigid cylinder of a thermoelastic magnetic semiconductor material based on the generalized Moore – Gibson – Thompson heat equation model, Appl. Phys. A. 128 (2) (2022) 118.

37. Press W. H., Teukolsky S. A., Flannery B. P., Numerical recipes in Fortran, Cambridge University Press, Cambridge, 1980.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Duhamel J. M.** Memories of the molecular actions developed by changes in temperatures in solids // Mummy Div. Sav. (l'Academie des Sciences, Paris). 1938. Vol. 5. Pp. 440–498.

2. Biot M. A. Thermoelasticity and irreversible thermodynamics // Journal of Applied Physics. 1956. Vol. 27. No. 3. Pp. 240–253.

3. Cattaneo C. A form of heat-conduction equations which eliminates the paradox of instantaneous propagation // Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris. Ser. II. 1958. Vol. 247. 01 January. Pp. 431–433.

4. Vernotte P. Les paradoxes de la theorie continue de l'equation de lachaleur // Comptes Rendus de l'Acadйmie des Sciences de Paris. Ser. II. 1958. Vol. 246. Pp. 3154–3155.

5. Vernotte P. Some possible complications in the phenomena of thermal conduction, Comptes Rendus de l'Acadămie des Sciences de Paris. Ser. II. 1961. Vol. 252. Pp. 2190–2191.

6. Lord H. W., Shulman Y. A generalized dynamical theory of thermoelasticity // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1967. Vol. 15. No. 5. Pp. 299–309.

7. Chen P. J., Gurtin M. E. On a theory of heat conduction involving two temperatures // Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik. 1968. Vol. 19. No. 4. Pp. 614–627.

Green A. E., Lindsay K. A. Thermoelasticity // Journal of Elastisity. 1972. Vol. 2. No. 1. Pp. 1–7.
 Dhaliwal R. S., Sheriff H. H. Generalized thermoelasticity for anisotropic media // Quarterly of Applied Mathematics. 1980. Vol. 38. No. 1. Pp. 1–8.

10. Green A. E., Naghdi P. M. A re-examination of the basic postulates of thermomechanics // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 1991. Vol. 432. No. 1885. Pp. 171–194.

11. Green A. E., Naghdi P. M. On undamped heat waves in an elastic solid // Journal of Thermal Stresses. 1992. Vol. 15. No. 2. Pp. 253–264.

12. Green A. E., Naghdi P. M. Thermoelasticity without energy dissipation // Journal of Elastisity. 1993. Vol. 31. No. 3. Pp. 189–208.

13. Lasiecka I., Wang X. Moore – Gibson – Thompson equation with memory, part II: General decay of energy // Journal of Differential Equations. 2015. Vol. 259. No. 12. Pp. 7610–7635.

14. Quintanilla R. Moore – Gibson – Thompson thermoelasticity // Mathematics and Mechanics of Solids. 2019. Vol. 24. No. 12. Pp. 4020–4031.

15. Quintanilla R. Moore – Gibson – Thompson thermoelasticity with two temperatures // Applications in Engineering Science. 2020. Vol. 1. March. P. 100006.

16. Fernández J. R., Quintanilla R. Moore – Gibson – Thompson theory for thermoelastic dielectrics // Applied Mathematics and Mechanics. 2021. Vol. 42. No. 2. Pp. 309–316.

17. **Bazarra N., Fernández J. R., Quintanilla R.** Analysis of a Moore –Gibson – Thompson thermoelastic problem // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2021. Vol. 382. 15 January. P. 113058.

18. Marin M. On weak solutions in elasticity of dipolar bodies with voids // Journal of Computational and Applied Mathematics. 1997. Vol. 82. No. 1–2. Pp. 291–297.

19. Lata P., Kaur I., Singh K. Propagation of plane wave in transversely isotropic magneto-thermoelastic material with multi-dual-phase lag and two temperature // Coupled System Mechanics. 2020. Vol. 9. No. 5. Pp. 411–432.

20. Mahdy A. M. S., Lotfy K., Ahmed M. H., El-Bary A., Ismail E. A. Electromagnetic Hall current effect and fractional heat order for microtemperature photo-excited semiconductor medium with laser pulses // Results in Physics. 2020. Vol. 17. June. P. 103161.

21. Kaur I., Singh K. Fiber-reinforced magneto-thermoelastic composite material with hyperbolic two-temperature, fractional-order three-phase lag and new modified couple stress theory // Waves in Random and Complex Media. 2021. October. Pp. 1–24.

22. **Kaur I., Singh K.** Thermoelastic damping in a thin circular transversely isotropic Kirchhoff – Love plate due to GN theory of type III // Archive of Applied Mechanics. 2021. Vol. 91. No. 5. Pp. 2143–2157.

23. Marin M., Öchsner A., Craciun E. M. A generalization of the Saint-Venant's principle for an elastic body with dipolar structure // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2020. Vol. 32. No. 1. Pp. 269–278.

24. Marin M., Öchsner A., Craciun E. M. A generalization of the Gurtin's variational principle

in thermoelasticity without energy dissipation of dipolar bodies // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2020. Vol. 32. No. 6. Pp. 1685–1694.

25. Kaur I., Lata P., Singh K. Memory-dependent derivative approach on magneto-thermoelastic transversely isotropic medium with two temperatures // International Journal of Mechanical and Materials Engineering. 2020. Vol. 15. Article No. 10.

26. Kaur I., Lata P., Singh K. Reflection of plane harmonic wave in rotating media with fractional order heat transfer and two temperature // Partial Differential Equations in Applied Mathematics. 2021. Vol. 4. December. P. 100049.

27. Bhatti M. M., Ellahi R., Zeeshan A., Marin M., Ijaz N. Numerical study of heat transfer and Hall current impact on peristaltic propulsion of particle-fluid suspension with compliant wall properties // Modern Physics Letters. B. 2019. Vol. 33. No. 35. P. 1950439.

28. Bhatti M. M., Yousif M. A., Mishra S. R., Shahid A. Simultaneous influence of thermodiffusion and diffusion-thermo on non-Newtonian hyperbolic tangent magnetised nanofluid with Hall current through a nonlinear stretching surface // Pramana. 2019. Vol. 93. No. 6. P. 88.

29. Conti M., Pata V., Quintanilla R. Thermoelasticity of Moore – Gibson –Thompson type with history dependence in temperature // Asymptotic Analysis. 2020. Vol. 120. No. 1–2. Pp. 1–21.

30. Othman M. I. A., Marin M. Effect of thermal loading due to laser pulse on thermoelastic porous medium under G-N theory // Results in Physics. 2017. Vol. 7. Pp. 3863–3872.

31. **Conejero J. A., Lizama C., Rodenas F., Ramos J. S.** Chaotic behaviour of the solutions of the Moore – Gibson – Thompson equation // Applied Mathematics & Information Sciences. 2015. Vol. 9. No. 5. P. 2233–2238.

32. Marin M., Othman M. I. A., Seadawy A. R., Carstea C. A domain of influence in the Moore – Gibson – Thompson theory of dipolar bodies // Journal of Taibah University for Science. 2020. Vol. 14. No. 1. Pp. 653–660.

33. Craciun E. M., Baesu E., Soys E. General solution in terms of complex potentials for incremental antiplane states in prestressed and prepolarized piezoelectric crystals: Application to Mode III fracture propagation // IMA Journal of Applied Mathematics (The Institute of Mathematics and its Applications). 2005. Vol. 70. No. 1. Pp. 39–52.

34. Nasr M. E., Abouelregal A. E. Light absorption process in a semiconductor infinite body with a cylindrical cavity via a novel photo-thermoelastic MGT model // Archive of Applied Mechanics. 2022 Vol. 92. No. 5. Pp. 1529–1549.

35. Abouelregal A. E., Sedighi H. M., Sofiyev A. H. Modeling photoexcited carrier interactions in a solid sphere of a semiconductor material based on the photothermal Moore – Gibson – Thompson model // Applied Physics. A. 2021. Vol. 127. No. 11. P. 845.

36. Abouelregal A. E., Atta D. A rigid cylinder of a thermoelastic magnetic semiconductor material based on the generalized Moore – Gibson – Thompson heat equation model // Applied Physics. A. 2022. Vol. 128. No. 2. P. 118.

37. **Пресс У. Х., Теукольски С. А., Фланнери Б. П.** Числовые рецепты на Фортране 77. Искусство научных вычислений (2-е изд.). Нью-Йорк: Изд-во Кембриджского университета, 1992.

THE AUTHORS

KAUR Iqbal

Government College for Girls, Department of Mathematics Palwal, Kurukshetra, Haryana, India bawahanda@gmail.com ORCID: 0000-0002-2210-7701

SINGH Kulvinder

Kurukshetra University, University Institute of Engineering & Technology, Department of Computer Science & Engineering Kurukshetra, Haryana, India-136119

ksingh2015@kuk.ac.in ORCID: 0000-0002-2717-0419

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КАУР Икбал — Ph.D., адъюнкт-профессор математики кафедры математики Государственного колледжа для девушек (городок Палвал), г. Курукшетра, штат Харьяна, Индия. Palwal, Kurukshetra, Haryana, India bawahanda@gmail.com ORCID: 0000-0002-2210-7701

СИНГХ Кулвиндер — Ph.D., доцент кафедры информатики и инженерии Инженерно-технологического института Университета Курукшетры, г. Курукшетра, штат Харьяна, Индия. Kurukshetra, Haryana, 136119, India ksingh2015@kuk.ac.in ORCID: 0000-0002-2717-0419

Received 10.05.2022. Approved after reviewing 11.10.2022. Ассерted 11.10.2022. Статья поступила в редакцию 10.05.2022. Одобрена после рецензирования 11.10.2022. Принята 11.10.2022. Научная статья УДК 51-74 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16107

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ ИДЕНТИФИКАЦИИ СОБСТВЕННЫХ ЧАСТОТ В МЕТОДЕ FDD (ДЕКОМПОЗИЦИИ В ЧАСТОТНОЙ ОБЛАСТИ)

Е. А. Андрианова ⊠, Д. В. Новицкий, В. С. Онищук

АО «ВНИИГ им. Б. Е. Веденеева», Санкт-Петербург, Россия

[™] elena-andrianova@bk.ru

Аннотация. В статье впервые приводится обоснование главного критерия метода FDD (декомпозиции в частотной области), основанного на сингулярном разложении матрицы взаимных спектральных плотностей (МВСП) измеренных сигналов. Метод FDD используется при динамическом тестировании сооружений (здания, мосты, плотины) для экспериментального определения их динамических характеристик в условиях нормальной эксплуатации без применения вибровозбудительного оборудования. Указанный критерий применяется для поиска собственных частот. Обоснование включало двустороннюю оценку первого сингулярного значения МВСП, которая позволила математически строго доказать применимость критерия при выполнении определенных условий.

Ключевые слова: декомпозиция в частотной области, коэффициент демпфирования, спектральная плотность сигнала

Для цитирования: Андрианова Е. А., Новицкий Д. В., Онищук В. С. Теоретическое обоснование идентификации собственных частот в методе FDD (декомпозиции в частотной области) // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 1. С. 82–96. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16107

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии СС BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16107

THEORETICAL JUSTIFICATION OF NATURAL FREQUENCY IDENTIFICATION IN THE FDD (FREQUENCY DOMAIN DECOMPOSITION) METHOD

E. A. Andrianova [⋈], D. V. Novitskii, V. S. Onischuk

"B. E. Vedeneev VNIIG" JSC, St. Petersburg, Russia

[™] elena-andrianova@bk.ru

Abstract. This paper is the first to provide a justification for the main criterion of the Frequency Domain Decomposition (FDD) algorithm based on the singular value decomposition of a spectral measured signals' density. The algorithm is used for monitoring the structures such as buildings, bridges, dams, to determine experimentally their state (under operating conditions) without application of vibroexciters. The criterion is used to search for natural frequencies. The justification included the double-ended estimate for the first singular value of the spectral density matrix, the estimate making it possible to prove strictly the criterion's applicability under some fulfilled conditions.

Keywords: frequency domain decomposition, damping coefficient, spectral density matrix, natural mode shape and frequency

© Андрианова Е. А., Новицкий Д. В., Онищук В. С., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

For citation: Andrianova E. A., Novitskii D. V., Onischuk V. S., Theoretical justification of natural frequency identification in the FDD (Frequency Domain Decomposition) method, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1) (2023) 82–96. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16107

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons. org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Экспериментальная оценка динамических характеристик уникальных сооружений (собственные частоты, формы собственных колебаний, декременты затухания) играет важную роль в строительной отрасли. Решение этой практической задачи актуально и для гидротехнических сооружений (ГТС), ввиду повышенных требований к безопасности их эксплуатации, особенно в сейсмических районах. Так, сопоставление экспериментальных и расчетных динамических характеристик позволяет проводить тонкую настройку параметров конечно-элементных моделей, применяющихся для расчетного обоснования эксплуатационной надежности ГТС при различных видах динамических нагрузок.

С конца 1980-х годов в мире интенсивно развивается группа методов, позволяющих экспериментально определять динамические характеристики сооружений (здания, мосты, плотины) при нормальных условиях эксплуатации. Данные методы объединены под общим названием «операционный модальный анализ (OMA)» (*англ.* Operational Modal Analysis (OMA)). В настоящее время они широко используются по всему миру ввиду относительно низкой стоимости и значительного прогресса в развитии измерительного и регистрирующего оборудования. Необходимым условием применения методов OMA служит близкий к белому шуму характер стационарного случайного эксплуатационного динамического воздействия.

Среди методов группы ОМА широкой популярностью пользуется метод, получивший международное название Frequency Domain Decomposition (FDD) (его дословный перевод — «декомпозиции в частотной области»). Этот метод основан на сингулярном разложении матрицы взаимных спектральных плотностей одновременно выполненных измерений. Он имеет следующие сильные стороны:

минимальные требования к количеству одновременных измерений;

наличие формализованных критериев идентификации собственных частот и форм собственных колебаний;

отсутствие ограничения «пропорционального демпфирования» для математической модели сооружения (формально идентифицированные формы собственных колебаний являются комплексными).

В первой из указанных сильных сторон подразумевается, что теоретически любой, даже очень сложный объект можно обследовать, применяя всего два акселерометра: один стационарный (опорный), а другой мобильный, последовательно перемещаемый по сооружению.

Метод FDD был впервые представлен в 2000 году [1] и в дальнейшем развит в публикациях [2 - 5]. В 2009 году он был теоретически переосмыслен авторами в статье [6]. Некоторые модификации метода [3, 5, 11] позволяют оценивать модальные коэффициенты затухания. Более подробно теоретические основы метода FDD рассмотрены в монографиях [7, 8]. Далее метод продолжали совершенствовать; интересные модификации этого метода предлагаются, например, в работах [11 – 14]. Классический вариант FDD и ряд его последующих модификаций реализованы в программном комплексе ARTeMIS Modal [9], позволяющем решать задачу идентификации динамических характеристик по данным вибрационных обследований.

В России метод FDD и программное обеспечение (ПО) ARTeMIS Modal с 2019 года применяют ученые Всероссийского научно-исследовательского института гидротехники (ВНИИГ) им. Б. Е. Веденеева (г. Санкт-Петербург, Россия). К настоящему времени по результатам вибрационных обследований определены динамические характеристики

© Andrianova E. A., Novitskii D. V., Onischuk V. S., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

плотины Бурейской ГЭС; плотины, силовой конструкции и перекрытий здания Саяно-Шушенской ГЭС; некоторых гидротехнических сооруженияй (ГТС) Нижне-Бурейской ГЭС, плотины Зейской ГЭС.

Метод FDD успешно работает как в модельных численных экспериментах, так и в практических задачах разного уровня сложности. Однако в литературе отсутствует строгое обоснование критерия идентификации собственных частот, равно как и теоретические оценки области возможного применения метода.

Последнее обстоятельство имеет особую важность для ГТС, поскольку использование для них методов ОМА (и, в частности, FDD) бывает затруднено тем, что динамические нагрузки обусловлены не совокупностью большого числа случайных техногенных факторов или микросейсмами (как, например, для общественных зданий), а целенаправленным регулированием режимов эксплуатации сооружений, например, мощности работающих гидроагрегатов.

Цель настоящей работы — теоретически обосновать основной критерий метода FDD для определения частот собственных колебаний объекта.

В связи с данной целью, авторами была построена двусторонняя оценка первого сингулярного значения матрицы взаимных спектральных плотностей вибрационных сигналов.

Краткое описание основной идеи метода FDD

Для определения динамических характеристик сооружения рассмотрим уравнение движения его материальных точек:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{y}}(t) + \mathbf{C}\dot{\mathbf{y}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{y}(t) = \mathbf{x}(t), \tag{1}$$

где $\mathbf{x}(t)$ – нагрузки, $\mathbf{y}(t)$ – отклик (*N*-мерные векторы); **M**, **C**, **K** – матрицы масс, демпфирования и жесткости, соответственно.

В книгах [7, 15] показано, что матрицы M, C, K – симметричные и вещественные; они являются матричными константами, т. е. не зависят от времени. Их размерность определяется числом степеней свободы N и равна $N \times N$. Отметим также, что матрица M является положительно определенной, а C и K – положительно полуопределенными [7, 15].

Уравнение (1) в однородном виде описывает свободные колебания системы. По его нетривиальному решению можно определить собственные частоты демпфированной системы ω_{di} и в общем случае комплексные формы собственных колебаний φ_i (модальные векторы).

Ввиду линейной независимости собственных форм колебаний, отклик y(t) системы раскладывается в их линейную комбинацию единственным образом:

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{\phi}_1 \cdot q_1(t) + \mathbf{\phi}_2 \cdot q_2(t) + \dots = \mathbf{\Phi} \mathbf{q}(t), \tag{2}$$

где Φ — матрица, столбцы которой являются формами собственных колебаний ϕ_i , т. е. $\Phi = [\phi_1, \phi_2, ...]; q(t)$ — вектор-столбец модальных координат; t — время.

В инженерной практике, в качестве начального приближения при идентификации динамических характеристик, многие годы использовался подход, называемый базовой частотной моделью (в книгах [7, 8] он назван Basic Frequency Domain). Основная идея этого подхода заключается в том, что при малом затухании в окрестности некоторой собственной частоты с номером *s* отклик системы определяется преимущественно собственной формой с тем же номером.

Тогда отклик y(t) системы (см. формулу (2)) можно представить следующим образом:

$$\mathbf{y}(t) \approx \mathbf{\varphi}_s q_s(t). \tag{3}$$

Корреляционная функция $\mathbf{R}(\tau)$ (это матричная функция) для стационарного процесса, по определению, имеет вид

$$\mathbf{R}(\tau) = \mathbf{E}\left[\mathbf{y}(t) \cdot \mathbf{y}^{T}(t+\tau)\right] = \mathbf{\phi}_{s} \mathbf{E}\left[q_{s}(t) \cdot q_{s}(t+\tau)\right] \mathbf{\phi}_{s}^{T} = R_{q}(\tau) \mathbf{\phi}_{s} \mathbf{\phi}_{s}^{T}, \qquad (4)$$

где $R_q(\tau)$ — автокорреляционная функция модальной координаты, неотрицательная по определению.

Выполнив преобразование Фурье корреляционной функции $\mathbf{R}(\tau)$, получим интересующее нас выражение МВСП компонент вектора отклика $\mathbf{G}_{y}(\omega)$, зависящее от форм колебаний:

$$\mathbf{G}_{y}(\omega) = G_{q}(\omega) \, \mathbf{\varphi}_{s} \mathbf{\varphi}_{s}^{T} \tag{5}$$

где ω – круговая частота.

Ранг матрицы $G_{y}(\omega)$ равен единице (так как ранг произведения матриц не превосходит рангов сомножителей), поэтому матрица имеет не более одного собственного значения, отличного от нуля. Также легко заметить, учитывая выражение (5), что любая строка или столбец матрицы $G_{y}(\omega)$ пропорциональны вектору собственной формы φ_{x} .

Найдем собственные значения и векторы, исходя из их определения:

$$\mathbf{G}_{\mathbf{u}}(\boldsymbol{\omega})\mathbf{u} = \lambda \mathbf{u},\tag{6}$$

$$G_{q}(\boldsymbol{\omega})\boldsymbol{\varphi}_{K}\boldsymbol{\varphi}_{K}^{T}\boldsymbol{u} = G_{q}(\boldsymbol{\omega})\boldsymbol{\varphi}_{K}(\boldsymbol{\varphi}_{K}^{T}\boldsymbol{u}) = G_{q}(\boldsymbol{\omega})(\boldsymbol{\varphi}_{K}^{T}\boldsymbol{u})\boldsymbol{\varphi}_{K} = \lambda\boldsymbol{u}.$$
(7)

Из равенств (7) следует, что собственный вектор равен модальному вектору ϕ_{K} , а собственное значение имеет следующий вид:

$$\lambda = G_q(\omega)(\boldsymbol{\varphi}_K^T \boldsymbol{\varphi}_K) = G_q(\omega) \|\boldsymbol{\varphi}_K\|^2.$$
(8)

Матрица $G_{y}(\omega)$, заданная по формуле (5), очевидно симметричная и, поскольку ее единственное, отличное от нуля собственное значение положительно, можно также утверждать, что она положительно полуопределенная. У такой матрицы сингулярные значения совпадают с ее собственными, а левые и правые сингулярные векторы — одинаковые.

Матрица $\mathbf{G}_{v}\mathbf{G}_{v}^{T}$ с точностью до коэффициента совпадает с \mathbf{G}_{v} . Действительно:

$$\mathbf{G}_{y}\mathbf{G}_{y}^{T} = \left. \mathbf{\phi}_{s}\mathbf{\phi}_{s}^{T} \right. \mathbf{\phi}_{s}\mathbf{\phi}_{s}^{T} = \left\| \mathbf{\phi}_{s} \right\|^{2} \left. \mathbf{\phi}_{s}\mathbf{\phi}_{s}^{T} = \left\| \mathbf{\phi}_{s} \right\|^{2} \left. \mathbf{G}_{y} \right.$$
(9)

Из определения SVD-разложения следует, что сингулярные векторы матрицы \mathbf{G}_{y} совпадают с собственными векторами матрицы $\mathbf{G}_{y}\mathbf{G}_{y}^{T}$. Поэтому первый сингулярный вектор (он соответствует максимальному, а в нашем случае — единственному, отличному от нуля собственному значению) является оценкой собственной формы (моды) колебаний $\boldsymbol{\varphi}_{s}$.

К сожалению, представить отклик y(t) в виде (3), т. е. пренебречь влиянием других собственных форм, можно не всегда. В работе [7] показано, что при использовании этого метода невозможно идентифицировать близкие по значению собственные частоты и соответствующие им формы собственных колебаний даже для систем с низким демпфированием. Чтобы получить такую возможность и вдобавок снизить влияние случайных шумов, неизбежно возникающих при измерениях, были разработаны более точные методы, одним из которых стал FDD.

Дадим краткое описание основной идеи метода FDD, следуя работе [7].

Пусть отклик y(t) является линейной композицией всех модальных векторов по формуле (2). Вычислим корреляционную функцию

$$\mathbf{R}(\tau) = \mathbf{E}\left[\mathbf{y}(t) \cdot \mathbf{y}^{T}(t+\tau)\right],\tag{10}$$

тогда

$$\mathbf{R}(\tau) = \mathbf{\Phi} \mathbf{E}[\mathbf{q}(t)] \cdot \mathbf{q}^{T}(t+\tau) \ \mathbf{\Phi}^{T} = \mathbf{\Phi} \mathbf{R}_{a} \mathbf{\Phi}^{T}.$$
(11)

Преобразование Фурье корреляционной функции $\mathbf{R}(\tau)$ дает выражение для матрицы взаимных спектральных плотностей $\mathbf{G}_{\nu}(\omega)$:

$$\mathbf{G}_{v}(\omega) = \mathbf{\Phi}\mathbf{G}_{a}(\omega)\mathbf{\Phi}^{T}.$$
(12)

Из предположения об отсутствии корреляции модальных координат $\mathbf{q}(t)$ [7] следует, что матрица $\mathbf{G}_{q}(\omega)$ диагональная. Поскольку матрица $\mathbf{\Phi}^{T}$ имеет комплексные элементы, ее транспонирование $\mathbf{\Phi}^{T}$ следует заменить эрмитовым сопряжением $\mathbf{\Phi}^{H}$.

Тогда выражение (12) примет следующий вид:

$$\mathbf{G}_{v}(\boldsymbol{\omega}) = \mathbf{\Phi}[\boldsymbol{g}_{n}^{2}(\boldsymbol{\omega})] \, \mathbf{\Phi}^{\mathrm{H}},\tag{13}$$

где диагональная матрица $[g_{\eta}^{2}(\omega)]$ содержит автоспектральные плотности матрицы $\mathbf{G}_{q}(\omega)$.

Основная идея метода FDD основана на применении следующего сингулярного разложения матрицы:

$$\mathbf{G}_{y}(\boldsymbol{\omega}) = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{U}^{\mathrm{H}} = \mathbf{U}\left[s_{n}^{2}(\boldsymbol{\omega})\right]\mathbf{U}^{\mathrm{H}},\tag{14}$$

где S — диагональная матрица сингулярных чисел, расположенных в порядке убывания; U— матрица, состоящая из левых (правых) сингулярных векторов.

Левые и правые сингулярные векторы матрицы $G_{y}(\omega)$ одинаковы вследствие того, что эта матрица самосопряженная и положительно определенная [18].

Сравнивая выражения (13) и (14), видим, что если бы собственные векторы, составляющие матрицу Φ , были взаимно ортогональны, то желаемые модальные формы с точностью до коэффициента были бы сингулярными векторами матрицы взаимных спектральных плотностей на произвольной частоте. Поскольку это условие не выполняется, можно рассчитывать только на приближенное решение задачи нахождения модальных векторов и частот.

Как показано в работе [7], если внешнее воздействие считать белым шумом, а диссипацию — малой, то для матрицы $G_{u}(\omega)$ справедливо следующее выражение:

$$\mathbf{G}_{y}(\omega) = \sum_{m=1}^{M} \frac{c_{m} \, \boldsymbol{\varphi}_{m} \, \boldsymbol{\varphi}_{m}^{\mathrm{H}}}{i\omega - \lambda_{m}} + \frac{c_{m} \, \boldsymbol{\varphi}_{m} \, \boldsymbol{\varphi}_{m}^{\mathrm{H}}}{-i\omega - \lambda_{m}^{*}} = \mathbf{\Phi} \cdot \operatorname{diag}\left(2 \operatorname{Re}\left(\frac{c_{m}}{i\omega - \lambda_{m}}\right)\right) \cdot \mathbf{\Phi}^{\mathrm{H}},\tag{15}$$

где $\lambda_m = -\gamma_m + i\omega_{dm} (\gamma_m - коэффициент диссипации, \omega_{dm} - собственная частота с учетом демпфирования); <math>\phi_m - \phi$ орма собственных колебаний; $\Phi - матрица$, в столбцах которой стоят векторы собственных форм $\Phi = [\phi_1, \phi_2, ..., \phi_M]$; $c_m - положительный коэффициент; <math>M - количество$ учтенных форм в разложении (2).

Введем обозначение

$$\alpha_m(\omega) = 2 \operatorname{Re}\left(\frac{c_m}{i\omega - \lambda_m}\right) = \frac{c_m \gamma_m}{(\omega - \omega_{md})^2 + \gamma_m^2}.$$
 (16)

Тогда выражение (15) можно записать следующим образом:

$$\mathbf{G}_{y}(\omega) = \mathbf{\Phi} \cdot \operatorname{diag}\left(\alpha_{m}\left(\omega\right)\right) \cdot \mathbf{\Phi}^{\mathrm{H}},\tag{17}$$

или

$$\mathbf{G}_{y}(\boldsymbol{\omega}) = \sum_{m=1}^{M} \boldsymbol{\alpha}_{m} \boldsymbol{\varphi}_{m} \boldsymbol{\varphi}_{m}^{\mathrm{H}}.$$
(18)

Для случая, когда значения собственных частот не близки между собой, авторы метода FDD предложили алгоритм, основанный на представлении матрицы $G_{y}(\omega)$ в виде (17), который можно кратко сформулировать следующим образом.

Шаг 1. Для каждой частоты ω заданного диапазона вычисляется матрица взаимных спектральных плотностей $\mathbf{G}_{\mu}(\omega)^{1}$.

Шаг 2. На каждой частоте ω производится сингулярное разложение матрицы (*англ.* Singular Value Decomposition (SVD)) **G**_y(ω), определяется ее первое сингулярное значение $\sigma_1(\omega)$ и строится функция первого сингулярного значения $\sigma_1(\omega)$ от частоты ω .

Шаг 3. Находятся значения частот ω_m , которые соответствуют локальным максимумам функции $\sigma_1(\omega)$.

Шаг 4. Если в окрестности частоты ω_m сингулярные разложения порождают первые сингулярные векторы, близкие к коллинеарным (что проверяется использованием

¹ Вообще говоря, вычисляются только те элементы матрицы $G_y(\omega)$, которые можно получить по сигналам, измеренным одновременно. Описанный ниже алгоритм можно применить к полной матрице $G_y(\omega)$, но на практике используются матрицы, которые выбираются из матрицы $G_y(\omega)$ определенным образом.

МАС-оценки²), то частота ω_m может считаться собственной, а первый сингулярный вектор $\mathbf{u}_{1}(\omega)$ будет оценкой формы собственных колебаний.

Такий образом, основная идея (далее будем называть ее критерием) алгоритма FDD заключается в том, что, будучи функцией частоты, первое сингулярное число матрицы **G**_{*u*}(ω_{m}) имеет локальные максимумы вблизи модальных частот.

Этот факт подтверждается решениями модельных задач и множеством расчетов, выполненных по виброизмерениям реальных объектов.

На рис. 1 приведен скриншот из программы ARTeMIS Modal — графики зависимостей первых шести сингулярных чисел от частоты (в логарифмических единицах для большей наглядности) по результатам динамического тестирования плотины Саяно-Шушенской ГЭС, выполненного авторами этой статьи в 2022 году.



Рис. 1. Усредненные частотные зависимости шести сингулярных значений (6 кривых) матрицы спектральных плотностей: верхняя кривая (синего цвета) относится к первому сингулярному числу $\sigma_1(\omega)$; аргументам локальных максимумов σ.(ω) (выделены круглыми маркерами) соответствуют собственные частоты плотины.

Данные получены по измерениям на плотине Саяно-Шушенской ГЭС в 2022 г.

Следует еще раз подчеркнуть, что одной из основных целей динамического тестирования является определение (и как можно более точное) значений частот собственных колебаний сооружений. Графики на рис. 1 демонстрируют, что метод позволяет идентифицировать 11 низших собственных частот плотины Саяно-Шушенской ГЭС. Программа ARTeMIS Modal предусматривает специальную процедуру для исключения гармонических составляющих из процесса идентификации собственных частот.

Необоснованность критерия метода FDD

Несмотря на успешное использование метода FDD в инженерной практике, математическое обоснование критерия до настоящего времени так и не выполнено. Другими словами, в публикациях, посвященных методу FDD, не приводится доказательства того, что в окрестностях частот собственных колебаний функция $\sigma_{i}(\omega)$ имеет локальные максимумы.

² MAC – Modal Assurance Criterion, переводится дословно как «критерий модальной уверенности». $\frac{\left|\mathbf{a}^{\mathrm{H}}\mathbf{b}\right|^{2}}{(\mathbf{a}^{\mathrm{H}}\mathbf{a})(\mathbf{b}^{\mathrm{H}}\mathbf{b})}$

Вводится для сравнения двух форм (мод) колебаний **a** и **b** по формуле MAC(a,b) = -

Аналитического выражения первого сингулярного числа для квадратных матриц произвольной размерности не существует. Но, как уже было отмечено выше, матрицу взаимных спектральных плотностей можно представить в виде (17) и ее структура позволяет получать необходимые оценки.

Коэффициенты $\alpha_m(\omega)$ представляют для нас особый интерес, так как из формулы (16) следует, что они не только зависят от соответствующих собственных частот и коэффициентов демпфирования, но еще и достигают на собственных частотах своих максимальных значений.

Действительно, в результате определения экстремальных значений функции $\alpha_m(\omega)$ получим, что при $\omega = \omega_{di}$

$$\alpha_i(\omega_{di}) = \frac{c_i}{\gamma_i}.$$
(19)

На рис. 2 показан пример графиков функций $\alpha_{j}(\omega)$ для системы с тремя степенями свободы при небольших коэффициентах демпфирования.



Рис. 2. Функции α_i(ω) для системы с тремя степенями свободы

Покажем на примере простейшей системы с тремя степенями свободы, как значения коэффициентов демпфирования и расстояния между собственными частотами влияют на результат.

Пример простейшей системы с тремя степенями свободы. Рассмотрим три случая. Зададим формы собственных колебаний, коэффициенты диссипации и собственные частоты следующим образом.

Случай 1. Матрица модальных (собственных) векторов

$$\mathbf{\Phi} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix};$$

значения коэффициентов демпфирования следующие:

$$\gamma_1 = 16, \gamma_2 = \gamma_3 = 18$$

а значения собственных частот составляют

$$\omega_{d1} = 29,5, \omega_{d2} = 52,0, \omega_{d3} = 71,0.$$

Случай 2. Отличается от случая 1 только значением второй собственной частоты, которая составляет $\omega_{d2} = 63,0.$

Случай 3. Отличается от случая 2 значениями коэффициентов диссипации: $\gamma_2 = \gamma_3 = 9$. По формуле (17) построим (с некоторым шагом) матрицы взаимных спектральных плотностей **G**_y(ω) и, произведя сингулярное разложение этих матриц, для каждого из случаев построим графики функций первого сингулярного числа от круговой частоты. Для всех трех случаев приведем также графики функций $\alpha_m(\omega)$ (рис. 3). Видно, что в случае 1

максимумы функции первого сингулярного числа соответствуют собственным частотам, в случае 2 функция $\sigma_1(\omega)$ имеет только два экстремума, а в случае 3, где по сравнению с предыдущим уменьшаются коэффициенты демпфирования, снова определяются все собственные частоты.



Рис. 3. Функции первого сингулярного значения $\sigma_1(\omega)$ и $\alpha_i(\omega)$ (сплошные и пунктирные линии соответственно) для случаев 1 (*a*), 2 (*b*) и 3 (*c*)

Таким образом, некоторая вариация значений параметров может приводить к качественно другому результату. На графиках хорошо видно поведение кривых, соответствующих коэффициентам $\alpha_i(\omega)$. Эти функции показывают, что имеет значение не только расстояние между модами, но и коэффициенты демпфирования, от которых зависит острота пиков функций $\alpha_i(\omega)$.

Построение двусторонней оценки для $\sigma_1(\omega)$

Введем некоторое дополнительное обозначение:

$$\mathbf{A}^2 = \operatorname{diag}(\boldsymbol{\alpha}_{m}). \tag{20}$$

Поскольку коэффициенты $c_m > 0$ и $\gamma_m > 0$ [7] в выражении (16), диагональная матрица A^2 состоит из вещественных положительных элементов.

Матрицу А определим следующим образом:

$$\mathbf{A} = \operatorname{diag}\left(\sqrt{\alpha_m(\omega)}\right). \tag{21}$$

Выражение (17) можно записать в виде

$$\mathbf{G}_{\mathbf{u}}(\boldsymbol{\omega}) = \mathbf{\Phi} \mathbf{A}^2 \mathbf{\Phi}^{\mathrm{H}}.$$
 (22)

Матрица $\mathbf{G}_{\nu}(\omega)$ эрмитова (самосопряженная), поскольку

$$\mathbf{G}_{v}(\omega) = \mathbf{G}_{v}^{H}(\omega).$$

Модальные векторы ϕ_m можно считать нормированными, так как коэффициент α_m , согласно выражению (16), содержит константу c_m , в которую можно ввести нормировочный коэффициент.

Далее, для простоты записи будем опускать написание аргумента ω у функций, от него зависящих, т. е. будем писать **G**_v вместо **G**_v(ω), α_m вместо $\alpha_m(\omega)$ и т. д.

Запишем матрицу \mathbf{G}_{v} в координатной форме:

$$\mathbf{G}_{y} = \begin{bmatrix} \sum_{m=1}^{M} \alpha_{m} (\varphi_{m}^{(1)})^{2} & \sum_{m=1}^{M} \alpha_{m} \varphi_{m}^{(1)} \varphi_{m}^{(2)} & \dots & \sum_{m=1}^{M} \alpha_{m} \varphi_{m}^{(1)} \varphi_{m}^{(N)} \\ \sum_{m=1}^{M} \alpha_{m} \varphi_{m}^{(2)} \varphi_{m}^{(1)} & \sum_{m=1}^{M} \alpha_{m} (\varphi_{m}^{(2)})^{2} & \dots & \sum_{m=1}^{M} \alpha_{m} \varphi_{m}^{(2)} \varphi_{m}^{(N)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{m=1}^{M} \alpha_{m} \varphi_{m}^{(N)} \varphi_{m}^{(1)} & \sum_{m=1}^{M} \alpha_{m} \varphi_{m}^{(N)} \varphi_{m}^{(2)} & \dots & \sum_{m=1}^{M} \alpha_{m} (\varphi_{m}^{(N)})^{2} \end{bmatrix}.$$
(23)

Первое сингулярное значение данной матрицы совпадает с ее спектральным радиусом (это утверждение будет доказано ниже). Но структура этой матрицы достаточно сложна для получения оценок спектрального радиуса, так как ее элементы содержат отдельные компоненты модальных векторов.

Покажем, что посредством некоторой операции данная матрица приводится к «более простому» виду с сохранением спектра.

Рассмотрим следующую матрицу:

$$\mathbf{K} = (\mathbf{A}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{\Phi}\mathbf{A}) \tag{24}$$

и покажем, что матрицы **G**_{*y*} и **K** имеют одни и те же отличные от нуля собственные числа. Для этого докажем следующее вспомогательное утверждение.

Утверждение. Пусть U и V — некоторые прямоугольные матрицы размерности $n \times m$. Тогда ненулевые собственные числа матриц UV^H и V^HU совпадают.

Доказательство. Пусть некоторое ненулевое число λ является собственным значением матрицы UV^H, т. е. существует ненулевой вектор **u**, такой что

$$(\mathbf{U}\mathbf{V}^{\mathrm{H}})\mathbf{u} = \lambda \mathbf{u}.$$

Умножим обе части (25) на V^н слева и, используя свойство ассоциативности матричного умножения, получаем равенство:

$$\mathbf{V}^{\mathrm{H}}\mathbf{U}(\mathbf{V}^{\mathrm{H}}\mathbf{u}) = \lambda(\mathbf{V}^{\mathrm{H}}\mathbf{u}). \tag{26}$$

Поскольку число λ отлично от нуля и вектор **u** – ненулевой, то и вектор **V**^H**u** – ненулевой (это видно, если умножить равенство (26) скалярно само на себя), а значит, число λ оказывается также и собственным числом матрицы **V**^H**U** (по определению собственного числа и вектора).

Утверждение доказано. Если положить, что

$$\mathbf{U} = \mathbf{V} = \mathbf{\Phi} \mathbf{A},\tag{27}$$

то, поскольку справедливо равенство

$$\mathbf{G}_{\mathbf{y}}(\boldsymbol{\omega}) = \mathbf{\Phi} \mathbf{A}^2 \mathbf{\Phi}^{\mathrm{H}} = (\mathbf{\Phi} \mathbf{A})(\mathbf{A} \mathbf{\Phi}^{\mathrm{H}}), \tag{28}$$

из доказанного выше утверждения следует, что матрицы

$$\mathbf{G}_{\mathbf{u}}(\omega) = (\mathbf{\Phi}\mathbf{A})(\mathbf{A}\mathbf{\Phi}^{\mathrm{H}})$$
 и $\mathbf{K} = (\mathbf{A}\mathbf{\Phi}^{\mathrm{H}})(\mathbf{\Phi}\mathbf{A})$

имеют одни и те же собственные числа, отличные от нуля.

Матрицу К, в силу сочетательного закона, можно представить как

$$\mathbf{K} = \mathbf{A}(\mathbf{\Phi}^{\mathrm{H}}\mathbf{\Phi})\mathbf{A}.$$
 (29)

В координатной форме она будет выглядеть следующим образом:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \sqrt{\alpha_1 \alpha_2} (\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2) & \dots & \sqrt{\alpha_1 \alpha_M} (\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_M) \\ \sqrt{\alpha_1 \alpha_2} (\boldsymbol{\varphi}_2, \boldsymbol{\varphi}_1) & \alpha_2 & \dots & \sqrt{\alpha_2 \alpha_M} (\boldsymbol{\varphi}_2, \boldsymbol{\varphi}_M) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{\alpha_1 \alpha_M} (\boldsymbol{\varphi}_M, \boldsymbol{\varphi}_1) & \sqrt{\alpha_2 \alpha_M} (\boldsymbol{\varphi}_M, \boldsymbol{\varphi}_2) & \dots & \alpha_M \end{bmatrix}.$$
(30)

Матрица **K**, составленная из скалярных произведений системы векторов $\sqrt{\alpha_i \phi_i}$, с учетом того, что $||\phi_i|| = 1$, представляет собой матрицу Грама [17], которая, как известно, – эрмитова. Поскольку матрица **K** построена относительно модальных векторов, а модальные векторы линейно независимы, то она оказывается строго положительно-определенной.

Отсюда можно сделать вывод об идентичности сингулярных чисел собственным и, следовательно, равенстве первого сингулярного числа спектральному радиусу матрицы К.

По доказанному выше, матрицы \mathbf{G}_{y} (размерность $N \times N$) и \mathbf{K} (размерность $M \times M$) имеют одни и те же собственные числа, отличные от нуля; но, поскольку размерности матриц различаются, матрица \mathbf{G}_{y} может иметь еще и нулевые собственные числа в случае, когда N > M. Поэтому она положительно полуопределенная. Из положительной полуопределенности и самосопряженности матрицы \mathbf{G}_{y} вытекает идентичность сингулярных чисел собственным и, следовательно, как и в случае матрицы \mathbf{K} , равенство первого сингулярного числа спектральному радиусу.

Согласно теореме об оценках сингулярных чисел [17], первое сингулярное значение эрмитовой матрицы **Р** не может быть меньше модуля ее максимального диагонального элемента:

$$\sigma_1 \ge \max_{1 \le i \le M} \left| \mathbf{P}_{ii} \right|,\tag{31}$$

где σ_1 – первое сингулярное число.

Отсюда получаем нижнюю оценку первого сингулярного значения $\sigma_1(\omega)$ матрицы **K**, а следовательно, и матрицы **G**:

$$\sigma_1 \ge \max_{1 \le i \le M} \alpha_i.$$
(32)

Чтобы получить верхнюю оценку первого сингулярного значения $\sigma_1(\omega)$ матрицы \mathbf{G}_y , рассмотрим матрицу $\mathbf{T} = (\mathbf{\Phi}^{\mathrm{H}} \mathbf{\Phi}) \mathbf{A}^2$ и покажем, что спектр этой матрицы совпадает со спектром матрицы \mathbf{K} , и, следовательно, ненулевые собственные значения матриц \mathbf{T} и $\mathbf{G}_y(\omega)$ также совпадают.

Введем следующее обозначение:

$$\mathbf{C} = \mathbf{\Phi}^H \mathbf{\Phi}. \tag{33}$$

Тогда матрицу К можно записать как

$$\mathbf{K} = \mathbf{ACA},\tag{34}$$

а матрицу Т как

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{C}\mathbf{A}^2. \tag{35}$$

Пусть теперь λ – собственное значение, а **u** – соответствующий собственный вектор матрицы **K**, т. е. **Ku** = λ **u**, и тогда

$$(ACA)u = \lambda u. \tag{36}$$

Умножив равенство (32) слева на \mathbf{A}^{-1} , получим: $\mathbf{CAu} = \lambda \mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}.$ (37)

И далее следуют равенства вида

$$\mathbf{C}\mathbf{A}(\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1})\mathbf{u} = \mathbf{C}\mathbf{A}^{2}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}) = \mathbf{T}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}) = \lambda\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}.$$
 (38)

Таким образом, собственные числа матрицы $T = CA^2$ совпадают с собственными числами матрицы K = ACA.

Распишем матрицу Т в координатной форме:

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \alpha_2(\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2) \dots & \alpha_M(\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_M) \\ \alpha_1(\boldsymbol{\varphi}_2, \boldsymbol{\varphi}_1) & \alpha_2 & \dots & \alpha_M(\boldsymbol{\varphi}_2, \boldsymbol{\varphi}_M) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_1(\boldsymbol{\varphi}_M, \boldsymbol{\varphi}_1) & \alpha_2(\boldsymbol{\varphi}_M, \boldsymbol{\varphi}_2) \dots & \alpha_M \end{bmatrix}.$$
(39)

91

Поскольку спектр матриц **T** совпадает со спектром **K**, все собственные значения положительны, поэтому матрица – положительно-определенная.

В конечномерных пространствах справедливо следующее соотношение между нормами [18]:

$$\rho(\mathbf{T}) \le \|\mathbf{T}\|_{\infty},\tag{40}$$

где $\rho(T)$ – спектральный радиус (максимальное собственное значение) матрицы T; $\|T\|_{\infty}$ – матричная норма, имеющая вид

$$\left\|\mathbf{T}\right\|_{\infty} = \max_{1 \le i \le M} \sum_{j=1}^{M} \left\|\mathbf{T}_{ij}\right|.$$
(41)

Из выражений (39) – (41) вытекает следующая оценка спектрального радиуса матрицы Т: $\sum_{n=1}^{M} \sum_{n=1}^{M} |(n,n)|$ (42)

$$\rho \leq \max_{1 \leq i \leq M} \sum_{j=1}^{M} \alpha_{j} \left| (\boldsymbol{\varphi}_{i} \boldsymbol{\varphi}_{j}) \right|.$$
(42)

Как было показано выше, ненулевые собственные значения матриц G_y и T совпадают, а у матрицы G_y ее первое сингулярное число совпадает со спектральным радиусом. Следовательно, верхняя оценка первого сингулярного значения $\sigma_1(\omega)$ матрицы G_y также определяется выражением (38):

$$\sigma_1 \le \max_{1 \le i \le M} \sum_{j=1}^M \alpha_j \left| (\boldsymbol{\varphi}_i \boldsymbol{\varphi}_j) \right|.$$
(43)

Поскольку векторы ϕ_i — нормированные, скалярное произведение ($\phi_i \phi_j$) представляет собой «косинус угла» между векторами ϕ_i и ϕ_j , т. е. $|(\phi_i \phi_j)| \le 1$ и справедлива следующая запись:

$$\sigma_1 \leq \max_{1 \leq i \leq M} \sum_{j=1}^M \alpha_j \left| (\boldsymbol{\varphi}_i \boldsymbol{\varphi}_j) \right| \leq \sum_{k=1}^M \alpha_k = \operatorname{Tr}(\mathbf{G}_y).$$
(44)

Объединив нижнюю (32) и верхнюю (44) оценки, запишем двустороннюю оценку первого сингулярного значения $\sigma_1(\omega)$ матрицы \mathbf{G}_{ν} :

$$\max_{1 \le i \le M} \alpha_i \le \sigma_1 \le \max_{1 \le i \le M} \sum_{j=1}^M \alpha_j \left| (\boldsymbol{\varphi}_i \boldsymbol{\varphi}_j) \right| \le \sum_{k=1}^M \alpha_k = \operatorname{Tr}(\mathbf{G}_y).$$
(45)

Если модальные векторы взаимно ортогональны, то из (45) последует такая оценка $\sigma_1(\omega)$:

$$\max_{1 \le i \le M} \alpha_i \le \sigma_1(\omega) \le \max_{1 \le i \le M} \alpha_i.$$
(46)

Это, очевидно, означает, что

$$\sigma_1(\omega) = \max_{1 \le i \le M} \alpha_i.$$
⁽⁴⁷⁾

Важно, что эти оценки справедливы для рассматриваемых функций $\sigma_1(\omega)$, $\alpha_m(\omega)$ и $Tr(\mathbf{G}_y(\omega))$ на всех частотах, а не только в окрестностях собственных частот.

Введем обозначение

$$d_i = \min_{j \neq i} \left| \omega_{di} - \omega_{dj} \right|. \tag{48}$$

Тогда для частоты ω_{di} , при всех $j \neq i$, выполняются следующие соотношения:

$$\alpha_{j}(\omega_{di}) \leq \frac{c_{j}\gamma_{j}}{d_{i}^{2} + \gamma_{j}^{2}} = \frac{c_{j}/\gamma_{j}}{(d_{i}/\gamma_{j})^{2} + 1}.$$
(49)

Сравним соотношения (49) с формулой $\alpha_i(\omega_{di}) = c_i / \gamma_i$. Из этого сопоставления видим, что если $d_i / \gamma_j >> 1$ для всех j = 1, 2, ..., M, то

$$\alpha_i(\omega_{di}) \gg \alpha_j(\omega_{di}), \tag{50}$$

и поэтому, если выполнено условие (50), то обе функции $\max_{1 \le i \le M} \sum_{j=1}^{M} \alpha_j \left| (\boldsymbol{\varphi}_i \boldsymbol{\varphi}_j) \right|$ и $\operatorname{Tr}(\mathbf{G}_y)$

приближаются к функции $\max_{1 \le i \le M} \alpha_j$ и, следовательно, мы можем утверждать, что $\sigma_1(\omega)$ – функция первого сингулярного числа SVD-разложения матрицы $G_y(\omega)$ – при выполнении условия (50) также будет приближаться к этой функции, и, как следствие, ее максимумы

будут находиться вблизи модальных частот. Но значения функции $\max_{1 \le i \le M} \sum_{j=1}^{M} \alpha_j \left| (\mathbf{\phi}_i \mathbf{\phi}_j) \right|$ на любой из частот, очевидно, гораздо ближе к функции $\max_{1 \le i \le M} \alpha_j$, чем к функции $\sum_{k=1}^{M} \alpha_k = \operatorname{Tr}(\mathbf{G}_y)$, ввиду того, что $|(\mathbf{\phi}_i \mathbf{\phi}_j)| < 1$.

в качестве иллюстрации этого утверждения, на примере системы с тремя степенями по стремя степенями $\sigma_{k=1} = \sigma_{k} = 11 (G_y)$, ввиду 1010, что $|(\Psi_i, \Psi_j)| < 1$.

свободы показаны графики функции $\sigma_1(\omega)$ и функций нижней и верхних оценок (45) (рис. 4).



Рис. 4. Сопоставление первого сингулярного значения матрицы спектральных плотностей σ₁(ω) с его нижней и верхними оценками по формуле (45) как функциями частоты ω

Заключение

В настоящей работе впервые дана двусторонняя оценка первого сингулярного значения матрицы взаимных спектральных плотностей вибрационных откликов линейной механической системы с многими степенями свободы. Эта оценка служит обоснованием основного критерия метода декомпозиции в частотной области (FDD) для поиска частот собственных колебаний по результатам вибрационных измерений.

Проведенное исследование можно использовать для дальнейшего развития метода FDD, анализа пределов его применимости для механических систем со значительным демпфированием и сопоставления метода FDD с другими методами операционного модального анализа (OMA) при идентификации динамических характеристик сооружений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Brincker R., Zhang L., Andersen P. Modal identification from ambient responses using frequency domain decomposition // Proceedings of the 18th International Modal Analysis Conference (IMAC 18). San Antonio, Texas, USA, February 7–10, 2000. Pp. 625–630.

2. Brincker R., Zhang L., Andersen P. Modal identification of output-only systems using frequency domain decomposition // Smart Materials and Structures. 2001. Vol. 10. No. 3. Pp. 441–445.

3. Brincker R., Ventura C. E., Andersen P. Damping estimation by frequency domain decomposition // Proceedings of the 19th International Modal Analysis Conference (IMAC 19), Kissimmee, Florida, USA. February 5–8, 2001. Pp. 698–703.

4. Brincker R., Andersen P., Jacobsen N-J. Automated frequency domain decomposition for

operational modal analysis // Proceedings of the 25th International Modal Analysis Conference 2007 (IMAC XXIV). In 5 Vols. Vol. 1. Orlando, Florida, USA, February 19–22, 2007. Pp. 275–277.

5. Zhang L., Tamura Y. Damping estimation of engineering structures with ambient response measurements // Proceedings of the 21st International Modal Analysis Conference & Exposition (IMAC XXI) "A Conference & Exposition on Structural Dynamics". In 3 Vols. Vol. 1. Kissimmee, Florida, USA, February 3–6, 2003. Pp. 1023–1029.

6. **Brincker R., Zhang L.** Frequency domain decomposition revisited // Proceedings of the 3rd International Operational Modal Analysis Conference (IOMAC), Portonovo (Ancona), Italy. May 4–6, 2009. Vol. 1. Pp. 615–626.

7. Brincker R., Ventura C. Introduction to Operational Modal Analysis. Hoboken, New Jersey, USA: John Wiley and Sons, Ltd., 2015. 360 p.

8. Rainieri C., Fabbrocino G. Operational Modal Analysis of civil engineering structures: An introduction and guide for applications. New York: Springer, 2014. 322 p.

9. ARTeMIS Modal. Software for operational modal analysis and experimental modal analysis. Режим доступа: http://www.svibs.com/. Дата последнего обращения: 20.01.2023.

10. Chopra A. K. Dynamics of structures – theory and applications to earthquake engineering. 4th edition. Hoboken, New Jersey, USA: Prentice Hall, 2012. 212 p.

11. Amador S., Juul M., Friis T., Brincker R. Application of Frequency Domain Decomposition Identification technique to half spectral densities // Topics in Modal Analysis & Testing. Vol. 9. Conf. Proc. of the Soc. for Experimental Mechanics. Edited by M. Mains, B. J. Dilworth. Chapter 39. The Society for Experimental Mechanics, Inc. New York: Springer, Cham, 2019. Pp. 343–346.

12. Hasan M. D. A., Ahmad Z. A. B., Leong M. S., Hee L. M. Enhanced frequency domain decomposition algorithm: A review of a recent development for unbiased damping ratio estimates // Journal of Vibroengineering. 2018. Vol. 20. No. 5. Pp. 1919–1936.

13. Lang G. F. Matrix madness and complex confusion. Review of complex modes from multiple viewpoints // Sound & Vibrations. 2012. November – Structural Analysis. Pp. 8–12.

14. **Tarpo P., Olsen P., Amador S., Juul M., Brincker R.** On minimizing the influence of the noise tail of correlation functions in operational modal analysis // Procedia Engineering. 2017. Vol. 199. Pp. 1038–1043.

15. **Ильин В. А., Позняк Э. Г.** Линейная алгебра. 6-е изд., стер. М.: Физматлит, 2007. С. 111.

16. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. М.: Физматлит, 2010. 560 с.

17. Карчевский Е. М., Карчевский М. М. Лекции по линейной алгебре и аналитической геометрии. 2-е изд. СПб.: Изд-во «Лань», 2018. 424 с.

18. **Фомин В. И.** О нижних линейных оценках спектрального радиуса нормальной матрицы // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. 2001. Т. 6. № 2. С. 145–146.

REFERENCES

1. Brincker R., Zhang L., Andersen P., Modal identification from ambient responses using frequency domain decomposition, In: Proc. 18th Int. Modal Analysis Conf. (IMAC 18), San Antonio, Texas, USA, Febr. 7–10 (2000) 625–630.

2. Brincker R., Zhang L., Andersen P., Modal identification of output-only systems using frequency domain decomposition, Smart Mater. Struct. 10 (3) (2001) 441–445.

3. Brincker R., Ventura C. E., Andersen P., Damping estimation by frequency domain decomposition, In: Proc. 19th Int. Modal Analysis Conf. (IMAC 19), Kissimmee, Florida, USA, Febr. 5–8 (2001) 698–703.

4. Brincker R., Andersen P., Jacobsen N-J., Automated frequency domain decomposition for operational modal analysis, In: Proc. 25th Int. Modal Analysis Conf. 2007 (IMAC XXV) In 5 Vols. Vol. 1, Orlando, Florida, USA, Febr. 19–22, 2007. (2007) 275–277.

5. Zhang L., Tamura Y., Damping estimation of engineering structures with ambient response measurements, In: Proc. 21st Int. Modal Analysis Conf. & Expos. 2003 (IMAC XXI) "A Conf. & Expos. on Structural Dynamics". In 3 Vols. Vol. 1. Kissimmee, Florida, USA, Febr. 3–6, 2003 (2003) 1023–1029.

6. Brincker R., Zhang L., Frequency domain decomposition revisited, In: Proc. 3rd Int. Operational Modal Analysis Conf. (IOMAC), Portonovo (Ancona), Italy, May 4–6, 2009. (2009) 615–626.

7. Brincker R., Ventura C., Introduction to operational modal analysis, John Wiley and Sons, Ltd., Hoboken, New Jersey, USA, 2015.

8. Rainieri C., Fabbrocino G., Operational modal analysis of civil engineering structures: An introduction and guide for applications, Springer, New York, 2014.

9. ARTeMIS Modal. Software for Operational Modal Analysis and Experimental Modal Analysis. URL: http://www.svibs.com/. Date of last access: 20.01.2023.

10. Chopra A. K., Dynamics of structures – theory and applications to earthquake engineering, 4th edition, Prentice Hall, Hoboken, New Jersey, USA, 2012.

11. Amador S., Juul M., Friis T., Brincker R., Application of Frequency Domain Decomposition Identification technique to half spectral densities, In book: "Topics in Modal Analysis & Testing". Vol. 9. Conf. Proc. of the Soc. for Experimental Mechanics. Ed. by M. Mains, B. J. Dilworth. Ch. 39. The Society for Experimental Mechanics, Inc. Springer, Cham, New York (2019) 343–346.

12. Hasan M. D. A., Ahmad Z. A. B., Leong M. S., Hee L. M., Enhanced frequency domain decomposition algorithm: A review of a recent development for unbiased damping ratio estimates, J. Vibroengineering. 20 (5) (2018) 1919–1936.

13. Lang G. F., Matrix madness and complex confusion. Review of complex modes from multiple viewpoints, Sound Vib. (November – Structural Analysis) (2012) 8–12.

14. **Tarpo P., Olsen P., Amador S., et al.,** On minimizing the influence of the noise tail of correlation functions in operational modal analysis, Proc. Eng. 199 (2017) 1038–1043.

15. Ilyin V. A., Poznyak E. G., Linear algebra, Mir Publishers, Moscow, 1987.

16. Gantmakher F. R., The theory of matrices, Chelsea Pub. Co. Collection inlibrary, New York, 1959.

17. Karchevskiy E. M., Karchevskiy M. M., Lektsii po lineynoy algebre i analiticheskoy geometrii [Lectures on linear algebra and analytical geometry], Lan Publishing, St. Petersburg, 2018 (in Russian).

18. Fomin V. I., On the lower linear bound of the spectral radius for a normal matrix, Tambov University Reports. Series: Natural and Technical Sciences. 6 (2) (2001) 145–146 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АНДРИАНОВА Елена Александровна — научный сотрудник АО «Всероссийский научно-исследовательский институт гидротехники (ВНИИГ) им. Б. Е. Веденеева», Санкт-Петербург, Россия. 195220, Россия, г. Санкт-Петербург, Гжатская ул., 21

elena-andrianova@bk.ru ORCID: 0000-0001-9199-6875

НОВИЦКИЙ Дмитрий Викторович — ведущий специалист АО «ВНИИГ им. Б. Е. Веденеева», Санкт-Петербург, Россия. 195220, Россия, г. Санкт-Петербург, Гжатская ул., 21 ndv63@yandex.ru ORCID: 0000-0002-4870-4096

ОНИЩУК Валерий Сергеевич — научный сотрудник АО «ВНИИГ им. Б. Е. Веденеева», Санкт-Петербург, Россия. 195220, Россия, г. Санкт-Петербург, Гжатская ул., 21 valery.onischuk@gmail.com ORCID:0000-0002-5460-1309

THE AUTHORS

ANDRIANOVA Elena A. "B. E. Vedeneev VNIIG", JSC 21, Gzhatskaya St., St. Petersburg, 195220, Russia elena-andrianova@bk.ru ORCID: 0000-0001-9199-6875 NOVITSKII Dmitrii V. *"B. E. Vedeneev VNIIG", JSC* 21, Gzhatskaya St., St. Petersburg, 195220, Russia ndv63@yandex.ru ORCID: 0000-0002-4870-4096

ONISCHUK Valeriy S. "B. E. Vedeneev VNIIG", JSC 21, Gzhatskaya St., St. Petersburg, 195220, Russia valery.onischuk@gmail.com ORCID: 0000-0002-5460-1309

Статья поступила в редакцию 22.08.2022. Одобрена после рецензирования 15.11.2022. Принята 15.11.2023. Received 22.08.2022. Approved after reviewing 15.11.2022. Accepted 15.11.2023

Биофизика и медицинская физика

Научная статья УДК 517.95+577.3+535.8+519.6 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16108

ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ ПО РАЗМЕРАМ ДЛЯ КЛЕТОК КРОВИ *IN VIVO*

А. П. Головицкий¹, В. Г. Концевая², К. Г. Куликов¹

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия;

² Псковский государственный университет, г. Псков, Россия

□ nkoncevoi@mail.ru

Аннотация. Работа посвящена построению математической модели для определения функции распределения клеток крови по размерам. После рассмотрения задачи светорассеяния на сферулированной частице, обладающей многослойной структурой и произвольно ориентированной в пространстве, определен коэффициент отражения плоской волны от модели биоструктуры с плавнонерегулярным строением. Такой подход позволил построить модель указанной структуры, имеющей несколько биослоев. Исходя из отражения гауссова пучка от этой структуры была смоделирована функция распределения частиц по размерам. Привлекались такие методы, как математический аппарат Т-матрицы, преобразование Гюйгенса – Френеля, метод регуляризации Тихонова. Предложенная впервые математическая модель позволила теоретически рассчитать функции распределения по размерам сферулированных частиц, имитирующих форменные элементы крови для случая *in vivo*.

Ключевые слова: лазерная технология, метод регуляризации Тихонова, метод Тматриц, преобразование Гюйгенса – Френеля

Для цитирования: Головицкий А. П., Концевая В. Г., Куликов К. Г. Электродинамическая модель определения функции распределения частиц по размерам для клеток крови *in vivo* // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 1. С. 97–110. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16108

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии СС BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16108

AN ELECTRODYNAMIC MODEL FOR DETERMINING THE DISTRIBUTION FUNCTION OF PARTICLES BY SIZE FOR BLOOD CELLS *IN VIVO*

A. P. Golovitskii¹, V. G. Kontsevaya^{2⊠}, K. G. Kulikov¹

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

² Pskov State University, Pskov, Russia

[™] nkoncevoi@mail.ru

Abstract. This paper is devoted to construction of a mathematical model for determining the distribution function of blood cells by size. After considering the problem of light scattering on a spheroidizied particle with a multilayer structure and arbitrary oriented in space, the reflec-

© Головицкий А. П., Концевая В. Г., Куликов К. Г., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

tion coefficient of a plane wave from the biostructure model with a smoothly irregular structure has been found. This approach made it possible to construct a model of the said structure with several layers. Based upon the reflection of a Gaussian beam from this structure the distribution function of blood cells by size was obtained. Some methods such as the T-matrices apparatus, the Huygens – Fresnel transform, the Tikhonov's regularization were involved. The mathematical model proposed for the first time allowed theoretical calculation of the size distribution functions of spheroidizied particles simulating blood cells for the case in vivo.

Keywords: laser technology, Tikhonov's regularization method, T-matrices method, Huygens – Fresnel transform

For citation: Golovitskii A. P., Kontsevaya V. G., Kulikov K. G., An electrodynamic model for determining the distribution function of particles by size for blood cells *in vivo*, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics.16 (1) (2023) 97–110. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16108

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons. org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Лазерные технологии в последнее время стали незаменимы для решения разнообразных задач в широком спектре научных и технических отраслей от физики и химии до медицины и биологии. Уровень вовлеченности лазерных технологий в проблемы медицинской диагностики, терапии и хирургии неуклонно становится выше, и данное направление бесспорно оценивается как крайне перспективное и актуальное.

По ряду причин (относительная безопасность, снижение уровня травматичности и рисков инфицирования и т. п.) актуально и востребовано развитие неинвазивных методов диагностики и лечения заболеваний; среди них значительное место занимают оптические. Определение размеров и формы эритроцитов, а также их деформируемости и агрегационной способности, регистрация уровня глюкозы в крови человека, измерение скорости капиллярного кровотока — эти и другие анализы и обследования представляют большую важность для медицины при обеспеченности их быстрого бесконтактного выполнения.

Биологические ткани представляют собой оптически неоднородные поглощающие среды со средним показателем преломления, превышающим этот показатель для воздуха. Следует отметить, что клеточные мембраны, ядра и органеллы, такие как митохондрии, а также гранулы меланина в клетках служат основными рассеивателями во многих биотканях [1 - 3]. Имеются данные о том, что хаотизация клеточных структур увеличивается при повышении степени малигнизации (злокачественности) новообразований ткани; при этом возрастает размер отдельных клеточных ядер относительно среднего значения, одновременно может изменяться и относительный показатель преломления среды ядроцитоплазма [1].

В реалиях современной медицинской практики анализ крови — это один из базовых компонентов в диагностике различных патологических состояний. Крайне информативным в этом плане оказывается изучение оптических свойств так называемых форменных элементов крови, к которым относят эритроциты, лейкоциты и тромбоциты (в традиционном понимании). Однако эритроциты, или красные кровяные клетки, составляют более 99 % гематокрита (процентное содержание форменных элементов крови в ее общем объеме). Как хорошо известно, в процессе реализации транспортной функции эритроциты непрерывно участвуют в поддержании жизнедеятельности организма в целом. Соответственно систематические отклонения в состоянии форменных элементов, образующих основную массу клеток крови, явно влияют на процессы жизнедеятельности организма.

В патогенезе существенного числа заболеваний, осложнений, патологических состояний ученые и врачи приписывают главенствующую роль микроциркуляторным и гемореологическим дисфункциям. Функциональные свойства эритроцитов в формировании подобных патологических состояний играют зачастую существенную, а порой и решающую роль [4].

© Golovitskii A. P., Kontsevaya V. G., Kulikov K. G., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Очевидно, что эритроцит обладает вполне определенными механическими и геометрическими свойствами, а также показателем преломления. Вполне закономерно возникает как теоретический, так и практический интерес в исследовании характерных свойств эритроцитов. Интересно, например, узнать, каковы размеры эритроцитов, их агрегационные свойства, показатель преломления, особенно в случаях различных патологических отклонений в состояниях кроветворной системы.

Стандартный развернутый клинический анализ крови расценивается современными учеными как предельно динамичный индикатор физиологических процессов, происходящих в организме, находящемся в здоровом либо патологическом состоянии. Как известно, этот инструмент диагностики включает в себя и измерение ширины распределения эритроцитов по размерам. Тот факт, что этот показатель входит в стандартный развернутый анализ крови, прямо подтверждает важность информации о характере распределения эритроцитов по размерам в клинической практике.

В ряде заболеваний, таких как железодефицитная или серповидно-клеточная анемия, эллиптоцитоз, сфероцитоз и т. п. [5], возможность своевременного максимально оперативного и качественного измерения распределения по размерам форменных элементов крови приобретает принципиальное значение.

Таким образом, задача разработки эффективных и оперативных методов нахождения функций распределения по размерам сферуллированных частиц, моделирующих форменные элементы крови, представляется весьма важной и актуальной. Параметры эритроцитов, в частности их размеры, можно определять при помощи светорассеяния [3].

Таким образом, постановка и решение данной задачи как оптической может, на наш взгляд, иметь перспективу в таких важных областях знания, как биомедицина и биофизика.

Здесь становится очевидной актуальность поиска модели, обладающей рядом следующих необходимых свойств:

достаточная степень информативности;

современная по уровню, но не наделенная излишней сложностью;

оперативность ее применения, а значит – без ресурсоемких вычислений.

Цель данного исследования — моделирование функции распределения сферуллированных частиц по размерам.

Материал статьи изложен следующим образом. Сначала рассмотрена задача светорассеяния на *j*-ой сферулированной частице, имеющей многослойную структуру, произвольно ориентированной в пространстве, с учетом многократного рассеяния.

Далее идет обращение к вопросу определения коэффициента отражения плоской волны от модели биоструктуры, особенность которой — плавнонерегулярное строение. При описанном подходе вполне удается реализовать более чем удовлетворительную модель биологической структуры, имеющей несколько биослоев.

В рамках предложенной модели рассмотрен вопрос об отражении так называемого гауссова пучка. В ходе изложения мы естественным образом переходим к вопросу моделирования функции распределения по размерам сферулированных частиц.

Матричная формулировка рассеяния для *j*-ой сферуллированной частицы

В большинстве работ с привлечением теории Ми эритроцит рассматривается как однородная сфера с объемом, равным среднему объему эритроцита. Эритроцит можно рассматривать как однородный рассеиватель в силу особенностей его структуры. Такое представление эритроцита является адекватным и плодотворным подходом к решению многих задач биомедицинской оптики. Предположение о сферической форме клеток позволяет верно предсказать значение поперечного сечения рассеяния эритроцитов [3]. Фазовую функцию рассеяния эритроцитов можно успешно аппроксимировать в рамках теории Ми [1, 3]. Кроме того, теорию Ми можно успешно применять для описания однократного рассеяния падающего лазерного излучения, если исследуются случайно ориентированные эритроциты или цельная кровь.

Как было отмечено выше, достаточно распространено построение моделей, в которых форма форменных элементов крови предполагается сферической. В ряде задач подобное приближение дает вполне удовлетворительные результаты, тем более что эритроциты

легко подвержены деформации и не сохраняют постоянно свою форму двояковыпуклого диска.

Примем в качестве базовой сферическую модель эритроцита; остальные же клетки крови будем описывать сферами с концентрическими включениями [3].

Решение задачи рассеяния лазерного излучения на агрегированном комплексе многослойных частиц, служащем моделью агрегатов в кровяной среде, реализуется в соответствии со строгой теорией многократного рассеяния. Привлечение такого математического аппарата, как Т-матрицы, позволяет связывать коэффициенты разложения двух электромагнитных полей: рассеянного модельным агрегатом и падающего на него. Взаимосвязанность рассеянных полей при использовании подобной математической концепции реализуется при учете многократного взаимодействия между элементами агрегата.

Т-матрицы всех элементов агрегата не зависят от падающего излучения, если рассматривать рассеяние на сферических объектах. В этом случае появляется возможность их расчета в локальной системе координат, связанной с центром выбранной частицы.

Приведем конечное выражение для двух составляющих рассеянного (scattered) поля $E_{scat(\theta)}$ и $E_{scat(\phi)}$ в дальней зоне (подробный вывод можно найти в статье [6]):

$$E_{scat(\theta)} \sim E_0 \frac{e^{ikr}}{-ikr} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{(2n+1)}{n(n+1)} \Big[a_{mn}^j \tau_n - b_{mn}^j \pi_n \Big], \tag{1}$$

$$E_{scat(\phi)} \sim E_0 \frac{e^{ikr}}{-ikr} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{(2n+1)}{n(n+1)} \Big[a_{mn}^j \pi_n - b_{mn}^j \tau_n \Big],$$
(2)

где E_0 – амплитуда волны, рассеянной на сферической частице; **r** – радиус-вектор; **k** – волновой вектор; *m*, *n* – номера гармоник; θ – угол падения лазерного луча относительно оси *z*; φ – полярный угол; $\tau_n = \partial P_n(\cos \theta) / \partial \theta$, $\pi_n = P_n(\cos \theta) / \sin \theta$ – полиномы Лежандра; коэффициенты a_{mn}^j, b_{mn}^j определены в статье [6].

Выражения для магнитного поля *Н* можно получить, используя концептуально аналогичные рассуждения.

Для задачи рассеяния на многослойной сфере мы использовали математическую концепцию, подробно изложенную в статье [7].

Используя выражение (1) как основу для θ-составляющей интенсивности рассеянного излучения, записываем следующее выражение:

$$I_{scat(\varphi)}(\rho,\lambda) = I_i \cdot \left| E_{scat(\varphi)} \right|^2,$$
(3)

где I_i – интенсивность падающего потока излучения, ρ – приведенный радиус частицы ($\rho = kl$, l – размерный радиус частицы).

Отражение плоской волны от плавнонерегулярного слоя

В рамках решения задачи об отражении плоской волны от плавно нерегулярного слоя (рис. 1), моделирующего рассматриваемую модельную биологическую структуру, уточним выражение для коэффициента отражения от слоя, основной характерной особенностью которого является медленно изменяющаяся толщина. Математическая модель содержит следующие биослои (см. рис. 1):

воздушная среда (1), через которую проходит луч лазера;

поверхностный слой дермы – эпидермис (2);

верхний слой дермы (3);

слой, который состоит из сферуллированных частиц, которые моделируют форменные элементов крови (4);

нижние слои дермы (5).

С целью достижения наибольшего соответствия структуре реального объекта моделирования, границы разделения слоев можно представить в виде волнистых поверхностей

следующим образом:

$$z_i = H_i(x, y), \ H_i = c_i \sin(a_i x + b_i y),$$
 (4)

где c_i, a_i, b_i — произвольно задаваемые константы, причем $a_i \ll 1, b_i \ll 1, c_i \ll 1, i = \overline{1,3}$.





Пусть на моделируемый слой падает под углом θ плоская *s*- или *p*- поляризованная волна. Рассмотрим для определенности случай *p*-поляризации.

Отраженные поля следует искать в виде волн с быстро осциллирующими фазами и медленно меняющимися амплитудами. Электрические компоненты полей, отраженных от 1-го, 2-го и 3-го слоев, имеют вид

$$E_{1} = \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{inc}(\xi_{1},\xi_{2},\xi_{3})\right] + \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{1ref}(\xi_{1},\xi_{2},\xi_{3})\right]A,$$
(5)

$$E_{2} = \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{2elap}(\xi_{1},\xi_{2},\xi_{3})\right]B^{+} + \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{3ref}(\xi_{1},\xi_{2},\xi_{3})\right]B^{-},$$
(6)

$$E_{3} = \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{3elap}(\xi_{1},\xi_{2},\xi_{3})\right]C^{+} + \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{3ref}(\xi_{1},\xi_{2},\xi_{3})\right]C^{-},$$
(7)

а компоненты поле
й $E_{\rm 4}$ и $E_{\rm 5}$ будут иметь следующие представления:

$$E_4 = \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{4elap}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\right]D^+ + \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{5ref}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\right]D^- + E_{4scat\varphi}(\xi_1,\xi_2,\xi_3), \quad (8)$$

$$E_{5} = \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{5elap}(\xi_{1},\xi_{2},\xi_{3})\right]E,$$
(9)

где $A, B^{\pm}, C^{\pm}, D^{\pm}$ – амплитуды; ε – малый параметр; $\xi_1 = \varepsilon x, \xi_2 = \varepsilon y, \xi_3 = \varepsilon z$ – сжатые координаты; $\tau_{inc}(\xi_1, \xi_2, \xi_3), \tau_{1rel}(\xi_1, \xi_2, \xi_3), \tau_{2elap}(\xi_1, \xi_2, \xi_3), \tau_{3rel}(\xi_1, \xi_2, \xi_3$

Условие (8) содержит слагаемое $E_{4scat(\phi)}(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$, учитывающее рассеяние (scat) в 4-м слое на неоднородностях (сферических частицах).

Следующий шаг состоит в нахождении амплитуд $A, B^{\pm}, C^{\pm}, D^{\pm}$. Распишем их в виде рядов по степеням малого параметра ε .

Рекуррентную систему уравнений для пошагового определения членов ряда A, B, C^{\pm}, D^{\pm} можно получить, если использовать стандартные условия непрерывности для касательных компонент электрического и магнитного полей на границах раздела сред с учетом выражений (5) — (9). Из записанной системы уравнений можно получить коэффициент отражения поля в первом приближении.

Далее встает задача нахождения отраженного поля для гауссова пучка. Чтобы получить искомое поле в исходном сечении (в рамках выбранного метода), предполагается использовать обратное преобразование и далее интегральное преобразование Гюйгенса – Френеля [8]. Принципиально значимо количество штрихов в системах координат: с направлением падения пучка связана система (x', y', z'), а с отраженным полем – (x'', y'', z'); отраженное поле распространяется по линии пучка z'' = 0. Искомое поле в исходном сечении выражается следующим образом:

$$\begin{split} E_{ref} &= \frac{A_{\overline{00}}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x}) \Phi(\xi_{1}^{n}, \xi_{2}^{n})}{\alpha} - \\ &- \frac{\varepsilon_{x}}{\alpha} \bigg[A_{\overline{01}}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x}) + \frac{k_{13}}{kn_{1}} \xi_{1}^{n} A_{0000}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x}) \bigg] \Phi(\xi_{1}^{n}, \xi_{2}^{n}) - \\ &- \frac{\varepsilon_{y}}{\alpha} \bigg[A_{\overline{10}}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x}) + \frac{k_{23}}{kn_{1}} \xi_{2}^{n} A_{0000}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x}) \bigg] \Phi(\xi_{1}^{n}, \xi_{2}^{n}) - \\ &- \frac{\varepsilon_{x}}{\alpha} \bigg[A_{\overline{11}}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x}) + \frac{k_{13}}{kn_{1}} \xi_{1}^{n} A_{0000}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x}) \bigg] \Phi(\xi_{1}^{n}, \xi_{2}^{n}) - \\ &- \frac{\varepsilon_{x}}{\alpha} \bigg[A_{\overline{11}}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x}) + \frac{k_{13}}{kn_{1}} \xi_{1}^{n} A_{0000}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x}) \bigg] \Phi(\xi_{1}^{n}, \xi_{2}^{n}) - \\ &- \frac{\varepsilon_{x}}{\alpha} \bigg[A_{\overline{11}}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x}) + \frac{k_{13}}{kn_{1}} \xi_{1}^{n} A_{0000}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x}) \bigg] \Phi(\xi_{1}^{n}, \xi_{2}^{n}) - \\ &- \bigg[\frac{\varepsilon_{x}}{\alpha} \bigg[A_{\overline{10}}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x}) + \frac{\partial A_{\overline{00}}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x}) \bigg] \frac{\partial \Phi(\xi_{1}^{n}, \xi_{2}^{n})}{\partial \xi_{1}^{n}} \bigg] - \\ &- \bigg\{ \frac{\varepsilon_{y}}k_{y}^{0}}{(ikn_{1}\alpha} \bigg[\frac{\partial A_{\overline{00}}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x})}{\partial k_{1x}} + \frac{\partial A_{\overline{00}}(\xi_{1}^{n} + \xi_{2}^{n}, k_{1y}, k_{1x})}{\partial k_{1y}} \bigg] \frac{\partial \Phi(\xi_{1}^{n}, \xi_{2}^{n})}{\partial \xi_{1}^{n}} \bigg\} + O(\varepsilon^{2}), \end{split}$$

где формулы $kn_1x' = k_{11}x + k_{12}y + k_{13}z$, $kn_1y' = k_{21}x + k_{22}y + k_{23}z$, $kn_1z' = k_{31}x + k_{32}y + k_{33}z$, $k_{11} = kn_1a_{11}, k_{12} = kn_1a_{12}, k_{13} = kn_1a_{13}, k_{21} = kn_1a_{21}, k_{22} = kn_1a_{22}, k_{23} = kn_1a_{23}, k_{31} = kn_1a_{31}, k_{32} = kn_1a_{32}, k_{33} = kn_1a_{33}, a_{11} = \cos\varphi \cos\psi - \sin\varphi \cos\theta \sin\psi, a_{12} = \sin\varphi \cos\psi - \cos\varphi \cos\theta \sin\psi, a_{13} = \sin\theta \sin\psi, a_{21} = \cos\varphi \sin\psi + \sin\varphi \cos\theta \cos\psi, a_{22} = \sin\varphi \sin\psi + \cos\varphi \cos\theta \cos\psi, a_{23} = \sin\theta \cos\psi, a_{31} = \sin\varphi \sin\theta, a_{32} = \cos\varphi \sin\theta, a_{33} = \cos\theta$ устанавливают связь между системами координат (x', y', z') и (x'', y'', z'). Гауссов пучок $\Phi(\xi_1'', \xi_2'')$ и коэффициенты, полученные из рекуррентной системы уравнений для последовательного определения членов рядов (в эти ряды разложены амплитуды $A_{\overline{00}}, A_{\overline{10}}, A_{\overline{11}}, A_{0000}$ по степеням малого параметра є) определены в статье [6].

Геометрическая специфика строения границ отражающей среды, характерные свойства самого падающего пучка (распределение поля в фиксированном сечении и угол падения) будут иметь воздействие на определенные параметры отраженного поля. Отраженное поле представимо в виде основного и поправочного членов асимптотики по малому параметру с погрешностью $O(\varepsilon^2)$.

Далее, если считать параметры рассматриваемой системы зафиксированными, то искажения поля падающего пучка при отражении можно считать зависимыми от двух доминирующих факторов на фоне остальных.

Первый из этих воздействующих моментов в выражении (10) представлен выражениями в квадратных скобках:

$$\begin{split} & \frac{\varepsilon_x}{\alpha} \bigg[A_{\hat{01}}(\xi_1^{\prime\prime\prime} + \xi_2^{\prime\prime\prime}, k_{1y}, k_{1x}) + \frac{k_{13}}{kn_1} \xi_1^{\prime\prime} A_{0000}(\xi_1^{\prime\prime\prime} + \xi_2^{\prime\prime\prime}, k_{1y}, k_{1x}) \bigg] \Phi(\xi_1^{\prime\prime}, \xi_2^{\prime\prime}) - \\ & - \frac{\varepsilon_y}{\alpha} \bigg[A_{\hat{10}}(\xi_1^{\prime\prime\prime} + \xi_2^{\prime\prime\prime}, k_{1y}, k_{1x}) + \frac{k_{23}}{kn_1} \xi_2^{\prime\prime} A_{0000}(\xi_1^{\prime\prime\prime} + \xi_2^{\prime\prime\prime}, k_{1y}, k_{1x}) \bigg] \Phi(\xi_1^{\prime\prime}, \xi_2^{\prime\prime}) - \\ & - \frac{\varepsilon_x \varepsilon_y}{\alpha} \bigg[A_{\hat{11}}(\xi_1^{\prime\prime\prime} + \xi_2^{\prime\prime\prime}, k_{1y}, k_{1x}) + \frac{k_{13}}{kn_1} \xi_1^{\prime\prime} A_{0000}(\xi_1^{\prime\prime\prime} + \xi_2^{\prime\prime\prime}, k_{1y}, k_{1x}) \bigg] \Phi(\xi_1^{\prime\prime}, \xi_2^{\prime\prime}) - \\ & - \frac{\varepsilon_x \varepsilon_y}{\alpha} \bigg[A_{\hat{11}}(\xi_1^{\prime\prime\prime} + \xi_2^{\prime\prime\prime}, k_{1y}, k_{1x}) + \frac{k_{13}}{kn_1} \xi_1^{\prime\prime} A_{0000}(\xi_1^{\prime\prime\prime} + \xi_2^{\prime\prime\prime}, k_{1y}, k_{1x}) \bigg] \Phi(\xi_1^{\prime\prime}, \xi_2^{\prime\prime}) - \\ & - \frac{\varepsilon_x \varepsilon_y}{\alpha} \bigg[\frac{k_{23}}{kn_1} \xi_2^{\prime\prime} A_{0000}(\xi_1^{\prime\prime\prime} + \xi_2^{\prime\prime\prime}, k_{1y}, k_{1x}) \bigg] \Phi(\xi_1^{\prime\prime}, \xi_2^{\prime\prime}). \end{split}$$

Отраженное поле здесь можно получить, если умножить выражение для падающего поля пучка на локальный коэффициент отражения плоской волны единичной амплитуды, падающей на среду под тем же углом, что и пучок.

Выражения в фигурных скобках в формуле (10) описывают поперечную диффузию амплитуды:

$$\left\{ \frac{\varepsilon_{x}k_{x}^{0}}{ikn_{1}\alpha} \left[\frac{\partial A_{\overline{00}}(\xi_{1}^{n^{*}} + \xi_{2}^{n^{*}}, k_{1y}, k_{1x})}{\partial k_{1x}} + \frac{\partial A_{\overline{00}}(\xi_{1}^{n^{*}} + \xi_{2}^{n^{*}}, k_{1y}, k_{1x})}{\partial k_{1y}} \right] \frac{\partial \Phi(\xi_{1}^{n}, \xi_{2}^{n^{*}})}{\partial \xi_{1}^{n^{*}}} \right\} - \left\{ \frac{\varepsilon_{y}k_{y}^{0}}{ikn_{1}\alpha} \left[\frac{\partial A_{\overline{00}}(\xi_{1}^{n^{*}} + \xi_{2}^{n^{*}}, k_{1y}, k_{1x})}{\partial k_{1x}} + \frac{\partial A_{\overline{00}}(\xi_{1}^{n^{*}} + \xi_{2}^{n^{*}}, k_{1y}, k_{1x})}{\partial k_{1y}} \right] \frac{\partial \Phi(\xi_{1}^{n}, \xi_{2}^{n^{*}})}{\partial \xi_{2}^{n^{*}}} \right\}.$$

Подобный процесс возникает при отражении вследствие искажения пучка (отклонение от направления распространения отраженного пучка). Выражения в квадратных скобках целесообразно назвать геометрическим фактором, а в фигурных скобках – диффузным.

Итак, получены и представлены формулы для отраженного поля гауссова пучка для случая *p*-поляризации. При постановке задачи предполагались произвольными такие характеристики системы, как угол набега пучка и показатель преломления отражающего слоя. Данные результаты представляют собой асимптотику по малому параметру, имеющему смысл отношения характерного масштаба изменения профиля границы тела к характерному расстоянию.

Следует отметить, что формулы неравномерны по параметру угла падения, изменение же остальных параметров приводит к конечному результату. Если рассматривать процесс роста угла падения в рамках представленного выражения, то поправочные члены асимптотики начинают расти, что свидетельствует о постепенном увеличении искажения пучка. Полученные формулы потеряют смысл, если угол падения будет увеличен до 90°. Отраженное поле в этом случае рассеивается в широкий диапазон углов (расплывается в пространстве). Решений же волнового уравнения, которые бы имели характер локализованного пучка в пространстве, распространяющегося в определенном направлении от отражательной поверхности, не существует. Следовательно, справедливость отражательных формул ограничена угловым диапазоном от 0 до 89°. Погрешность полученных вычислений, согласно нашим оценкам, лежит на уровне порядка квадратичных членов асимптотики. Аналогичными рассуждениями можно получить отраженное поле и для магнитной компоненты поля.

Функция распределения сферулированных частиц по размерам

Поставим обратную задачу, в которой известной будет интенсивность рассеяния на агрегированной совокупности сферулированных частиц. Последние располагаются в слое и служат моделью агрегата форменных элементов крови (см. выражение (11)). Исходя из известной интенсивности, но измеренной с некой погрешностью, мы должны найти распределение эритроцитов по размерам для случая *in vivo*.

Формулировка поставленной задачи следующая:

Определить функцию распределения по размерам форменных элементов крови для случая in vivo. Для решения задачи необходимо найти отраженное поле \mathbf{E}_{blood} в слое, состоящем из сферуллированных частиц различного размера и коэффициентов преломления. Оно будет определяться следующим образом:

$$\mathbf{E}_{blood} = \mathbf{E}_{ref} - \mathbf{E}_{skin},$$

где \mathbf{E}_{ref} , \mathbf{E}_{skin} — соответственно отраженные поля от всей моделируемой оптической системы и от слоев последовательно (эпидермис, верхний слой, дерма).

При этом интенсивность отраженного поля в слое, состоящем из сферуллированных частиц, будет выражаться следующим образом:

$$I_{blood}(\boldsymbol{\Theta},\boldsymbol{\lambda}) = \left| E_{blood\perp} \right|^2 + \left| E_{blood\parallel} \right|^2, \tag{11}$$

где $E_{blood\perp} = E_{z(blood)} \cos \theta + E_{x(blood)} \sin \theta$, $E_{blood\parallel} = E_{z(blood)} \sin \theta - E_{x(blood)} \cos \theta$.

Компоненты E_r и E_z следуют выражениям

$$\frac{\partial E_{z(blood)}}{\partial y} - \frac{\partial E_{y(blood)}}{\partial z} = -i\omega\mu_0\mu_jH_{x(blood)}, \quad \frac{\partial E_{x(blood)}}{\partial z} - \frac{\partial E_{z(blood)}}{\partial x} = -i\omega\mu_0\mu_jH_{y(blood)}, \quad (12)$$

$$\frac{\partial E_{y(blood)}}{\partial x} - \frac{\partial E_{x(blood)}}{\partial y} = -i\omega\mu_0\mu_jH_{z(blood)}, \quad \frac{\partial E_{z(blood)}}{\partial y} - \frac{\partial E_{y(blood)}}{\partial z} = i\omega\varepsilon_0\varepsilon_jH_{x(blood)}, \quad (13)$$

$$\frac{\partial H_{x(blood)}}{\partial z} - \frac{\partial E_{z(blood)}}{\partial x} = -i\omega\varepsilon_0\mu_j E_{y(blood)}, \quad \frac{\partial H_{y(blood)}}{\partial x} - \frac{\partial H_{x(blood)}}{\partial y} = i\omega\varepsilon_0\varepsilon_j E_{z(blood)}, \quad (14)$$

где ε_0 , Φ/M , – диэлектрическая постоянная; ε_i – диэлектрическая проницаемость модельной среды для *j*-го слоя; μ_0 , Γ/M , – магнитная постоянная; μ_i – магнитная проницаемость модельной среды для *j*-го слоя; ω, с⁻¹, – угловая частота.

Формулы (12) – (14) соответствуют системе уравнений Максвелла в декартовой системе координат.

При этом обратная задача стандартно описывается линейным интегральным уравнением Фредгольма первого рода:

$$Au \equiv \int_{\rho \min}^{\rho \max} I_{scat(\theta)}(\rho, \lambda) u(\rho) d\rho = f(\lambda),$$
(15)

где A – интегральный оператор; $u(\rho)$ – искомое распределение клеток по приведенным радиусам (размерам); $I_{scat(\theta)}(\rho, \lambda)$ – интенсивность рассеяния поля по углу θ на сферической мультислойной частице, это ядро интегрального уравнения $f(\lambda) \equiv I_{blood}(\theta, \lambda)$, где

ческой мультислонной частице, это ядро интегрального уравнения $f(k) = I_{blood}(0, k)$, где $I_{blood}(0, \lambda)$ – интенсивность рассеяния, определяемая выражением (11). Предположим, что функция $I_{scat(0)}(\rho, \lambda)$ – непрерывна в прямоугольнике $\Omega = ([c, d] \times [a, b])$, а $f(\lambda) \in L_{2[c, d]}$, причем $a \equiv \rho_{\min}, b \equiv \rho_{\max}, c \equiv \lambda_{\min}, d \equiv \lambda_{\max}$. Считаем, что нам известна не сама функция f, а некоторое ее приближенное значение

 f_{δ} , отвечающее условию $||f - f_{\delta}||L_{2[c, d]} \leq \delta$. В случае, когда функция $u(\rho)$ предполагается гладкой, мы можем выбрать в качестве пространства решений $U = W_{p[a,b]}^{1}$. Фактически вместо функции $I_{scat(\theta)}(\rho, \lambda)$ мы имеем задание функции $I_{hscat(\theta)}(\rho, \lambda)$. При

этом выполнены условия

$$\left\|I_{scat(\theta)}(\rho,\lambda)-I_{hscat(\theta)}(\rho,\lambda)\right\|_{L_{2}(\Omega)}\leq h.$$

В этом случае справедливо ограничение

$$\left\|A-A_{h}\right\|_{W_{2}^{1}\rightarrow L_{2}}\leq h,$$

где A_h – приближение для интегрального оператора A, точность которого h соответствует ядру $I_{hscat(\theta)}(\rho,\lambda)$ в операторной норме.

Для численного нахождения распределения *u*(р) применим метод регуляризации Тихонова [9, 10], поскольку обращение оператора A для обратной задачи неустойчиво для пространства $W^1_{p[a,b]}$ и уравнение Тихонова имеет следующий вид [9, 10]:

$$(A_h^*A_h+\alpha C)u^{\alpha}=A_h^*f,$$

где A_h^{-} оператор преобразования из пространства $W_{2[a,b]}^1$ в подпространство $L_{2[c,d]}$; $A_h^* -$ оператор преобразования из подпространства $L_{2[c,d]}$ в пространство $W_{2[a,b]}^1$ (сопряженный к $A_{\underline{k}}$); C – оператор, матрица которого определена в монографии [9].

Данная постановка задачи предполагает отсутствие информации о гладкости точного решения. В таком случае оператор исходного интегрального уравнения A_h может считаться действующим из пространства $L_{2[a, b]}$ в подпространство $L_{2[c, d]}$. Выпишем сглаживающий функционал для рассматриваемого случая:

$$M^{\alpha}[u] = \left\| A_{\mu} u^{\alpha} - f_{\delta} \right\|_{L_{2[c,d]}}^{2} + \alpha \left\| u \right\|_{L_{2[c,d]}}^{2} \to \min.$$
(16)

Тогда уравнение Тихонова следует записать в виде

$$(A_h^*A_h + \alpha E)u^\alpha = A_h^*f.$$

Функция, минимизирующая функционал и^α, будет зависеть от значения параметра регуляризации α.

Результаты численных расчетов для модельной среды

Рассмотрим модельную среду, которая обладает характеристиками, представленными в табл. 1.

Значения параметров для интерфейсов между слоями выбраны так, чтобы модель была как можно ближе к реальным данным о форме границ поверхности соответствующего слоя в структуре типичной дермы человека, а длина волны составляет $\lambda = 633$ нм (центр линии Не-Ne лазера).

Пополката	Обозначение	Значение параметра для слоя і			
Параметр		(2)	(3)	(4)	
Толщина слоя, мкм	d_l	65	565	90	
Произвольно заданная константа	a _i	- 0,0024	0,021	0,041	
	b _i	0,0200	0,030	0,050	
		0,010			
Показатель преломления (действительная часть)	<i>n</i> _{0i}	1,50	1,40	1,35	

Принятые характеристики модельной среды

Примечания. 1. Произвольно заданные константы представлены формулой (4): $H_i = c \sin(ax + by)$. 2. Показатель преломления воздушной среды $n_1 = 1,000;$ для *i*-го слоя модельной поглощающей среды $n_i = n_{0i} + i\chi_i$, было принято $\chi_2 = \chi_3 = \chi_4 = \chi_5 = 10^{-5}$; $n_{05} = 1,40$.

Перечислим условия, при которых решалась задача нахождения функции распределения по размерам форменных элементов крови, симулирующих эритроциты. Во-первых, в рамках построенной математической модели взаимодействия лазерного излучения с биологической структурой, содержащей агрегированное объединение, число частиц в рассматриваемом агрегате предполагалось конечным. Во-вторых, учитывались как структуры элементов агрегата, так и эффекты многократного рассеяния; при этом считались точно заданными геометрические и оптические характеристики рассеивателей.

На рис. 2 представлены примеры графиков рассчитанной интенсивности рассеяния лазерного излучения как функции длины волны (спектры рассеяния) на двух группах сферуллированных многослойных частиц для случаев разной степени агрегации.

Анализ полученных результатов позволяет прийти к следующим заключениям:

математический подход, использованный в статье, и программное обеспечение, разработанное на базе такого подхода, дают возможность регистрировать для случая *in vivo* процессы агрегации частиц в моделируемой среде (табл. 2, см. также рис. 3);

Таблица 1



Рис. 2. Рассчитанные зависимости интенсивности рассеяния лазерного излучения на двух группах по 5 сферуллированных многослойных частиц от его длины волны (угол падения $\theta = 0^{\circ}$); расстояние между частицами составляло 1 мкм (*a*) и 2 мкм (*b*), остальные параметры даны в табл. 1

варьирование структурных особенностей исследуемого агрегата (изменение расстояний между элементами) приводит к изменениям как численных значений спектральных характеристик (см. рис. 2), так и самой формы кривых (рис. 3). Этот эффект обусловлен различием размеров клеток, а также их внутренних структур.

Таблица 2



Расчетные результаты моделирования функции распределения частиц по размерам

Рис. 3. Функции бимодального (*a*) и нормального (*b*) распределений сферуллированных многослойных частиц по их приведенным радиусам; при этом расстояния между частицами составили 1 мкм (*a*) и 2 мкм (*b*). Тонкие линии относятся к заданным распределениям, цветные жирные – к расчетным

Выбор параметра регуляризации предусмотрен особенностями разработанного нами программного продукта. Данный процесс осуществлялся автоматически при заданных заранее уровнях погрешности ядра интегрального уравнения. Для выбора параметра регуляризации, который бы обеспечивал оптимальное соотношение между априорной информацией и экспериментальными данными, применялись следующие методы: *L*-кривой, относительной невязки, по критерию квазиоптимальности и по принципу сглаживающего функционала (рис. 4).

С целью демонстрации эффективности описанных выше методов выбора, целесообразно привлечь традиционные данные, относящиеся к распределению эритроцитов по размерам, которые используются в практической медицине [11]:

$$u(\rho) = A_{\rm l} \cdot \exp B_{\rm l} (\rho - b_{\rm l})^2, \tag{17}$$

$$u(\rho) = A_2 \cdot \exp B_2 (\rho - b_2)^2 + A_3 \cdot \exp B_3 (\rho - b_3)^2,$$
(18)

где A_i, B_i, b_i – подгоночные параметры.



Рис. 4. Определение параметра регуляризации для функций бимодального (a - d) и нормального (e - h) распределений сферуллированных многослойных частиц с использованием различных методов выбора: по относительной невязке (a, e), по критериям квазиоптимальности (b, g) и L-кривой (c, h), а также по принципу сглаживающего функционала (d, h)

Приведенные формулы (17) и (18) описывают нормальное и бимодальное распределения соответственно.

При этом для нормального распределения значения параметров составляют $b_1 = 2$, $A_1 = 1$, $B_1 = -2$, а для бимодального распределения, описывающего случай присутствия фракции, которая содержит 30 % аномально больших клеток, $b_2 = 3$, $A_2 = 0,80$, $B_2 = -1,00$; $b_3 = 5$, $A_3 = 0,15$, $B_3 = -1,30$.

Прокомментируем поведение двух кривых на графике рис. 3, *a*. Заранее заданному асимметричному бимодальному распределению частиц по размерам соответствует непрерывная кривая, моделирующая присутствие фракций как аномально крупных, так и нормальных форменных элементов (эритроцитов). Стоит отметить, что использование численного решения задачи позволило восстановить с высокой степенью точности как пик, характеризующий фракцию нормальных клеток, так и пик, соответствующий фракции аномально больших эритроцитов.

Аналогичные комментарии можно дать и к кривым рис. 3, *b*. Здесь результат численного решения обратной задачи представлен жирной цветной линией (уровень шума в правой части уравнения принят равным 5 %). Тонкая серая линия — график функции распределения частиц по размерам, построенный на основе соотношения (17). Отчетливо видно, что численное решение задачи, заданной соотношением (16), дало возможность восстановить с высокой точностью профиль распределения частиц по размерам.

Построенная математическая модель в итоге позволяет теоретически рассчитать функцию распределения по размерам для сферических частиц, симулирующих кровяные клетки для случая *in vivo*. При этом следует отметить, что решение, достигнутое путем минимизации, вполне удовлетворительно совпадает с заранее заданным для разных видов распределений. Существенно, что ошибка решения вполне соизмерима с уровнем шума.

Заключение

Анализ результатов исследования, полученных в настоящей статье, позволяет утверждать, что новый подход к описанию взаимодействия лазерного излучения со средой, имеющей слоистую структуру и представляющую собой модель биоткани, оказался плодотворным. Подход включал асимптотические методы теории дифракции. Перечислим кратко основные достигнутые результаты.

1. Получены выражения, позволяющие рассчитывать отраженное поле гауссова пучка в случае *p*-поляризации падающего излучения, причем такие параметры, как угол падения набегающего пучка и показатель преломления отражающей поверхности произвольны. Формулы выражают асимптотику по малому параметру. Смысловое содержание введенного малого параметра есть отношение характерного масштаба изменения профиля границы тела к соответствующему характерному расстоянию. Порядок погрешности вычислений оценивается на уровне квадратичных членов асимптотики.

2. Построенная модель вполне удовлетворительно отражает процесс распространения некоагулирующего лазерного излучения в биоткани, имеющей многослойную структуру. Эта модель позволяет рассчитывать оптические характеристики системы, давая основу для качественного анализа изучаемых биофизических процессов.

3. Математическую модель удалось реализовать в пределах возможностей программного комплекса, что позволяет в автоматическом режиме свободно варьировать характерные размеры исследуемой биоструктуры. Указанные преимущества позволяют отслеживать изменения, возникающие при варьировании входных параметров.

4. Новый подход дает возможность корректно восстанавливать распределения эритроцитов по приведенным радиусам с учетом структурных особенностей такого биоагрегата и точно детектировать изменения ширины распределения эритроцитов для случая *in vivo*.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Тучин В. В.** Оптика биологических тканей. Методы рассеяния света в медицинской диагностике. М.: Ай Пи Ар Медиа, 2021. 802 с.

2. Тучин В. В. Лазеры и волоконная оптика в биомедицинских исследованиях. М.: Ай Пи Ар Медиа, 2021. 495 с.
3. **Тучин В. В.** Оптическая биомедицинская диагностика. В 2 т. Т. 1. М.: Ай Пи Ар Медиа, 2021. 549 с.

4. Масляницына А. И., Каданова И. М., Незнанов А. И., Ермолинский П. Б., Гурфинкель Ю. И., Пигуренко А. А., Дячук Л. И., Луговцов А. Е., Приезжев А. В. Микрореологические свойства крови и капиллярный кровоток при артериальной гипертензии и сахарном диабете второго типа: исследование оптическими методами *in vitro* и *in vivo* // Комплексные проблемы сердечно-сосудистых заболеваний. 2020.Т. 9. № 2. С. 53–63.

5. Bessman J. D., Johnson R. K. Erythrocyte volume distribution in normal and abnormal subjects // Blood. 1975. Vol. 46. No. 3. Pp. 369–379.

6. **Куликов К. Г., Радин А. М.** Исследование дисперсии и спектра поглощения совокупности сферических частиц в полости оптического резонатора и новые возможности прогноза оптических характеристик биологических сред методом внутрирезонаторной лазерной спектроскопии // Оптика и спектроскопия. 2002. Т. 92. № 2. С. 228–236.

7. Moroz A. A recursive transfer-matrix solution for a dipole radiating inside and outside a stratified sphere // Annals of Physics. 2005. Vol. 315. No. 2. Pp. 352 –418.

8. **Куликов К.** Г. Светорассеяние на диэлектрических телах произвольной формы, помещенных в слоистую среду, с приложением к задачам биомедицинской оптики. Ч. 1. Теория и модель расчета // Журнал технической физики. 2012. Т. 82. № 12. С. 16–24.

9. Тихонов А. Н., Арсенин В. А. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 288 с.

10. Тихонов А. Н., Гончарский А. В., Степанов В. В., Ягола А. Г. Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1990. 232 с.

11. **Устинов В.** Д. Об обратных задачах восстановления распределения эритроцитов по размерам в лазерной дифрактометрии // Математическое моделирование. 2017. Т. 29. № 3. С. 51–62.

REFERENCES

1. Tuchin V. V., Tissue optics: Light scattering methods and instruments for medical diagnosis, SPIE Press, Bellingham, WA, USA, 2007.

2. Tuchin, V. V., Lazery i volokonnaya optika v biomeditsinskikh issledovaniyakh [Lasers and fiber optics in biomedical research], IPRMEDIA, Moscow, 2021 (in Russian).

3. Tuchin, V. V., Handbook of optical biomedical diagnostics, 2nd Edition, Vol. 1: Light-tissue interaction, SPIE Press, Bellingham, WA, USA, 2016.

4. Maslianitsyna A. I., Kadanova I. M., Neznanov A. I., et al., Microrheologic properties of blood flow in case of arterial hypertension and type 2 diabetes mellitus: *in vitro* and *in vivo* optical assessment, Complex Issues of Cardiovascular Diseases. 9 (2) (2020) 53–63 (in Russian).

5. Bessman J. D., Johnson R. K., Erythrocyte volume distribution in normal and abnormal subjects, Blood. 46 (3) (1975) 369–379.

6. Kulikov K. G., Radin A. M., Study of dispersion and absorption of an ensemble of spherical particles inside an optical cavity and new possibilities of predicting the optical characteristics of biological media by intracavity spectroscopy, Opt. Spectrosc. 92 (2) (2002) 199–206.

7. Moroz A., A recursive transfer-matrix solution for a dipole radiating inside and outside a stratified sphere, Ann. Physics. 315 (2) (2005) 352–418.

8. Kulikov K. G., Light scattering by dielectric bodies of irregular shape in a layered medium in problems of biomedical optics: I. Theory and computational model, Tech. Phys. 82 (12) (2012) 1623–1631.

9. Tikhonov A. N., Arsenin V. A., Solution of ill-posed problems, Winston, USA, 1977.

10. Tikhonov A. N., Goncharsky A. V., Stepanov V. V., Yagola A. G., Numerical methods for the solution of ill-posed problems, Book Series: Mathematics and its Applications, Vol. 328, Springer Dordrecht, Netherlands, 1995.

11. Ustinov V. D., On inverse reconstruction problems of the erythrocyte size distribution in laser diffractometry, Math. Models Comput. Simul. 9 (5) (2017) 561–569.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГОЛОВИЦКИЙ Александр Петрович — доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 alexandergolovitski@yahoo.com ORCID: 0000-0003-4292-0959

КОНЦЕВАЯ Вера Геннадьевна — старший преподаватель кафедры математики и теории игр Псковского государственного университета, г. Псков, Россия. 180000, Россия, г. Псков, пл. Ленина, 2. nkoncevoi@mail.ru ORCID: 0000-0002-1434-5056

КУЛИКОВ Кирилл Геннадьевич — доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы биомедицинских технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия. 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

kulikov.kirill.g@gmail.com ORCID: 0000-0002-4610-7394

THE AUTHORS

GOLOVITSKII Alexander P.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia alexandergolovitski@yahoo.com ORCID: 0000-0003-4292-0959

KONTSEVAYA Vera G.

Pskov State University 2 Lenin Sq., Pskov, 180000, Russia nkoncevoi@mail.ru ORCID: 0000-0002-1434-5056

KULIKOV Kirill G.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia kulikov.kirill.g@gmail.com ORCID: 0000-0002-4610-7394

Статья поступила в редакцию 20.09.2022. Одобрена после рецензирования 05.12.2022. Принята 05.12.2022. Received 20.09.2022. Approved after reviewing 05.12.2022. Accepted 05.12.2022. St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 1 Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 16 (1) 2023

Physics of molecules

Original article UDC 539.19/535.372 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16109

BINDING OF CAFFEINE WITH NICOTINAMIDE: A STUDY BY MEANS OF FLUORESCENCE QUENCHING AND UV-Vis SPECTROSCOPIC TECHNIQUES

A. G. Abraha ¹[∞], A. G. Belay ²

¹ Samara University, Samara, Ethiopia;

² Adama Science and Technology University, Adama, Ethiopia

^{III} atklt.physics@gmail.com

Abstract. In this work, the binding of caffeine (CAF) with nicotinamide (NIC) has been investigated by means of fluorescence quenching and UV-Vis spectroscopic techniques. The results showed that CAF could effectively quench the intrinsic fluorescence of NIC due to a static quenching mechanism rather than a dynamic one. The key parameters of the process: the quenching constant and the bimolecular quenching rate one, the number of binding sites $(n \approx 1)$, as well as the thermodynamic properties of NIC with CAF were calculated. The binding constants were 6.500 and 5.577 kL/mole at 295 and 303 K respectively. The thermodynamic parameter values determined using the Van't Hoff's equation ($\Delta H = -14.220$ kJ/mole, $\Delta S = 22.764$ J/(mole·K)) indicated that the binding process was continuous and electrostatic forces had a major role in the reaction of CAF with NIC molecules. Similarly, the UV-Vis absorption spectra of the interaction were studied and used to confirm the fluorescence quenching mechanism of the molecules.

Keywords: fluorescence quenching, binding constant, nicotinamide, caffeine

For citation: Abraha A. G., Belay A. G., Binding of caffeine with nicotinamide: A study by means of fluorescence quenching and UV-Vis spectroscopic techniques, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1) (2023) 111–124. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16109

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons. org/licenses/by-nc/4.0/)

Научная статья УДК 539.19/535.372 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16109

ИЗУЧЕНИЕ СВЯЗЫВАНИЯ КОФЕИНА С НИКОТИНАМИДОМ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ ТУШЕНИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ И СПЕКТРОСКОПИИ В УЛЬТРАФИОЛЕТОВОЙ И ВИДИМОЙ ОБЛАСТЯХ

А. Г. Абраха ¹[⊠], А. Г. Белэй ²

¹Самарский университет, г. Самара, Эфиопия;

² Адамский университет науки и технологий, г. Адама, Эфиопия

[™] atklt.physics@gmail.com

Аннотация. В работе исследовано связывание кофеина (САF) с никотинамидом (NIC) с помощью методов тушения флуоресценции и спектроскопии оптического поглощения в УФ- и видимой областях. Установлено, что при связывании САF может эффективно

© Abraha A. G., Belay A. G., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

подавлять у NIC собственную флуоресценцию вследствие механизма статического (а не динамического) тушения. Были рассчитаны значения основных параметров процесса: констант тушения и скорости бимолекулярного тушения, число сайтов связывания (составило около 1), а также термодинамические свойства NIC с CAF. Полученные константы связывания составляют 6,500 и 5,577 кл/моль при температурах 295 и 303 К соответственно. Значения термодинамических параметров, найденных с использованием уравнения Вант-Гоффа ($\Delta H = -14,22$ кДж/моль и $\Delta S = 22,764$ Дж/(моль·K)), показали, что процесс связывания является непрерывным и электростатические силы играют важную роль в реакции CAF с молекулами NIC. Аналогичным образом были изучены спектры оптического поглощения в УФ- и видимой областях при взаимодействии молекул, которые были использованы для подтверждения механизма тушения флуоресценции молекул.

Ключевые слова: тушение флуоресценции, константа связывания, никотинамид, ко-феин

Ссылка при цитировании: Абраха А. Г., Белэй А. Г. Изучение связывания кофеина с никотинамидом с помощью методов тушения флуоресценции и спектроскопии в ультрафиолетовой и видимой областях // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 1. С. 111–124. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16109

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии СС BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Introduction

Improving the physicochemical properties of active pharmaceutical ingredients is the key issue in the field of pharmaceuticals. Human health strongly depends on the presence and level of different vitamins in their diet [1]. Nicotinamide (3-pyridine-carboxamide) is a pyridine derivative bearing a carboxamide group at the b position. Nicotinamide is the derivative of vitamin B3 and is involved in many aspects of biological activity [2 - 9] including diabetes treatment and prevention [2], improving the skin's appearance [10 - 12], energy metabolism, synthesis of fatty acids, growth and development, signal transduction, and maintenance of the integrity of the genome [6 - 8]. Moreover, it serves as an important functional group of coenzymes NAD+ and NADP+ [13, 14] which are involved in various chemical reactions, including the production of energy in all types of cells [15, 16], exhibit antioxidant, anti-inflammatory and anticarcinogenic activities [3, 4], prevent immune suppression caused by UVA and UVB radiation [17], and have cytoprotective effects on neural and vascular tissues as well as their anti-inflammatory activity [17, 18]. Due to its application in dietary foods, nutritional ingredients and cosmetics [5] and the structural and biochemical importance of the combination of pyridine-ring and carboxamide moieties, investigations on nicotinamide are ongoing [19 - 22]. Its deficiency leads to pellagra, which is characterized by the triad of diarrhea, dermatitis, and dementia [23].

Bioactive components that make up popular drinks (such as coffee, tea, cola beverages) and foods (e. g., chocolates) are the most useful compounds for human health [24, 25]. Besides, they are the most widely consumed of all behaviorally active drugs in the world [26, 27]. Caffeine (1,3,7-trimethylxanthine) is one of the most widely consumed compounds in the form of caffeinated beverages throughout the entire world. It can be used as an ingredient in anesthetics, antifever, and dietary medicines [28 - 32]. The richness of caffeine in the human diet and in drugs and its biological properties have attracted the interest of many researchers.

Drugs should undergo different chemical reactions before they reach their target sites to interact with biomolecules [33]. Accordingly, understanding their behaviour in a solution is very important in order to improve their pharmacological and biological activity. Thus, drugs may bind to different compounds either by a direct reaction or by weak interactions involving intermolecular bonds such as hydrogen bonding, hydrophobic interactions, etc. [34]. Thereby, as nicotinamide is pharmacologically and physiologically active compound [35 – 38], it interacts with different types of compounds, such as metal precursors (Cr(III), Mn(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II) and Cd(II)) [39], bipyridyl ruthenium(II) [40], moricizine [41], indomethacin [42], caffeine [43],

[©] Абраха А. Г., Белэй А. Г., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

chlorogenic acid [44], ascorbic acid [45], ibuprofen [46], etc. Moreover, many researchers have used various methods in binding reactions, such as equilibrium dialysis, ion-selective electrodes [47, 48], as well as UV-Vis [49], fluorescence [50, 51] and Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy. Among these methods, spectroscopic methods are most sensitive, easy to use, and have a short analysis time that can be preferable for studies of this kind. And, to the best of our knowledge, the effects of caffeine on the solution of nicotinamide, the thermodynamic aspects of the binding process, and the characterization of the binding sites, have not yet been investigated using these spectroscopic techniques.

The interest arises to study the binding of nicotinamide (here(in)after referred as NIC) with caffeine (CAF) is because the compounds could be found in many natural products, food/drug staffs, and used in many patients for the purpose of treating different diseases. Thus, it is an important aspect to study the compounds in order to improve their efficiency in pharmaceutical and biological activities, understanding their binding in biological system, controlling the effect of physicochemical properties, and to characterize their optoelectric properties. Therefore, in this research the interaction mechanism for CAF with NIC was investigated using fluorescence quenching and UV-Vis spectroscopy.



Fig. 1. Chemical structures of NIC (a) and CAF (b)

Nicotinamide (NIC, Fig. 1, a) and caffeine (CAF, Fig. 1, b) were purchased from Sigma-Aldrich Co. and used without any further purification. A sodium phosphate buffer solution was used to control the pH value at 6.85. All other reagents used were of analytical grade purity, and double distilled water was used throughout the experiment.

All fluorescence spectra were recorded on a Fluoromax-4 spectrophotometer (Horiba) equipped with a 1.0 cm quartz cell. The UV-Vis absorption measurements were carried out using a Perkin Elmer Lambda 19 UV-Visible/NIR spectrophotometer. Stock solutions of NIC (1.250 mM) were prepared in the sodium phosphate buffer solution for stead-state fluorescence and UV-Vis absorption measurements. Also, the stock solution of CAF (1.287 mM) was prepared in the deionized water.

The fluorescence spectra measurements were carried out by successive addition of CAF $(0.2925 - 0.9365 \ \mu\text{M})$ to a fixed amount of NIC $(0.2841 \ \mu\text{M})$ solution. The spectra of these series of solutions containing different amounts of CAF and definite amounts of NIC were obtained. The excitation wavelength was $\lambda_{ex} = 250 \ \text{nm}$ for NIC, and corresponding emission ones were recorded over a range of $300 - 500 \ \text{nm}$. The excitation and emission widths of slits were set to 10 nm, and the scan speed to 240 nm/min. The bimolecular quenching rate constant k_q , the Stern – Volmer constant K_{sv} and the number of binding sites *n* were calculated from the emission spectral analysis. To evaluate the effect of temperature on the interactions, the fluorescence quenching experiments were carried out at two different temperatures: 295 and 303 K.

Similarly, the UV-Vis absorption spectra of NIC were recorded in the absence and presence of CAF in the wavelength range from 200 to 500 nm and in the concentration range from 0.1897 to 0.2010 μ M at a fixed amount of NIC 0.2275 μ M. The absorption spectra of pure NIC solutions were also obtained in the same wavelength range.

Results and discussion

Fluorescence quenching mechanism of NIC. The observed fluorescence quenching of the

St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 1

compound can be reduced by a variety of molecular interactions, such as excited state reactions, rearrangement of molecules, energy transfer, ground-state complex formation, and collisional quenching [52, 53]. Furthermore, the static quenching and dynamic one are major quenching mechanisms that differ in their dependences on temperature or viscosity [53, 54]. The dynamic quenching is due to collisions between the fluorophore and the quencher, and the quenching constant is expected to increase with temperature since higher temperatures result in larger diffusion coefficients. Whereas, the static quenching is the formation of a ground-state complex of the fluorophore with the quencher [53, 54], in the presence of which a higher temperature may bring about a decrease in the stability of the complexes, resulting in a lower quenching constant.

Fig. 2 shows the fluorescence spectra of NIC in the presence of CAF. The fluorescence intensities of NIC decreased gradually with increasing the CAF concentration. Peaks in the fluorescence spectra of NIC were observed at a wavelength of 424 nm in both the absence and presence of CAF. The addition of CAF to NIC produced significant quenching of the fluorescence intensity in a concentration-dependent manner. Furthermore, CAF did not show fluoresce near the emission maximum of NIC; this indicated that CAF could interact with NIC.



Fig. 2. Emission spectra of NIC ($\lambda_{ex} = 250 \text{ nm}$) in the presence of CAF at 295 K. The CAF concentration, μ M: 0.2925 (1), 0.4058 (2), 0.5171(3), 0.6264 (4), 0.7338 (5), 0.8393 (6), 0.9365 (7), and the NIC one being fixed at 0.2841 μ M

The data indicated that CAF quenched the intrinsic fluorescence intensity of the NIC molecules. The strong quenching effects clearly indicated the existence of binding among the molecules.

In order to confirm the quenching mechanism of the molecules, the fluorescence quenching data were analyzed according to the Stern - Volmer equation [55, 56]:

$$F_0/F = 1 + k_a \tau_0 [Q] = 1 + K_{\rm SV} [Q], \tag{1}$$

where F_0 , F are the fluorescence intensities in the absence and presence of the quencher, respectively; [Q] is the initial concentration of CAF; K_{SV} is the Stern – Volmer quenching constant; k_q is the rate constant of quenching controlled by diffusion; $K_{SV} = k_q \tau_0$; τ_0 is the average fluorescence lifetime of NIC in the absence of CAF.

The K_{sy} value was determined by linear regression of the Stern – Volmer equation, and the plot of F_0/F versus [Q] would be linear for a single static or dynamic quenching within a certain concentration [52, 53, 55].

Fig. 3 is the Stern – Volmer plots for the quenching of NIC by CAF at temperatures of 295 and 303 K. The curves showed good linear relationships within the investigated concentrations at the two different temperatures. The linear Stern –Volmer plots show the possible existence of a single type of quenching, and the quenching process is static rather than dynamic one. The fluorescence lifetime τ_0 of NIC was assumed to be 0.3 ns [57], and the K_{sv} values obtained from the Stern – Volmer equation are presented in Table 1. Values of the quenching rate constant k_q determined at the two temperatures are given there. It is clear that the k_q values are in the range



Fig. 3. Stern – Volmer plots for the quenching of NIC by CAF at 295 (black) and 303 K (red)

 10^{13} L/(mol·s) at both temperatures which exceed by far the diffusion controlled rate constant $2 \cdot 10^{10}$ L/(mol·s) in an aqueous solution [58, 59], confirming that the quenching does not involve a dynamic diffusion process, but rather occurs due to the formation of CAF-NIC complexes.

Table 1

The values of fluorescence quenching parameters obtained for NIC-CAF binding at two temperatures

<i>Т</i> , К	$K_{\rm sv}, 10^4 {\rm L/mol}$	k_{a} , 10 ¹³ L/(mol·s)	R _c
295	1.775	5.920	0.98
303	1.515	5.052	0.97

Notations: K_{SV} is the Stern – Volmer constant, k_q is the quenching rate constant, R_c is the correlation coefficient.

Binding constant and binding sites

The fluorescence data was further examined for static quenching process. When molecules are bound independently to a set of equivalent sites on macromolecules, the equilibrium between free and bound molecules is given by the following equation [60]:

$$Log [(F_0 - F)/F] = Log K_c + n \cdot Log[CAF],$$
(2)

where K_c is the binding constant, *n* is the number of binding sites per molecule, [CAF] is the CAF concentration.

The values of K_c and *n* were determined from the slope and intercept of the linear fit of Eq. (2) to the experimental data of Fig. 4. Values of the association constant of CAF with NIC at 295 and 303 K are listed in Table 2. As the data in Table 2 show, the values of K_c decreased with increasing temperature, which suggested that the binding reaction between the NIC and CAF was exothermic [61].

Strong binding constants were observed between NIC and CAF. Moreover, the values also decreased with increasing temperature, which indicated the formation of unstable compounds that partly decompose at relatively higher temperatures. The calculated binding site number n is about 1, indicating the existence of a single site for the binding of NIC to CAF.

Thermodynamic parameters and nature of the binding forces

The thermodynamic parameters of binding reaction are the main evidence for confirming the binding mode. The formation of binding can be described by several biophysical parameters such as the association constant, and other thermodynamic properties. The forces acting between small



Fig. 4. The plots of Log $[(F_0 - F)/F]$ versus Log[CAF] at 295 (black) and 303 K (red)

Table 2

The values of NIC-CAF binding parameters obtained at two temperatures

<i>Т</i> , К	$K_{c}, 10^{3} \text{L/mol}$	п	R _c
295	6.500	0.880	0.98
303	5.577	0.897	0.99

Notations: K_c is the binding constant, *n* is the number of binding sites per molecule, R_c is the correlation coefficient.

molecules and macromolecules are mainly hydrogen bonds, electrostatic forces, the Van der Waal's force and hydrophobic interaction. To obtain further insight into the weak interactions associated with the complexation of NIC with CAF, we endeavored to determine the thermodynamic parameters using the Van't Hoff's equation. If the enthalpy change ΔH does not vary significantly over the temperature range of the study, then the thermodynamic parameters can be determined by the following equation:

$$\ln K_c = -\Delta H/RT + \Delta S/R,$$
 (3)

and the Gibbs free energy change ΔG can be calculated at each temperature using formula

$$\Delta G = -RT \cdot \ln K_c = \Delta H - T\Delta S,\tag{4}$$

where ΔS is the entropy change, R is the gas constant.

Table 3

Thermodynamic properties determined by the fluorescence quenching of CAF with NIC at two temperatures

Т, К	ΔH , kJ/mol	ΔS , J/(mol·K)	ΔG , kJ/mol
295	-14.220	24.764	-21.52
303	_	_	-21.72

Notations: ΔH , ΔS , ΔG are the changes in the enthalpy, the entropy and the Gibbs free energy, respectively.

From the linear relationship between $\ln K_c$ and the reciprocal of absolute temperature the values of the thermodynamic parameters were obtained as listed in Table 3. Accordingly, the negative values of ΔH and the positive value of ΔS indicate that an electrostatic force played a major role in the reaction between NIC and CAF, whereas the negative sign of ΔG indicates the spontaneity of the binding for NIC with CAF. Moreover, the negative value of enthalpy indicates that the absorption process of the compounds is an exothermic reaction. Besides, the positive value of entropy confirms the increasing randomness of the solution interface of the molecules of the compounds [61, 62].

UV-Vis absorption spectra

The UV-Vis absorption spectroscopy was used to verify the mechanism of binding of CAF to NIC. This measurement is very simple and the method is applicable to explore the structural changes and to know the complex formation of different compounds. In the dynamic quenching, the spectra of the molecule will not change, however, in the static one the spectral changes due to the formation of reaction were observed in the compound. Fig. 5 shows the absorption spectra of NIC in the presence and absence of CAF. In the absence of CAF, the UV-Vis absorption spectra of NIC was characterized by a single absorption band. With the addition of CAF solution, the interactions between CAF and NIC led to the red shift of the NIC spectra, and the intensity of the peak at a wavelength of 261 nm increased. The curve N (see Fig. 5) was different from the curves IP of the complexes of NIC-CAF and isosbestic points were observed at different wavelengths of the complexes. This change was a reasonable result to confirm the binding of CAF with NIC due to ground state complex formation, which is evidence that the static quenching existed in the binding process of the fluorescence quenching.



Fig. 5. UV-Vis absorption spectra of NIC alone (curve N) and in the presence of CAF with various concentrations (curves IP), μ M: 0.2010 (1), 0.2189 (2), 0.1970 (3), 0.1950 (4), 0.1920 (5), 0.1897 (6); the concentration of NIC was 0.2275 μ M

Conclusion

The binding of caffeine (CAF) with nicotinamide (NIC) was investigated using fluorescence quenching and UV-Vis spectroscopic techniques. The experimental results indicated that CAF quenched the fluorophore of NIC by forming the ground state complex or non-fluorescent NIC–CAF with high binding affinities. The thermodynamic parameters suggested that the binding reaction was exothermic and occured spontaneously, and the electrostatic force played a major role in the binding reaction. All these experimental results clarified that NIC can bind to CAF, which can be a useful guideline for further clinical study. The study results help us to understand the mechanisms of binding of the drug with the biologically active compound of a coffee bean that is naturally available in different plant types.

Acknowledgements

The authors acknowledge and thank Prof. Ashok Gholap for his contribution and for his assisting throughout the work. We are grateful to Mr. Hagos Yisak for assisting the experimental work.

REFERENCES

1. Rudenko A. O., Kartsova L. A., Determination of water-soluble vitamin B and vitamin C in combined feed, premixes, and biologically active supplements by reversed-phase HPLC, J. Anal. Chem. 65 (1) (2010) 71–76.

2. Elliott R. B., Pilcher C. C., Stewart A., et al., The use of nicotinamide in the prevention of type

1 diabetes, Ann. N. Y. Acad. Sci. 696 (1) (1993) 333-341.

3. Kamat J. P., Devasagayam T. P. A., Nicotinamide (vitamin B3) as an effective antioxidant against oxidative damage in rat brain mitochondria, Redox Rep. 4 (4) (1999) 179–184.

4. Pero R. W., Axelsson B., Siemann D., et al., Newly discovered anti-inflammatory properties of the benzamides and nicotinamides, Mol. Cell. Biochem. 193 (1) (1999) 119–125.

5. Shalita A. R., Smith J. G., Parish L. C., et al., Topical nicotinamide compared with clindamycin gel in the treatment of inelammatory acne vulgaris, Int. J. Dermatol. 1995. 34 (6) (1995) 434–437.

6. Denu J. M., Vitamin B3 and sirtuin function, Trends Biochem. 30 (9) (2005) 479–483.

7. Klaidman L. K., Mukherjee S. K., Hutchin T. P., Adams D. J., Nicotinamide as a precursor for NAD+ prevents apoptosis in the mouse brain induced by tertiary-butylhydroperoxide, Neurosci. Lett. 206 (1) (1996) 5–8.

8. Jacobson E. L., Shieh W. M., Huang A. C., Mapping the role of NAD metabolism in prevention and treatment of carcinogenesis, In Book: R. Alvarez-Gonzalez (Editor). ADP-ribosylation reactions: From bacterial pathogenesis to cancer. Mol. Cell. Biochem. Int. J. Chem. Biol. Health and Disease. Vol. 30. Springer, Boston, MA, USA (1999) 69–74.

9. Yamamoto H., Okamoto H., Protection by picolinamide, a novel inhibitor of poly (ADP-ribose) synthetase, against both streptozotocin-induced depression of proinsulin synthesis and reduction of NAD content in pancreatic islets, Biochem. Biophys. Res. Commun. 95 (1) (1980) 474–481.

10. **Muszalska I., Kiaszewicz K., Kson D., Sobczak A.,** Determination of nicotinamide (vitamin B3) in cosmetic products using differential spectrophotometry and liquid chromatography (HPLC), J. Anal. Chem. 2013. 68 (11) (2013) 1007–1013.

11. Xiao X., Hou Y., Du J., et al., Determination of vitamins B2, B3, B6 and B7 in corn steep liquor by NIR and PLSR, Trans. Tianjin Univ. 18 (5) (2012) 372–377.

12. Maksimović J. P., Kolar-Anić L. Z., Anić S. R., et al., Quantitative determination of some water-soluble B vitamins by kinetic analytical method based on the perturbation of an oscillatory reaction, J. Braz. Chem. Soc. 22 (1) (2011) 38–48.

13. Sikora A., Szajerski P., Piotrowski Ł., et al., Radical scavenging properties of nicotinamide and its metabolites, Radiat. Phys. Chem. 77 (3) (2008) 259–266.

14. **Thibodeau P. A., Paquette B.,** DNA damage induced by catecholestrogens in the presence of copper (II): Generation of reactive oxygen species and enhancement by NADH, Free Radic. Biol. Med. 27 (11–12) (1999) 1367–1377.

15. Chen A. C., Martin A. J., Choy B., et al., A phase 3 randomized trial of nicotinamide for skincancer chemoprevention, N. Engl. J. Med. 373 (17) (2015) 1618–1626.

16. Escudero-Góngora M. M., Fernández-Peñas P., Nicotinamide: New indications in dermatology, Actas Dermo-Sifiliogr. (Engl. Ed.) 107 (9) (2016) 777–778.

17. Kumar M., Jaiswal S., Singh R., et al., *Ab initio* studies of molecular structures, conformers and vibrational spectra of heterocyclic organics: I. Nicotinamide and its N-oxide, Spectroch. Acta A. Mol. Biomol. Spectrosc. 75 (1) (2010) 281–292.

18. **Chlopicki S., Swies J., Mogielnicki A., et al.,** 1-Methylnicotinamide (MNA), a primary metabolite of nicotinamide, exerts anti-thrombotic activity mediated by a cyclooxygenase-2/prostacyclin pathway, Br. J. Pharmacol. 152 (2) (2007) 230–239.

19. Li J., Bourne S. A., Caira M. R., New polymorphs of isonicotinamide and nicotinamide, Chem. Commun. 47 (5) (2011) 1530–1532.

20. Gholivand K., Oroujzadeh N., Afshar F., New organotin (IV) complexes of nicotinamide, isonicotinamide and some of their novel phosphoric triamide derivatives: Syntheses, spectroscopic study and crystal structures, J. Organomet. Chem. 695 (9) (2010) 1383–1391.

21. Kulkarni S. A., McGarrity E. S., Meekes H., ter Horst J. H., Isonicotinamide self-association: The link between solvent and polymorph nucleation, Chem. Commun. 48 (41) (2012) 4983–4985.

22. Chen N., Jia Zh.-P., Wang H.-Q., et al., Dilution enthalpies and enthalpic pairwise selfinteractions of nicotinamide and isonicotinamide in (dimethylformamide + water) and (dimethyl sulfoxide + water) mixed solvents at 298.15 K, J. Chem. Eng. Data. 59 (7) (2014) 2324–2335.

23. Chen A. C., Damian D. L., Nicotinamide and the skin, Aust. J. Dermatol. 55 (3) (2014) 169–175.

24. Liu R. H., Health benefits of fruit and vegetables are from additive and synergistic combinations of phytochemicals, Am. J. Clin. Nutr. 78 (3) (2003) 517S–520S.

25. Crowe K. M., Designing functional foods with bioactive polyphenols: Highlighting lessons

learned from original plant matrices, J. Hum. Nutr. Food Sci. 1 (3) (2013) 205-450.

26. Bolton S., Null G., Caffeine, psychological effect, use and abuse, J. Orthomol. Psychiatry. 10 (1981) 202-211.

27. Clifford M. N., Wight J., The measurement of feruloylquinic acids and caffeoylquinic acids in coffee beans. Development of the technique and its preliminary application to green coffee beans, J. Sci. Food Agric. 27 (1) (1976) 73–84.

28. **Barone J. J., Roberts H. R.,** Human consumption of caffeine (Chapter IV), In book: Caffeine: perspectives from recent research, by Dews P. B. (Editor). Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (1984) 59–73.

29. Knight C. A., Knight I., Mitchell D. C., Zepp J. E., Beverage caffeine intake in US consumers and subpopulations of interest: Estimates from the share of intake panel survey, Food. Chem. Toxicol. 42 (12) (2004) 1923–1930.

30. Barone J. J., Roberts H. R., Caffeine consumption, Food. Chem. Toxicol. 34 (1) (1996) 119–129.

31. Carrillo J. A., Benitez J., Clinically significant pharmacokinetic interactions between dietary caffeine and medications, Clin. Pharmacokinet. 39 (2) (2000) 127–153.

32. Dlugosz L., Bracken M. B., Reproductive effects of caffeine: A review and theoretical analysis, Epidemiol. Rev. 14 (1) (1992) 83–100.

33. **Reedijk J.**, New clues for platinum antitumor chemistry: Kinetically controlled metal binding to DNA, Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 100 (7) (2003) 3611–3616.

34. Patrick G. L., An introduction to medicinal chemistry, The 5-th ed. Oxford University Press, Oxford, UK, 2013.

35. Rosu T., Pasculescu S., Lazar V., et al., Copper (II) complexes with ligands derived from 4-amino-2, 3-dimethyl-1-phenyl-3-pyrazolin-5-one: Synthesis and biological activity, Molecules. 11 (11) (2006) 904–914.

36. Filho V. C., Corrêa R., Vaz Z., et al., Further studies on analgesic activity of cyclic imides, Il Farmaco. 53 (1) (1998) 55–57.

37. Turan-Zitouni G., Sivaci M., Kiliç F. S., Erol K., Synthesis of some triazolyl-antipyrine derivatives and investigation of analgesic activity, Eur. J. Med. Chem. 36 (7) (2001) 685–689.

38. Deepa K., Madhu N. T., Radhakrishnan P. K., Cadmium (II) complexes of 1, 2-di (imino-4-antipyrinyl) ethane, Synth. React. Inorg. M. 35 (10) (2005) 883–888.

39. Dilip C. S., Thangaraj V., Raj A. P., Synthesis, spectroscopic characterization, biological and DNA cleavage properties of complexes of nicotinamide, Arab. J. Chem. 9, Suppl. 1 (September) (2016) S731–S742.

40. Smith N. A., Zhang P., Salassa L., et al., Synthesis, characterization and dynamic behavior of photoactive bipyridyl ruthenium (II)-nicotinamide complexes, Inorg. Chim. Acta. 454 (1 January) (2017) 240–246.

41. Hussain M. A., Diluccio R. C., Maurin M. B., Complexation of moricizine with nicotinamide and evaluation of the complexation constants by various methods, J. Pharm. Sci. 82 (1) (1993) 77–79.

42. Bogdanova S. V., Sidzhakova D., Karaivanova V., Georgieva Sv., Aspects of the interactions between indomethacin and nicotinamide in solid dispersions, Int. J. Pharm. 163 (1-2) (1998) 1-10.

43. Evstigneev M. P., Evstigneev V. P., Santiago A. A. H., Davies D. B., Effect of a mixture of caffeine and nicotinamide on the solubility of vitamin (B2) in aqueous solution, Eur. J. Pharm. Sci. 28 (1) (2006) 59–66.

44. Abraha A., Gholap A., Belay A., Investigation of self-association, optical transition probability and hetero-association with chlorogenic acid of nicotinamide using UV-Vis spectroscopy, Int. J. Phys. Sci. 11 (21) (2016) 269–278.

45. Guttman D. E., Brooke D., Solution phase interaction of nicotinamide with ascorbic acid, J. Pharm. Sci. 52 (10) (1963) 941–945.

46. **Oberoi L. M., Alexander K. S., Riga A. T.,** Study of interaction between ibuprofen and nicotinamide using differential scanning calorimetry, spectroscopy, and microscopy and formulation of a fast-acting and possibly better ibuprofen suspension for osteoarthritis patients, J. Pharm. Sci. 94 (1) (2005) 93–101.

47. Ayranci E., Duman O., Binding of fluoride, bromide and iodide to bovine serum albumin studied with ion-selective electrodes, Food Chem. 84 (4) (2004) 539–543.

48. Ayranici E., Duman O., Binding of lead ion to bovine serum albumin studied by ion-selective

electrode, Protein Peptide Lett. 11 (4) (2004) 331-337.

49. Tunc S., Duman O., Bozoglan B. K., Studies on the interaction of chloroquine diphosphate and phenelzine sulfate drugs with human serum albumin and human hemoglobin protein by spectroscopic techniques, J. Lumin. 140 (August) (2013) 87–94.

50. Tunc S., Duman O., Soylu I., Bozoglan B. K., Study on the binding of dichlorprop and diquat dibromide herbicides to human serum albumin by spectroscopic methods, J. Hazard. Mater. 273 (30 May) (2014) 36–43.

51. Bozoglan B. K., Tunc S., Duman O., Investigation of neohesperidin dihydrochalcone binding to human serum albumin by spectroscopic methods, J. Lumin. 155 (November) (2014) 198–204.

52. Albrecht C., Lakowicz J. R., Principles of fluorescence spectroscopy // Anal. Bioanal. Chem. 390 (5) (2008) 1223–1224.

53. Lakowicz J. R., Quenching of fluorescence (Ch. 8), In his book "Principles of fluorescence spectroscopy", Springer Science + Business Media, New York (1999) 237–265.

54. **Paramaguru G., Kathiravan A., Selvaraj S., et al.,** Interaction of anthraquinone dyes with lysozyme: Evidences from spectroscopic and docking studies, J. Hazard. Mater. 175 (1–3) (2010) 985–991.

55. Bowen E. J., Wokes F., Fluorescence of solutions, Longmans Green and Co., London, 1953.

56. Von Parker C. A., Photoluminescence of solutions: with applications to photochemistry and analytical chemistry, Elsevier Publishing Company, Amsterdam-London-New York, 1968.

57. Visser A. J. W. G., van Hoek A., The fluorescence decay of reduced nicotinamides in aqueous solution after excitation with a UV-mode locked Ar ion laser, Photochem. Photobiol. 33 (1) (1981) 35–40.

58. Atkins P., De Paula J., Keeler J., Atkins' physical chemistry. 11-th edition, Oxford University Press, Oxford (UK), 2018.

59. Chou K. C., Jiang S. P., Studies on the rate of diffusion-controlled reactions of enzymes, Scientia Sinica. 17 (1974) 664–680.

60. Kang J., Liu Y., Xie M.-X., et al., Interactions of human serum albumin with chlorogenic acid and ferulic acid, Biochim. Biophys. Acta. 1674 (2) (2004) 205–214.

61. Wang Z., Wang N., Han X., et al., Fluorescence quenching and molecular docking study on the binding of four hydroxyanthraquinones to FTO, Phys. Chem. Liquid. 56 (4) (2018) 482–495.

62. **Guo Y., Liu B., Li Z., et al.,** Study of the combination reaction between drugs and bovine serum albumin with methyl green as a fluorescence probe, J. Chem. Pharm. Res. 6 (5) (2014) 968–974.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Руденко А. О., Карцова Л. А. Определение водорастворимых витаминов группы В и витамина С в комбикормах, премиксах и биологически-активных добавках методом обращенно-фазовой ВЭЖХ // Журнал аналитической химии. 2010. Т. 65. № 1. С. 73–78.

2. Elliott R. B., Pilcher C. C., Stewart A., Fergusson D., McGregor M. A. The use of nicotinamide in the prevention of type 1 diabetes // Annals of the New York Academy of Sciences. 1993. Vol. 696. No. 1. Pp. 333–341.

3. Kamat J. P., Devasagayam T. P. A. Nicotinamide (vitamin B3) as an effective antioxidant against oxidative damage in rat brain mitochondria // Redox Report. 1999. Vol. 4. No. 4. Pp. 179–184.

4. Pero R. W., Axelsson B., Siemann D., Chaplin D., Dougherty G. Newly discovered antiinflammatory properties of the benzamides and nicotinamides // Molecular and Cellular Biochemistry. 1999. Vol. 193. No. 1. Pp. 119–125.

5. Shalita A. R., Smith J. G., Parish L. C., Sofman M. S., Chalker D. K. Topical nicotinamide compared with clindamycin gel in the treatment of inelammatory acne vulgaris // International Journal of Dermatology. 1995. Vol. 34. No. 6. Pp. 434–437.

6. **Denu J. M.** Vitamin B3 and sirtuin function // Trends in Biochemical Sciences. 2005. Vol. 30. No. 9. Pp. 479–483.

7. Klaidman L. K., Mukherjee S. K., Hutchin T. P., Adams D. J. Nicotinamide as a precursor for NAD+ prevents apoptosis in the mouse brain induced by tertiary-butylhydroperoxide // Neuroscience Letters. 1996. Vol. 206. No. 1. Pp. 5–8.

8. Jacobson E. L., Shieh W. M., Huang A. C. Mapping the role of NAD metabolism in prevention

and treatment of carcinogenesis // R. Alvarez-Gonzalez (Editor). ADP-ribosylation reactions: From bacterial pathogenesis to cancer. Molecular and Cellular Biochemistry: An International Journal for Chemical Biology in Health and Disease. Vol. 30. Boston, MA, USA: Springer, 1999. Pp. 69–74.

9. Yamamoto H., Okamoto H. Protection by picolinamide, a novel inhibitor of poly (ADP-ribose) synthetase, against both streptozotocin-induced depression of proinsulin synthesis and reduction of NAD content in pancreatic islets // Biochemical and Biophysical Research Communications. 1980. Vol. 95. No. 1. Pp. 474–481.

10. Muszalska I., Kiaszewicz K., Kson D., Sobczak A. Determination of nicotinamide (vitamin B3) in cosmetic products using differential spectrophotometry and liquid chromatography (HPLC) // Журнал аналитической химии. 2013. Т. 68. № 11. С. 1123–1129.

11. Xiao X., Hou Y., Du J., Sun D., Bai G., Luo G. Determination of vitamins B2, B3, B6 and B7 in corn steep liquor by NIR and PLSR // Transactions of Tianjin University. 2012. Vol. 18. No. 5. Pp. 372–377.

12. Maksimović J. P., Kolar-Anić L. Z., Anić S. R., Ribič D. D., Pejić N. D. Quantitative determination of some water-soluble B vitamins by kinetic analytical method based on the perturbation of an oscillatory reaction // Journal of the Brazilian Chemical Society. 2011. Vol. 22. No. 1. Pp. 38–48.

13. Sikora A., Szajerski P., Piotrowski Ł., Zielonka J., Adamus J., Marcinek A., Gębicki J. Radical scavenging properties of nicotinamide and its metabolites // Radiation Physics and Chemistry. 2008. Vol. 77. No. 3. Pp. 259–266.

14. **Thibodeau P. A., Paquette B.** DNA damage induced by catecholestrogens in the presence of copper (II): Generation of reactive oxygen species and enhancement by NADH // Free Radical Biology and Medicine. 1999. Vol. 27. No. 11–12. Pp. 1367–1377.

15. Chen A. C., Martin A. J., Choy B., et al. A phase 3 randomized trial of nicotinamide for skincancer chemoprevention // New England Journal of Medicine. 2015. Vol. 373. No. 17. Pp. 1618–1626.

16. Escudero-Góngora M. M., Fernández-Peñas P. Nicotinamide: New indications in dermatology // Actas Dermo-Sifiliográficas (English Edition). 2016. Vol. 107. No. 9. Pp. 777–778.

17. Kumar M., Jaiswal S., Singh R., Srivastav G., Singh P., Yadav T. N., Yadav R. A. *Ab initio* studies of molecular structures, conformers and vibrational spectra of heterocyclic organics: I. Nicotinamide and its N-oxide // Spectrochimica Acta. Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. 2010. Vol. 75. No. 1. Pp. 281–292.

18. Chlopicki S., Swies J., Mogielnicki A., Buczko W., Bartus M., Lomnicka M., Adamus J., Gębicki J. 1-Methylnicotinamide (MNA), a primary metabolite of nicotinamide, exerts anti-thrombotic activity mediated by a cyclooxygenase-2/prostacyclin pathway // British Journal of Pharmacology. 2007. Vol. 152. No. 2. Pp. 230–239.

19. Li J., Bourne S. A., Caira M. R. New polymorphs of isonicotinamide and nicotinamide // Chemical Communications. 2011. Vol. 47. No. 5. Pp. 1530–1532.

20. Gholivand K., Oroujzadeh N., Afshar F. New organotin (IV) complexes of nicotinamide, isonicotinamide and some of their novel phosphoric triamide derivatives: Syntheses, spectroscopic study and crystal structures // Journal of Organometallic Chemistry. 2010. Vol. 695. No. 9. Pp. 1383–1391.

21. Kulkarni S. A., McGarrity E. S., Meekes H., ter Horst J. H. Isonicotinamide self-association: The link between solvent and polymorph nucleation // Chemical Communications. 2012. Vol. 48. No. 41. Pp. 4983–4985.

22. Chen N., Jia Zh.-P., Wang H.-Q., Zhu L.-Y., Hu Y.-G. Dilution enthalpies and enthalpic pairwise self-interactions of nicotinamide and isonicotinamide in (dimethylformamide + water) and (dimethyl sulfoxide + water) mixed solvents at 298.15 K // Journal of Chemical & Engineering Data. 2014. Vol. 59. No. 7. Pp. 2324–2335.

23. Chen A. C., Damian D. L. Nicotinamide and the skin // Australian Journal of Dermatology. 2014. Vol. 55. No. 3. Pp. 169–175.

24. Liu R. H. Health benefits of fruit and vegetables are from additive and synergistic combinations of phytochemicals // The American Journal of Clinical Nutrition. 2003. Vol. 78. No. 3. Pp. 517S–520S.

25. **Crowe K. M.** Designing functional foods with bioactive polyphenols: Highlighting lessons learned from original plant matrices // Journal of Human Nutrition and Food Science. 2013. Vol. 1. No. 3. Pp. 205–450.

26. Bolton S., Null G. Caffeine, psychological effect, use and abuse // Journal of Orthomolecular

St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 1

Psychiatry. 1981. Vol. 10. Pp. 202-211.

27. Clifford M. N., Wight J. The measurement of feruloylquinic acids and caffeoylquinic acids in coffee beans. Development of the technique and its preliminary application to green coffee beans // Journal of the Science of Food and Agriculture. 1976. Vol. 27. No. 1. Pp. 73–84.

28. **Barone J. J.**, Roberts H. Human consumption of caffeine (Chapter IV) // Caffeine: perspectives from recent research, by Dews P. B. (Editor). Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag: 1984, 280 p. Pp. 59–73.

29. Knight C. A., Knight I., Mitchell D. C., Zepp J. E. Beverage caffeine intake in U.S. consumers and subpopulations of interest: Estimates from the share of intake panel survey // Food and Chemical Toxicology. 2004. Vol. 42. No. 12. Pp. 1923–1930.

30. Barone J. J., Roberts H. R. Caffeine consumption // Food and Chemical Toxicology. 1996. Vol. 34. No. 1. Pp. 119–129.

31. Carrillo J. A., Benitez J. Clinically significant pharmacokinetic interactions between dietary caffeine and medications // Clinical Pharmacokinetics. 2000. Vol. 39. No. 2. Pp.127–153.

32. Dlugosz L., Bracken M. B. Reproductive effects of caffeine: A review and theoretical analysis // Epidemiologic Reviews. 1992. Vol. 14. No. 1. Pp. 83–100.

33. **Reedijk J.** New clues for platinum antitumor chemistry: Kinetically controlled metal binding to DNA // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America // 2003. Vol. 100. No. 7. Pp. 3611–3616.

34. **Patrick G. L.** An introduction to medicinal chemistry. The 5-th edition. Oxford, UK: Oxford University Press, 2013. 814 p.

35. Rosu T., Pasculescu S., Lazar V., Chifiriuc C., Cernat R. Copper (II) complexes with ligands derived from 4-amino-2, 3-dimethyl-1-phenyl-3-pyrazolin-5-one: Synthesis and biological activity // Molecules. 2006. Vol. 11. No. 11. Pp. 904–914.

36. Filho V. C., Corrкa R., Vaz Z., Calixto J. B., Nunes R. J., Pinheiro T. R., Andricopulo A. D., Yunes R. A. Further studies on analgesic activity of cyclic imides // Il Farmaco. 1998. Vol. 53. No. 1. Pp. 55–57.

37. Turan-Zitouni G., Sivaci M., Kiliç F. S., Erol K. Synthesis of some triazolyl-antipyrine derivatives and investigation of analgesic activity // European Journal of Medical Chemistry. 2001. Vol. 36. No. 7. Pp. 685–689.

38. Deepa K., Madhu N. T., Radhakrishnan P. K. Cadmium (II) complexes of 1, 2-di (imino-4-antipyrinyl) ethane // Synthesis and Reactivity in Inorganic Metal-Organic and Nano-Metal Chemistry. 2005. Vol. 35. No. 10. Pp. 883–888.

39. Dilip C. S., Thangaraj V., Raj A. P. Synthesis, spectroscopic characterization, biological and DNA cleavage properties of complexes of nicotinamide // Arabian Journal of Chemistry. 2016. Vol. 9. Supplement 1. September. Pp. S731–S742.

40. Smith N. A., Zhang P., Salassa L., Habtemariam A., Sadler P. J. Synthesis, characterization and dynamic behavior of photoactive bipyridyl ruthenium (II)-nicotinamide complexes // Inorganica Chimica Acta. 2017. Vol. 454. 1 January. Pp. 240–246.

41. Hussain M. A., Diluccio R. C., Maurin M. B. Complexation of moricizine with nicotinamide and evaluation of the complexation constants by various methods // Journal of Pharmaceutical Sciences. 1993. Vol. 82. No. 1. Pp. 77–79.

42. Bogdanova S. V., Sidzhakova D., Karaivanova V., Georgieva Sv. Aspects of the interactions between indomethacin and nicotinamide in solid dispersions // International Journal of Pharmaceutics. 1998. Vol. 163. No. 1–2. Pp. 1–10.

43. Evstigneev M. P., Evstigneev V. P., Santiago A. A. H., Davies D. B. Effect of a mixture of caffeine and nicotinamide on the solubility of vitamin (B2) in aqueous solution // European Journal of Pharmaceutical Sciences. 2006. Vol. 28. No. 1. Pp. 59–66.

44. Abraha A., Gholap A., Belay A. Investigation of self-association, optical transition probability and hetero-association with chlorogenic acid of nicotinamide using UV-Vis spectroscopy // International Journal of Physical Sciences. 2016. Vol. 11. No. 21. Pp. 269–278.

45. Guttman D. E., Brooke D. Solution phase interaction of nicotinamide with ascorbic acid // Journal of Pharmaceutical Sciences. 1963. Vol. 52. No. 10. Pp. 941–945.

46. **Oberoi L. M., Alexander K. S., Riga A. T.** Study of interaction between ibuprofen and nicotinamide using differential scanning calorimetry, spectroscopy, and microscopy and formulation of a fast-acting and possibly better ibuprofen suspension for osteoarthritis patients // Journal of

Pharmaceutical Sciences. 2005. Vol. 94. No. 1. Pp. 93-101.

47. Ayranci E., Duman O. Binding of fluoride, bromide and iodide to bovine serum albumin studied with ion-selective electrodes // Food Chemistry. 2004. Vol. 84. No. 4. Pp. 539–543.

48. Ayranici E., Duman O. Binding of lead ion to bovine serum albumin studied by ion-selective electrode // Protein & Peptide Letters. 2004. Vol. 11. No. 4. Pp. 331–337.

49. Tunc S., Duman O., Bozoglan B. K. Studies on the interaction of chloroquine diphosphate and phenelzine sulfate drugs with human serum albumin and human hemoglobin protein by spectroscopic techniques // Journal of Luminescence. 2013. Vol. 140. August. Pp. 87–94.

50. Tunc S., Duman O., Soylu I., Bozoglan B. K. Study on the binding of dichlorprop and diquat dibromide herbicides to human serum albumin by spectroscopic methods // Journal of Hazardous Materials. 2014. Vol. 273. 30 May. Pp. 36–43.

51. Bozoglan B. K., Tunc S., Duman O. Investigation of neohesperidin dihydrochalcone binding to human serum albumin by spectroscopic methods // Journal of Luminescence. 2014. Vol. 155. November. Pp. 198–204.

52. Albrecht C., Lakowicz J. R. Principles of fluorescence spectroscopy // Analytical and Bioanalytical Chemistry. 2008. Vol. 390. No. 5. Pp. 1223–1224.

53. Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии. Пер. с англ. Глава 9. Тушение флуоресценции. С. 262–299. М.: Мир, 1986. 496 с.

54. Paramaguru G., Kathiravan A., Selvaraj S., Venuvanalingam P., Renganathan R. Interaction of anthraquinone dyes with lysozyme: Evidences from spectroscopic and docking studies // Journal of Hazardous Materials. 2010. Vol. 175. No. 1–3. Pp. 985–991.

55. Bowen E. J., Wokes F. Fluorescence of solutions. London: Longmans Green and Co., 1953. 91 p.

56. Паркер С. А. Люминесценция растворов. Пер. с англ. М.: Мир, 1972. 510 с.

57. Visser A. J. W. G., van Hoek A. The fluorescence decay of reduced nicotinamides in aqueous solution after excitation with a UV-mode locked Ar ion laser // Photochemistry and Photobiology. 1981. Vol. 33. No. 1. Pp. 35–40.

58. Эткинс П., де Паула Дж. Физическая химия. В трех частях. Пер. с англ. М.: Мир, 2007. 496 с.

59. Chou K. C., Jiang S. P. Studies on the rate of diffusion-controlled reactions of enzymes // Scientia Sinica. 1974. Vol. 17. Pp. 664–680.

60. Kang J., Liu Y., Xie M.-X., Li S., Jiang M., Wang Y.-D. Interactions of human serum albumin with chlorogenic acid and ferulic acid // Biochimica et Biophysica Acta. 2004. Vol. 1674. No. 2. Pp. 205–214.

61. Wang Z., Wang N., Han X., Wang R., Chang J. Fluorescence quenching and molecular docking study on the binding of four hydroxyanthraquinones to FTO // Physics and Chemistry of Liquids. 2018. Vol. 56. No. 4. Pp. 482–495.

62. Guo Y., Liu B., Li Z., Zhang L., Lv Y. Study of the combination reaction between drugs and bovine serum albumin with methyl green as a fluorescence probe // Journal of Chemical and Pharmaceutical Research. 2014. Vol. 6. No. 5. Pp. 968–974.

THE AUTHORS

ABRAHA Ataklti Gebreyohanes

Samara University, Department of Physics, Samara, Ethiopia P.O. Box 132, Afar, Samara, Ethiopia atklt.physics@gmail.com ORCID: 0000-0001-8407-2113

BELAY Abebe Gemta

Adama Science and Technology University, Applied Physics Program, Ethiopia P. O. Box 1888, Adama, Ethiopia abebebelay96@gmail.com ORCID: 0000-0001-5212-8397 St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 1

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АБРАХА Атаклти Гебрейоханес — PhD, доцент физического факультета Самарского университета, г. Самара, Эфиопия. P.O. Box 132, Afar, Samara, Ethiopia atklt.physics@gmail.com

ORCID: 0000-0001-8407-2113

БЕЛЭЙ Абебе Гемта — PhD, адъюнкт-профессор Университета науки и технологий Адамы, программа прикладной физики, г. Адама, Эфиопия.

P. O. Box 1888, Adama, Ethiopia abebebelay96@gmail.com ORCID: 0000-0001-5212-8397

Received 22.11.2022. Approved after reviewing 16.12.2022. Ассерted 17.12.2022. Статья поступила в редакцию 22.11.2022. Одобрена после рецензирования 16.12.2022. Принята 17.12.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2023

Научная статья УДК 54.022 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16110

СПОСОБЫ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ МИДИ-ФУЛЛЕРЕНОВ НА ПРИМЕРЕ ИЗОМЕРОВ С₂₂, С₂₄ И С₂₆

А. Н. Матвиенко 🖾

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

[™] matvienko_an@spbstu.ru

Аннотация. В работе систематизированы возможные способы образования изомеров миди-фуллеренов, а именно C_{22} , C_{24} и C_{26} . Известны три наиболее простых механизма их получения: слияние углеродных куполов, имеющих одинаковую симметрию; слияние фуллеренов, имеющих совместимую симметрию; встраивание углеродных димеров в исходные фуллерены. Структуры с минимальной энергией образуются по третьему механизму и сохраняют топологическую симметрию третьего порядка. Порядок симметрии рассматриваемых фуллеренов изменяется от третьего к шестому. Проведенное геометрическое моделирование в совокупности с анализом энергий образования структур дает исследователям ясное представление о структурных характеристиках сформированных фуллеренов.

Ключевые слова: изомер, периодическая система, реакция синтеза, рост, фуллерен, энергия

Для цитирования: Матвиенко А. Н. Способы формирования структуры миди-фуллеренов на примере изомеров С₂₂, С₂₄ и С₂₆ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 1. С. 125–131. DOI: https://doi. org/10.18721/ JPM.16110

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии СС BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16110

THE WAYS TO FORM MIDI-FULLERENS STRUCTURE EXEMPLIFIED BY C₂₂, C₂₄ AND C₂₆ ISOMERS

A. N. Matvienko 🖂

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

[™] matvienko_an@spbstu.ru

Abstract. In this paper, the possible ways of forming the midi-fullerene isomers, namely C_{22} , C_{24} and C_{26} , have been systematized. Three simplest mechanisms for their synthesizing are known. They are the fusion of carbon cupolas having the same symmetry; the fusion of fullerenes having compatible symmetry; embedding carbon dimers into initial fullerenes. The structures with minimal energy were formed through the use of the third mechanism retaining the topological three-fold symmetry. The symmetry order of studied fullerenes changed from the third to the sixth. The geometric modeling carried out in conjunction with the analysis of structures' formation energies gives researchers a clear idea of the structure of the resulting fullerenes.

Keywords: isomer, periodic system, fusion reaction, growth, fullerene, energy

© Матвиенко А. Н., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

For citation: Matvienko A. N., The ways to form midi-fullerens structure exemplified by C_{22} , C_{24} and C_{26} isomers, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1) (2023) 125–131. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16110

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons. org/licenses/by-nc/4.0/)

Вступление

Периодическая система основных фуллеренов, основанная на принципах симметрии, представлена в работе [1]. Идея такой системы связана с пространственной изомерией молекул — явлением, которое состоит в существовании молекул, имеющих одинаковую молекулярную массу и состав, но разное положение атомов в пространстве, и, следовательно, обладающих разными химическими и физическими свойствами [2, 3].

Наиболее простыми механизмами получения новых фуллеренов, в частности изомеров, которые выделяют их из других возможных, являются следующие:

слияние углеродных куполов, имеющих одинаковую симметрию [4];

слияние фуллеренов, обладающих совместимой симметрией [5];

встраивание углеродных димеров в исходные фуллерены [6].

В данной работе представлены структуры и энергии трех таких фуллеренов и их изомеров: C_{22} , C_{24} и C_{26} , полученных с использованием указанных механизмов.

Цель настоящей работы — продемонстрировать применение способов получения фуллеренов, которые помогли найти фуллерены, различающиеся пространственным расположением своих атомов.

Однако существуют и другие изомеры, которые имеют одинаковое положение атомов, но различаются количеством и положением одинарных и двойных связей. В результате они также обладают разной энергией и могут быть названы электронными изомерами.

В работе представлены структуры фуллеренов двух крайних электронных конфигураций:

только с одинарными связями,

с одинарными и двойными связями (при условии, что максимальное количество возможных двойных связей расположено симметрично).

Формирование изомеров фуллерена C₂₂ (топологическая симметрия)

Приведем два простых способа получения новых фуллеренов, образующихся путем встраивания углеродных димеров в исходные фуллерены.

І. Встраивание димера в шестиугольник. Начальной конфигурацией является фуллерен C_{20} . Он состоит из трех квадратов, трех шестиугольников и шести пятиугольников и обладает симметрией третьего порядка [4]. Для изучения роста фуллеренов эффективнее всего применить механизм, предложенный М. Эндо и Х. В. Крото в 1992 году [7]. Согласно выдвинутому ими механизму, димер углерода встраивается в один из шестиугольников исходного фуллерена (фуллерен C_{20}). Такая операция приводит к растяжению и разрыву ковалентных связей в соединении C_{20} , которые параллельны возникающим растягивающим силам. В результате возникает новая атомная конфигурация и происходит увеличение массы двух атомов углерода. Строго говоря, механизм Эндо – Крото относится к димеру с одной связью. На основе предыдущих исследований было сделано заключение, что во многих случаях разумно рассматривать также димер с двойной связью.

Такое встраивание превращает фуллерен C_{20} (начальная конфигурация) в фуллерен C_{22} . Это сильно влияет только на один шестиугольник и два соседних квадрата. Шестиугольник превращается в два пятиугольника, а соседние квадраты становятся пятиугольниками. В результате получается кластер из четырех пятиугольников. По аналогии с работой [1], рассмотрим димер как промежуточный дефект и предположим, что фуллерен C_{22} обладает топологической симметрией третьего порядка. Полученный фуллерен содержит один квадрат, десять пятиугольников и два шестиугольника (рис. 1, *a*). Его можно назвать три-гекса₃-пента₉ триакаидекаэдром C_{22} .

[©] Matvienko A. N., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.



Рис. 1. Структуры фуллерена С₂₂, полученные способами I (*a*) и II (*b*). Энергии образования изомеров сведены в таблицу

II. Встраивание димера в пятиугольник. Начальная атомная конфигурация представляет собой правильный многогранник. Он состоит из двенадцати пятиугольников и известен как одно из пяти правильных тел Платона [4]. По аналогии с внедрением Эндо – Крото, когда углеродный димер обычно встраивается в противоположные стороны шестиугольника, можно представить другой тип внедрения. Здесь углеродный димер встроен в пятиугольник, параллельный одной из его сторон. В результате новый многогранник C_{22} сохраняет только одну ось симметрии, состоящую из трех частей (рис. 1, *b*).

Формирование изомеров фуллерена C₂₄ (топологическая симметрия)

Приведем теперь шесть способов получения новых фуллеренов путем встраивания углеродных димеров в исходные фуллерены.

III. Встраивание димера в фуллерен C₂₂. Исходный фуллерен состоит из двух шестиугольников, десяти пятиугольников и одного квадрата. Встраивание димера в один из двух шестиугольников превращает фуллерен C₂₂ в фуллерен C₂₄. Аналогично реакции

$$\mathbf{C}_{20} + \mathbf{C}_2 \rightarrow \mathbf{C}_{22},$$

один из двух шестиугольников превращается в два соседних пятиугольника, его сосед квадрат — в пятиугольник, а его сосед пятиугольник — в шестиугольник. В результате получается изомер, обладающий симметрией вращения-отражения шестого порядка. Однако, чтобы не терять связь с исходным фуллереном, можно рассматривать полученный фуллерен как имеющий топологическую симметрию третьего порядка. Конфигурация способна включать в себя еще один димер, что возвращает фуллерен C₂₆ в группу симметрии третьего порядка периодической системы основных фуллеренов.

Таким образом, можно рассматривать отсутствующий димер как дефект «вакансии». И поэтому можно также предположить, что фуллерен C_{22} обладает топологической симметрией третьего порядка. Полученный фуллерен содержит двенадцать пятиугольников и два шестиугольника. Его можно назвать «пента₁₂-гекса₂-тетракайдекаэдром C_{24} ».

IV. Слияние двух куполов С₁₂, имеющих симметрию третьего порядка. В работе [2] для реакции

$$C_{12} + C_{12} \rightarrow C_{24}$$

было показано, что возможны два типа соединения: зеркальная симметрия и симметрия вращения-отражения. В первом случае (рис. 2, a) нижний купол является зеркальной копией верхнего. Полученный фуллерен содержит два треугольника, три квадрата и девять шестиугольников. Во втором случае (рис. 2, b) нижний купол формируется как поворотное отражение верхнего.

Структуры, показанные на рис. 2, *а* и *b*, были названы «многогранником три₂тетра₃-гекса₀» и «усеченным додекаэдром» соответственно.

V. Слияние двух куполов С₁₂, имеющих симметрию четвертого порядка. Эта модель также изучалась в работе [8]. Окончательная атомная конфигурация состоит из двух квадратов, восьми пятиугольников и четырех шестиугольников, причем шестиугольники имеют форму лодки. Это тетра₂-пента₈-гекса₄-многогранник.



Рис. 2. Структуры фуллерена С₂₄, полученные слиянием углеродных куполов, имеющих одинаковую симметрию (способ IV); представлены два типа соединения: зеркальная симметрия (*a*) и симметрия вращения-отражения (*b*). Энергии образования изомеров сведены в таблицу

VI. Слияние двух мини-фуллеренов: $C_8 ext{ u } C_{16}$. Такая конфигурация куба $C_8 ext{ c }$ квадратным бочонком C_{16} была рассмотрена в статье [5] на основе теории графов. Реакция возможна, поскольку обе конфигурации обладают симметрией четвертого порядка и, следовательно, совместимы друг с другом. Однако этот фуллерен C_{24} в целом идентичен фуллерену, полученному путем слияния двух куполов C_{12} , имеющих симметрию четвертого порядка. Поэтому есть только другой способ получения этого фуллерена.



Рис. 3. Структуры фуллерена С₂₄, полученные способами VII (*a*) и VIII (*b*), а именно – слиянием фуллеренов, обладающих совместимой симметрией. Энергии образования изомеров сведены в таблицу

VII. Слияние плоского кластера C_8 с куполом C_{16} . Здесь обе конфигурации имеют симметрию четвертого порядка. Результаты показаны на рис. 3, *а*. Фуллерен содержит шесть квадратов и восемь шестиугольников. Этот изомер представляет собой усеченный октаэдр (кубоктаэдр), обладающий симметрией четвертого порядка.

VIII. Слияние двух мини-фуллеренов С₁₂. Здесь обе конфигурации имеют симметрию шестого порядка. На первый взгляд кажется, что это новая конфигурация (рис. 3, *b*). Однако, как и прежде, этот фуллерен С₂₄ в целом идентичен фуллерену, построенному из многогранника С₂₂ путем встраивания димера в шестиугольник. В нашем случае это многогранник, имеющий симметрию шестого порядка. Это многогранник гекса₂-пента₁₂.

Формирование изомеров фуллерена С₂₆

Рассмотрим случай образования фуллерена с обычной симметрией.

IX. Фуллерен с симметрией третьего порядка. Исходный фуллерен состоит из двенадцати пятиугольников и двух шестиугольников. Встраивание димера в шестиугольник на заднем плане превращает фуллерен C_{24} в фуллерен C_{26} . Это идеальный фуллерен, имеющий симметрию третьего порядка. Полученный фуллерен содержит двенадцать пятиугольников и три шестиугольника (рис. 4, *a*) [9]. Его можно назвать пента₁₂-гекса₃-пентекаидекаэдром C_{26} . Вернемся теперь к механизму образования фуллерена с топологической симметрией. **Х. Встраивание димера в многогранник** C_{24} . Исходный идеальный фуллерен представлен на рис. 2, *а*. Встраивание димера в шестиугольник на заднем плане превращает фуллерен C_{24} в фуллерен C_{26} . Поскольку он содержит дополнительное промежуточное звено, это несовершенный фуллерен, обладающий топологической симметрией третьего порядка. Полученный фуллерен содержит два треугольника, один квадрат, четыре пятиугольника и восемь шестиугольников (рис. 4, *b*) [10]. Его можно назвать три₂-тетра-пента₄гекса₈-пентекаидекаэдром C_{26} .



Рис. 4. Встраивание углеродного димера в исходный идеальный фуллерен; показаны случаи с обычной (*a*) и топологической (*b*) симметрией. Энергии образования изомеров сведены в таблицу

Энергии формирования полученных изомеров

Таблица

Химическая	Номер способа		Энергия, кДж/моль		
формула			$E_{\rm max}$	E_{\min}	
C	Ι		2170	1300	
C ₂₂	II		1673	795	
	III		1198	697	
	IV	а	4346	2630	
C		b	3432	2106	
C ₂₄	VI VII VIII		2452	853	
			3046	2067	
			1778	697	
C	IX		831	801	
C_{26}	X		3613	2582	

Рассчитанные значения энергии образования изомеров фуллеренов

Примечание. Способ IV включает зеркальную симметрию (a) и симметрию вращения-отражения (b).

Энергии образования различных изомеров, рассмотренных в настоящей статье, были определены с использованием прикладного вычислительного пакета Avogadro (см. таблицу). Энергия $E_{\rm min}$ рассчитана для фуллеренов с одинарными химическими связями, $E_{\rm max}$ – для фуллеренов с двойными связями.

Фуллерен С₂₀, у которого $E_{\min} = 1083$ кДж/моль [9], служит в данной работе исходной структурой для построения структур, состоящих из большего количества атомов углерода. Данный фуллерен вместе с соединением С₂₆, у которого $E_{\min} = 801$ кДж/моль, можно

считать идеальными фуллеренами, обладающими симметрией третьего порядка. У них энергии образования минимальны. Другими словами, совершенные фуллерены не производят при построении структуры с еще меньшей энергией. Единственно возможным механизмом образования таких фуллеренов является третий, а именно — путем встраивания углеродных димеров в исходные фуллерены. Следует отметить, что в дополнение к таким фуллеренам минимальная энергия образования характерна для фуллеренов с топологической симметрией третьего и четвертого порядков (способы II, III, VI и VIII, см. таблицу). Они образуются по механизмам, представленным в настоящей работе.

Заключение

Представленное исследование содержит систематизацию возможных способов образования изомеров миди-фуллеренов, а именно C_{22} , C_{24} и C_{26} . Как было указано во введении, существует три наиболее естественных механизма их конструирования. Анализ достигнутых результатов приводит к выводу, что идеальные фуллерены с минимальной энергией получаются по третьему механизму, а именно — путем встраивания углеродных димеров в исходные фуллерены. Минимальной энергией обладают и фуллерены с топологической симметрией. Стоит подчеркнуть, что представленные фуллерены сохраняют топологическую симметрию третьего порядка, а также видны изменения порядка симметрии с третьего на шестой. Напомним, что под топологической симметрией подразумевается несовершенство в виде промежуточного либо свободного димера.

Таким образом, геометрическое моделирование позволяет получить четкое представление о структуре образующихся фуллеренов.

Полученные в работе результаты представляются автору полезными для исследователей как в области химических технологий, так и в практических приложениях при разработке самых разных устройств на основе фуллеренов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Melker A. I., Krupina M. A. Modeling growth of midi-fullerenes from C_{48} to C_{72} // Materials Physics and Mechanics. 2017. Vol. 34. No. 1. Pp. 29–36.

2. Sánchez-Bernabe F. J. Towards a periodic pattern in classical and nonclassical fullerenes with tetrahedral structure // Materials Physics and Mechanics. 2020. Vol. 45. No. 1. Pp. 79–86.

3. Poklonski N. A., Ratkevich S. V., Vyrko S. A. Quantum-chemical calculation of carbododecahedron formation in carbon plasma // The Journal of Physical Chemistry. A. 2015. Vol. 119. No. 34. Pp. 9133–9139.

4. Melker A. I., Krupina M. A., Matvienko A. N. Nucleation and growth of fullerenes and nanotubes having four-fold symmetry // Materials Physics and Mechanics. 2021. Vol. 47. No. 2. Pp. 315–343.

5. Amaya T., Natata T., Hirao T. Synthesis of highly strained π -bowls from sumanene // Journal of the American Chemical Society. 2009. Vol. 131. No. 31. Pp. 10810–10811.

6. Tunuguntla R. H., Henley R. Y., Yao Y.-C., Pham T. A., Wanunu M., Noy A. Enhanced water permeability and tunable ion selectivity in subnanometer carbon nanotube porins // Science. 2017. Vol. 357. No. 6353. Pp. 792–796.

7. Endo M., Kroto H. W. Formation of carbon nanofibers // The Journal of Physical Chemistry. 1992. Vol. 96. No. 17. Pp. 6941–6943.

8. Schwerdtfeger P., Wirz L. N., Avery J. The topology of fullerenes // WIREs Computational Molecular Science. 2015. Vol. 5. No. 1. Pp. 96–145.

9. Melker A. I., Matvienko A. N. Natural isomers of fullerenes from C_{20} to C_{28} // Materials Physics and Mechanics. 2020. Vol. 45. No. 1. Pp. 49–59.

10. Amiri H., Shepard K. L., Nickolls C., Sánchez R. H., Single-walled carbon nanotubes: Mimics of biological channels // Nano Letters. 2017. Vol. 17. No. 2. Pp. 1204–1211.

REFERENCES

1. Melker A. I., Krupina M. A., Modeling growth of midi-fullerenes from C_{48} to C_{72} , Materials Physics and Mechanics. 34 (1) (2017) 29–36.

2. Sánchez-Bernabe F. J., Towards a periodic pattern in classical and nonclassical fullerenes with tetrahedral structure, Materials Physics and Mechanics. 45 (1) (2020) 79–86.

3. Poklonski N. A., Ratkevich S. V., Vyrko S. A., Quantum-chemical calculation of carbododecahedron formation in carbon plasma, J. Phys. Chem. A. 119 (34) (2015) 9133–9139.

4. Melker A. I., Krupina M. A., Matvienko A. N., Nucleation and growth of fullerenes and nanotubes having four-fold symmetry, Materials Physics and Mechanics. 47 (2) (2021) 315–343.

5. Amaya T., Natata T., Hirao T., Synthesis of highly strained π -bowls from sumanene, J. Am. Chem. Soc. 131 (31) (2009) 10810–10811.

6. Tunuguntla R. H., Henley R. Y., Yao Y.-C., et al., Enhanced water permeability and tunable ion selectivity in subnanometer carbon nanotube porins, Science. 357 (6353) (2017) 792–796.

7. Endo M., Kroto H. W., Formation of carbon nanofibers, J. Phys. Chem. 96 (17) (1992) 6941–6943.

8. Schwerdtfeger P., Wirz L. N., Avery J., The topology of fullerenes, WIREs Comput. Mol. Sci. 5 (1) (2015) 96–145.

9. Melker A. I., Matvienko A. N., Natural isomers of fullerenes from C_{20} to C_{28} , Materials Physics and Mechanics. 45 (1) (2020) 49–59.

10. Amiri H., Shepard K. L., Nickolls C., Sánchez R. H., Single-walled carbon nanotubes: Mimics of biological channels, Nano Lett. 17 (2) (2017) 1204–1211.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

МАТВИЕНКО Александра Николаевна — инженер Высшей школы механики и процессов управления, ассистент (того же подразделения) Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 matvienko_an@spbstu.ru ORCID: 0000-0002-3012-1407

THE AUTHOR

MATVIENKO Aleksandra N. Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia matvienko_an@spbstu.ru ORCID: 0000-0002-3012-1407

Статья поступила в редакцию 15.11.2022. Одобрена после рецензирования 22.11.2022. Принята 22.11.2022. Received 15.11.2022. Approved after reviewing 22.11.2022. Accepted 22.11.2022.

Механика

Научная статья УДК 629.7.036 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16111

МЕТОД ЗАДАНИЯ ЦЕНТРОБЕЖНЫХ НАГРУЗОК ВАЛОВ ПРИ РАСЧЕТЕ ДИСБАЛАНСНОГО ПОВЕДЕНИЯ РОТОРОВ

А. Р. Усманов 🖾, В. С. Модестов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

[™] ysman2d@gmail.com

Аннотация. В статье предложен расчетный метод задания центробежных нагрузок роторов свободной турбины, учитывающий дисбаланс ее валов. Традиционный метод этот эффект не учитывает, тогда как при приближении к критическим частотам дисбаланс может привести к значительным прогибам ротора. На примере системы из трех валов описан метод задания центробежных нагрузок при решении задачи теории упругости в балочной аппроксимации с применением метода конечных элементов и метода разложения по формам собственных колебаний. Рассмотрены нагрузки от разнотолщинности, биения наружной поверхности и биения посадочных поверхностей. Проведен эксперимент, который состоял в вибрационных испытаниях газотурбинного двигателя. На тестовой задаче показано, что учет дисбаланса валов приводит к результатам, более близким к экспериментальным.

Ключевые слова: дисбаланс, прогиб вала, центробежная нагрузка, разнотолщинность, разностенность, радиальное биение, допуск

Для цитирования: Усманов А. Р., Модестов В. С. Метод задания центробежных нагрузок валов при расчете дисбалансного поведения роторов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 1. С. 132–139. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16111

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии СС BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16111

METHOD OF SPECIFYING THE CENTRIFUGAL LOADS OF SHAFTS IN CALCULATION OF THE ROTOR UNBALANCE BEHAVIOR

A. R. Usmanov [⊠], V. S. Modestov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

[™] ysman2d@gmail.com

Abstract. In the paper, a calculation method for specifying the centrifugal loads (SCLM) of free turbine rotors (turbine shaft unbalance method) has been put forward. The traditional method does not take this effect into account whereas the unbalance can lead to significant rotor deflections when approaching the critical frequencies. The SCLM in the solution of the problem within the elasticity theory in beam approximation using the finite element method (FEM) and the eigenfunction expansion method was exemplified by a three shaft system. The

© Усманов А. Р., Модестов В. С., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

loads caused by thickness variation, radial runout of outside surfaces and the one of mounting surfaces were considered. An experiment consisting of vibration tests of a gas turbine engine was carried out. The test task showed that taking the shaft unbalance into account gave results being closer to the experimental ones.

Keywords: unbalance, shaft deflection, centrifugal load, thickness variation, radial runout, tolerance

For citation: Usmanov A. R., Modestov V. S., Method of specifying the centrifugal loads of shafts in calculation of the rotor unbalance behavior, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1) (2023) 132–139. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16111

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons. org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Наиболее распространенной причиной появления рабочего прогиба ротора является смещение центров тяжести его сечений из-за неточности изготовления деталей.

Основной метод снижения рабочего прогиба ротора — это его балансировка путем добавления масс, компенсирующих дисбаланс деталей. В работе [1] показано, что балансировка гибкого ротора как жесткого может привести к увеличению нагрузок на опоры при работе на критических скоростях вращения. Другой подход к снижению рабочего прогиба гибких роторов заключается в оптимизации их конструкции через математическое моделирование.

Для того чтобы задать исходные нагрузки при расчетном определении рабочего прогиба гибких роторов, в настоящее время применяется задание дисбаланса рабочих колес и остаточного дисбаланса в плоскостях балансировки ротора [2 – 5]. При этом не учитывается дисбаланс вала, который при приближении к критическим частотам может привести к значительным прогибам ротора.

Цель настоящей статьи — разработать такой метод задания центробежных нагрузок, который бы учитывал дисбаланс валов, и сравнить его возможности с традиционным методом.

Методы исследования

Задача теории упругости в балочной аппроксимации с применением метода конечных элементов и метода разложения по формам собственных колебаний сводится к системе уравнений следующего вида [6]:

$$\overline{M}\ddot{e} + \sum_{i=1}^{n_L} \overline{C}_d(i)\dot{e} + \overline{K}e = \overline{Q}(t), \qquad (1)$$

где e – вектор-столбец модальных координат; $\overline{C}_{d}(i)$ – матрица демпфирования *i*-го демпфера; n_{L} – число демпферов; $\overline{M} = q^{T}Mq$; $\overline{K} = q^{T}Kq$; $\overline{Q} = q^{T}Qq$; (M – матрица инерции, K – матрица жесткости, Q – вектор-столбец обобщенных внешних сил в узлах системы, q – матрица собственных форм); t – время.

Если перейти к вращающейся системе координат для вращающихся участков и пренебречь уравновешенными центробежными нагрузками, то можно показать, что система инерционных сил на этих участках сводится к действию неуравновешенных центробежных нагрузок и гироскопических моментов [7].

С учетом этого утверждения система (1) принимает вид

$$\overline{M}\ddot{e} + \left[\overline{C}_{g} + \sum_{i=1}^{n_{L}} \overline{C}_{d}\left(i\right)\right]\dot{e} + \overline{K}e = \overline{Q}(t), \qquad (2)$$

где \overline{C}_{g} – суммарная гироскопическая матрица.

В этом случае неуравновешенные нагрузки задаются как составная часть внешней нагрузки Q.

© Usmanov A. R., Modestov V. S., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Элементы матрицы $\bar{C}_d(i)$ определяются, исходя из аналитического решения уравнений Рейнольдса в области масляной пленки в зазорах между ротором и статором [8].

На примере системы простых цилиндрических валов можно показать (см. доклад [9]), что неуравновешенные центробежные нагрузки валов вызваны воздействием следующих факторов:

разнотолщинность,

радиальное биение наружной поверхности,

радиальное биение посадочных поверхностей.

Покажем, что дисбаланс некоторого сечения вала определяется по формуле

$$\overline{D} = m\mathbf{r},\tag{3}$$

где **г** – радиус-вектор центра тяжести сечения, *m* – масса сечения.

Разобъем сечение вала на элементарные участки ΔS_i , как это показано на рис. 1.

Тогда дисбаланс сечения определяется по формуле

$$\overline{D} \approx \sum_{i=1}^{N} m_i r_i = \sum_{i=1}^{N} \rho \Delta S_i h r_i, \qquad (4)$$

где *h* — толщина сечения, *р* — плотность его материала. Проекция *D*_v дисбаланса сечения выражается как

$$D_{y} \approx \sum_{i=1}^{N} \rho \Delta S_{i} h y_{i}.$$
 (5)

Переходя к пределу, получаем точную формулу для определения проекции D_y:

$$D_{y} = \lim_{\substack{max\Delta S_{i}\to 0\\i}} \sum_{i=1}^{N} \rho \Delta S_{i} h y_{i} = \rho h \int_{S} y dS = \rho h S \frac{\int y dS}{S} = \rho h S y_{c} = m y_{c}, \tag{6}$$

где S – площадь сечения вала, y_c – проекция вектора **r** на ось OY.

Аналогично можно показать, что

$$D_x = mx_c. (7)$$

В итоге доказано, что дисбаланс некоторого сечения вала определяется по формуле (3). Модуль дисбаланса в случае разнотолщинности, с учетом формулы (3), определяется выражением:

$$D = my_c = \frac{md_0^2 s}{2(d^2 - d_0^2)},$$
(8)

где m — масса вала; d, d_0 — внешний и внутренний диаметры сечения вала соответственно; s — значение разнотолщинности, понимаемой как разность между максимальным и минимальным значениями толщины сечения вала.

В случае биения наружной поверхности модуль дисбаланса определяется по формуле

$$D = ma, (9)$$

где *a* — значение биения наружной поверхности вала относительно его опорных поверхностей.

В случае биения посадочной поверхности вала модуль дисбаланса, отнесенного к единице длины вала, определяется по формуле

$$dD(x) = \left(b_{\rm I} - \frac{x}{x_{\rm II}}b_{\rm I}\right)\rho_l dx,\tag{10}$$

где ρ_l — плотность вала на единицу длины, b_l — значение биения первой посадочной поверхности, $x_{\rm II}$ — координата второй посадочной поверхности.



Рис. 1. Сечение вала, на

котором показан элементарный

участок разбиения ΔS_i

В случае дисбаланса рабочего колеса d_{run} и остаточного дисбаланса в плоскостях балансировки d_{res} модуль дисбаланса определяется по формулам:

$$D = d_{run},\tag{11}$$

$$D = d_{res}.$$
 (12)

В общем случае действия на систему пространственной системы, состоящей из *n* сил, формулы проекций перемещений в произвольно выбранных точках в количестве *m* примут вид:

$$\delta_i^x = D_0 \delta_{i0} \cos \varphi_0 + D_1 \delta_{i1} \cos \varphi_1 + \dots + D_n \delta_{in} \cos \varphi_n, \qquad (13)$$

$$\delta_{i}^{y} = D_{0}\delta_{i0}\sin\phi_{0} + D_{1}\delta_{i1}\sin\phi_{1} + \dots + D_{n}\delta_{in}\sin\phi_{n}, \qquad (14)$$

где δ_i^x , δ_i^y — проекции перемещения в *i*-й точке (*i* = 1, 2, ..., *m*); δ_{ij} — перемещение в *i*-й точке от единичного *j*-го дисбаланса D_j ; φ_j — угол *j*-го дисбаланса. Допустим теперь, что случайные величины *s*, *b*, *a*, φ_i , d_{run} , d_{res} являются равномерно распределенными и независимыми, причем каждая случайная величина φ_i распределена в интервале [0, 2π], а максимальные значения всех шести случайных величин определяются значениями допусков.

Если считать каждый фактор независимым, то можно смоделировать случайные величины δ_i^x , δ_i^y генерируя *s*, *b*, *a*, ϕ_i , d_{run} , d_{res} и проводя преобразования по формулам (8) - (14).

Компенсирующий дисбаланс, вызванный балансировкой, является неслучайным и рассчитывается исходя из условия равновесия ротора для каждой реализации случайных величин s, b, a, ϕ_i , d_{run} , без учета d_{res} .

При наличии экспериментальных значений δ_i^E нулевая гипотеза формулируется следующим образом:

моделируемая и экспериментальная выборки δ_i, δ_i^E принадлежат одной генеральной совокупности.

Постановка задачи

Рассмотрим ротор свободной турбины, состоящий из трех валов. Их поперечные сечения показаны на рис. 2, а; область решения уравнений (2) с граничными условиями представлена на рис. 2, b. Требуется рассчитать вертикальную скорость в точке замера.

На рис. 2, b показаны и обозначены следующие граничные условия:

$$\begin{array}{l} 2 - F_{i}^{x,y} / U_{i}^{x,y} = K; \ 3 - F_{i}^{x,y} / U_{i}^{x,y} = K_{x,y}; \\ 4 - U_{i}^{x,y} = U_{j}^{x,y}, \ \theta_{i}^{x,y} = \theta_{j}^{x,y}; \\ 5 - (F_{i}^{x,y} - F_{j}^{x,y}) / (U_{i}^{x,y} - U_{j}^{x,y}) = K_{x,y}, \end{array}$$

где F, U и θ – узловые сила, перемещение и угол поворота, соответственно; K – коэффициент жесткости.

Расчет проводился в шесть этапов.

1. Определение амплитуды вертикальной скорости δ_{ii} в точке замера MP от действия единичных дисбалансов.

2. Генерация выборки s, b, a, ϕ_i, d_{run} .

3. Вычисление для каждой реализации s, b, a, ϕ_i, d_{run} компенсирующих дисбалансов, действующих в плоскостях балансировки ротора и уравновешивающих систему сил, которые вызваны этими факторами.

4. Генерация выборки d_{res} , ϕ , модуля и фазы остаточных дисбалансов в плоскостях балансировки.

5. Вычисление выборки вертикальной скорости в точке замера МР по формулам (8) -(14).

6. Проверка гипотезы о принадлежности расчетной и экспериментальной выборок одной генеральной совокупности по критерию Вилькоксона.

Сформированы два расчетных случая, различающихся действием нагрузок.



Рис. 2. Схематические изображения к постановке задачи о роторе свободной турбины, состоящем из трех валов (ShI, ShII, ShIII): *a* – поперечные сечения валов; *b* – область решения уравнений (2) с граничными условиями (2 – 5), *l* – область решения; RB – жесткая балка; MP – точка замера.

Граничные условия не представлены на рис. ввиду громоздкости (см. текст)

Случай 1. Нагрузки обусловлены разнотолщинностью валов ShI, ShII, ShIII (см. рис. 2), биениями наружной поверхности этих валов, биениями посадочных поверхностей вала ShII, дисбалансом рабочего колеса, а также компенсирующими и остаточными дисбалансами в плоскостях балансировки ротора.

Случай 2. Нагрузки вызваны дисбалансом рабочего колеса, компенсирующими и остаточными дисбалансами в плоскостях балансировки ротора.

Расчет проводился для критической частоты вращения ротора, ближайшей к максимальной частоте рабочего диапазона вращения.

Вертикальную скорость от единичных дисбалансов находили с использованием ПО Dynamics R4, а выборку вертикальной скорости вычисляли при помощи оригинальной авторской программы, написанной на языке Python.

Описание эксперимента

Эксперимент состоял в вибрационных испытаниях свободной турбины в составе газотурбинного двигателя (рис. 3).



Рис. 3. Фотоснимок фрагмента свободной турбины: ShI, ShII, ShIII – валы ротора; МР – точка замера скоростей на жесткой балке RB (см. рис. 2, *b*)

В заданной точке MP двигателя (см. рис. 3), в каждый момент времени фиксировались значения вертикальной виброскорости при постоянной угловой частоте вращения валов ShI – ShIII. Гармоническая составляющая виброскорости с частотой, соответствующей угловой частоте вращения трех валов, выделялась с помощью алгоритма прямого преобразования Фурье. Замеры проводились для 13 двигателей, в которых значения параметров s, b, a, ϕ_i , d_{run} , d_{rgs} для ротора свободной турбины лежат в пределах допусков. Вариация параметров неизбежна вследствие промышленной погрешности при производстве деталей.

Экспериментальное тестирование газотурбинного двигателя позволило сформировать выборку из амплитуд вертикальных виброскоростей.

Анализ результатов

На рис. 4 приведено сравнение экспериментальных и расчетных гистограмм распределения вертикальной виброскорости.



Рис. 4. Сравнение экспериментальной (*E*) и двух расчетных гистограмм (случаи *l* и *2*) распределения амплитуд обезразмеренной вертикальной виброскорости (VVVA/1[mm/s]) контрольной точки MP (см. рис. 2, *b* и 3).

По вертикальной оси отложены безразмерные значения плотности вероятности

Результаты проверки гипотезы о принадлежности расчетных и экспериментальной выборок одной генеральной совокупности приведены в таблице. Анализ полученных результатов показывает, что при учете дисбаланса валов уровень значимости значительно выше, что говорит о более близком соответствии расчетного случая *1* результатам эксперимента.

Таблица

Результаты проверки гипотезы с использованием критерия Вилькоксона

Heren normana orman	Расчетное значение		
Номер расчетного случая	статистики	уровня значимости	
1	23,0	0,1159	
2	0,0	0,0015	

Примечание. При нахождении расчетных значений статистики и уровня значимости использованы расчетная и экспериментальная выборки.

Заключение

Предложен метод задания нагрузок при определении рабочего прогиба ротора, учитывающий дисбаланс валов.

На примере решения тестовой задачи показано, что учет дисбаланса валов дает результаты, более близкие к экспериментальным данным.

Важно отметить, что проведенное исследование предполагало постоянство значений параметров s и a по длине вала, что ограничивает область применения разработанного метода значением длины вала; метод применим только для непротяженных валов.

В дальнейшем для получения более надежных (с большим значением уровня значимости) результатов необходимо провести углубленные исследования, учитывающие влияние таких факторов, как нелинейность жесткости подшипников, переходные процессы в роторе (например, непостоянство крутящего момента) и т. п., а также тестирование газотурбинного двигателя с расширенным объемом экспериментальных выборок.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ласкин А. С., Себелев А. А., Забелин Н. А. Энергетические машины. Вибропрочность и устойчивость элементов турбомашин. Санкт-Петербург: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2018. 128 с.

2. Хаймович А. И., Болотов М. А., Печенина Е. Ю. Модель виртуального уравновешивания жестких роторов // Вестник Самарского университета. Аэрокосмическая техника, технологии и машиностроение. 2022. Т. 21. № 1. С. 99–109.

3. Fegade R., Patel V., Nehete R. S., Bhandarkar B. M. Unbalanced response of rotor using ANSYS parametric design for different bearings // International Journal of Engineering Sciences & Emerging Technologies. 2014. Vol. 7. No. 1. Pp. 506–515.

4. Ahobal N., Ajit prasad S. L. Study of vibration characteristics of unbalanced overhanging rotor // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2019. Vol. 577. P. 012140.

5. Longxi Zh., Shengxi J., Jingjing H. Numerical and experimental study on the multiobjective optimization of a two-disk flexible rotor system // International Journal of Rotating Machinery. 2017. Vol. 2017. January. Pp. 1 –10.

6. Леонтьев М. К., Иванов А. В. Модальный анализ динамических систем роторов // Известия высших учебных заведений. Авиационная техника. 2005. № 3. С. 31–35.

7. Биргер И. А., Шорр Б. Ф., Иосилевич Г. Б. Расчет на прочность деталей машин. М.: Машиностроение, 1993. 640 с.

8. Леонтьев М. К. Конструкция и расчет демпферных опор роторов ГТД. М.: Изд-во МАИ, 1998. 44 с.

9. Усманов А. Р., Модестов В. С. Определение центробежных нагрузок, вызванных разнотолщинностью валов // Неделя науки ФизМех: сборник статей Всероссийской научной конференции. 4 – 9 апреля 2022., г. Санкт-Петербург: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2022. С. 248–250.

10. Брюханов С. А., Крисанов А. Е., Жариков В. В., Филянкин С. В. Влияние теплового дисбаланса на ротор насосно-компрессорного и турбинного оборудования // Евразийский союз ученых. 2015. № 12-5 (21). С. 35-37.

11. Murillo-Marrodán A., García E., Barco J., Cortés F. Analysis of wall thickness eccentricity in the rotary tube piercing process using a strain correlated FE model // Metals. 2020. Vol. 21. No. 8. P. 1045.

REFERENCES

1. Laskin A. S., Sebelev A. A., Zabelin N. A., Energeticheskie mashiny. Vibroprochnost i ustoychivost elementov turbomashin [Energy machines. Vibration resistance and stability of turbomachine elements], POLITEKH-PRESS, St. Petersburg, 2018 (in Russian).

2. Hajmovich A. I., Bolotov M. A., Pechenina E. E., Model of virtual balancing of rigid rotors, Vestnik of Samara University. Aerospace and Mechanical Engineering. 21 (1) (2022) 99–109 (in Russian).

3. Fegade R., Patel V., Nehete R. S., Bhandarkar B. M., Unbalanced response of rotor using ANSYS parametric design for different bearings, Int. J. Eng. Sci. Technol. 7 (1) (2014) 506-515.

4. Ahobal N., Ajit prasad S. L., Study of vibration characteristics of unbalanced overhanging

rotor, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 577 (2019) 012140.

5. Longxi Zh., Shengxi J., Jingjing H., Numerical and experimental study on the multiobjective optimization of a two-disk flexible rotor system, Int. J. Rot. Machinery. 2017 (January) (2017) 1–10.

6. Ivanov A. V., Leont'ev M. K., Modal analysis of dynamic rotor systems, Russian Aeronautics. 48 (3) (2005) 45–53.

Birger I. A., Shorr B. F., Iosilevich G. B., Raschet na prochnost' detaley mashin [The calculation of machine parts strength], Mashinostroenie [Mechanical Engineering], Moscow, 1993 (in Russian).
 Leont'ev M. K., Konstruktsiya i raschet dempfernykh opor rotorov GTD [Design and calculation

of GTE rotors damper supports], Moscow Aviation Institute Publ., Moscow, 1998 (in Russian).

9. Usmanov A. R., Modestov V. S., Determination of centrifugal loads caused by shaft thickness variation, Proceeding of the All-Russian Scientific Conference "Week of Science at FizMekh", 4 – 9 Apr. 2022, POLITEKH-PRESS, St. Petersburg, 2022. 248–250 (in Russian).

10. Bryukhanov S. A., Krisanov A. E., Zharikov V. V., Filyankin S. V., The effect of thermal unbalance on the rotor of pump-compressor and turbine equipment, Eurasian Union of Scientists. (12-5 (21)) (2015) 35–37 (in Russian).

11. Murillo-Marrodán A., García E., Barco J., Cortés F., Analysis of wall thickness eccentricity in the rotary tube piercing process using a strain correlated FE model, Metals. 21 (8) (2020) 1045.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

УСМАНОВ Антон Равильевич — аспирант Высшей школы механики и процессов управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 ysman2d@gmail.com ORCID: 0000-0003-1574-4638

МОДЕСТОВ Виктор Сергеевич — ведущий программист Высшей школы механики и процессов управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 vmodestov@spbstu.ru ORCID: 0000-0003-0845-638X

THE AUTHORS

USMANOV Anton R. Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia ysman2d@gmail.com ORCID: 0000-0003-1574-4638

MODESTOV Victor S. Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia vmodestov@spbstu.ru ORCID: 0000-0003-0845-638X

Статья поступила в редакцию 17.06.2022. Одобрена после рецензирования 11.12.2022. Принята 11.12.2022. Received 17.06.2022. Approved after reviewing 11.12.2022. Accepted 11.12.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2023

Научная статья УДК 531 / 534 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16112

ТЕРМОУПРУГИЕ ПАРАМЕТРЫ СЛОИСТЫХ КОМПОЗИТОВ

Р. В. Разакова^{1⊠}, **Р. А. Турусов**^{1,2}

¹ Московский государственный строительный университет, Москва, Россия;

² Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова РАН, Москва, Россия

[⊠] chernova_riorita@mail.ru

Аннотация. В статье представлены расчеты термоупругих параметров слоистой композиционной структуры (субстрат + адгезив) по методу контактного слоя. Соответствующая математическая модель (учитывает наличие контактного слоя) использована для исследования свойств слоистого стержня, подвергнутого нагреву. Получены и проанализированы температурные зависимости модуля Юнга, КЛТР и термических напряжений для слоистого, составного и полимерного стержней. Для объектов исследования проведено сравнение результатов расчета их эффективных свойств, полученных по классическим формулам смеси и по методу контактного слоя. Доказана важность учета наличия контактного слоя и его параметров при изучении термоупругих характеристик слоистых структур.

Ключевые слова: слоистый композит, адгезионная механика, метод контактного слоя, модуль Юнга, КЛТР

Для цитирования: Разакова Р. В., Турусов Р. А. Термоупругие параметры слоистых композитов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 1. С. 140–151. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16112

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии СС BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16112

THERMOELASTIC PARAMETERS OF LAYERED COMPOSITES R. V. Razakova ¹[∞], R. A. Turusov ^{1,2}

¹National Research Moscow State Civil Engineering University, Moscow, Russia;

² Semenov Institute of Chemical Physics of RAS, Moscow, Russia

^{III} Chernova_riorita@mail.ru

Abstract. The paper presents calculations of thermoelastic parameters of layered composite structure (substrate + adhesive) using the contact layer method. The corresponding mathematical model (taking into account the presence of a contact layer) has been used to study properties of a layered rod subjected to heating. Temperature dependences of Young's modulus, CLTE and thermal stresses for layered, built-up and polymeric specimens were obtained and analyzed. A comparison of the calculation data on the effective properties of objects under investigation obtained by the classical formulae and by the contact layer method was made. The importance of taking into account the contact layer presence and its parameters in the study of thermoelastic characteristics of layered structures was proved.

Keywords: layered composite, adhesive mechanics, contact layer method, Young's modulus, CLTE

© Разакова Р. В., Турусов Р. А., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

For citation: Razakova R. V., Turusov R. A., Thermoelastic parameters of layered composites, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1) (2023) 140–151. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16112

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons. org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Последние несколько десятилетий исследователи всего мира разрабатывают новые композиционные материалы и выделяют в отдельную группу материалы, имеющие слоистую структуру. Такая структура позволяет получать необходимые свойства материала и относительно просто их изготавливать. Слоистые композиционные материалы (СКМ) применяются во многих отраслях промышленности для производства элементов конструкций различного назначения [1]. Примерами таких элементов могут служить стержни, пластины и оболочки. Благодаря особым термоупругим свойствам, высокой прочности, коррозионной стойкости и относительно легкому весу, композиты выступают перспективными конкурентами традиционным материалам.

Для получения достоверных результатов расчета конструкций крайне необходимо умение моделировать физико-механическое поведение применяемого материала. В настоящее время большая часть текущих научных исследований сосредоточена на развитии физико-математических методов расчета эффективных свойств композиционных материалов [2]. В связи с увеличением количества материалов, соединяемых адгезивами, и с появлением новых клеящих веществ, происходит расширение и углубление знаний о механизме адгезии и теорий, его описывающих [3]. Механические свойства слоистых композитных структур могут изменяться в зависимости от различных геометрических и физических параметров модели, таких как размеры образца, модуль Юнга, коэффициент Пуассона и других параметров материалов адгезива и субстрата. Большое влияние на параметры композита оказывают давление, температура, старение и внешняя нагрузка. Таким образом, для расчета свойств материала такого рода чрезвычайно важно применять наиболее подходящие математические модели, точность которых подтверждена физическими экспериментами.

Материалы и методы

В классической теории для оценки упругих параметров композитов применяются формулы смеси, которые были получены У. Фойгтом (в 1889 г.) [4] и А. Рейссом (в 1929 г.) [5]. Формулы смеси для определения поперечного модуля упругости E_{mix} и эффективного коэффициента линейного теплового расширения (КЛТР) α_{mix} записываются в следующей форме:

$$E_{mix} = \frac{E_0 E_1}{V_0 E_1 + V_1 E_0},\tag{1}$$

$$\alpha_{mix} = \alpha_0 V_0 + \alpha_1 V_1, \tag{2}$$

где индексы 0 и 1 относятся к двум разным материалам.

Эти формулы не учитывают коэффициент Пуассона и характеристики контактного слоя, возникающего в результате адгезионного взаимодействия материалов, входящих в состав композита и контактирующих друг с другом. Использование формул смеси позволяет провести расчет термоупругих параметров только в первом приближении. Существует значительное количество научных трудов отечественных [6 – 10, 12] и зарубежных [11, 13 – 19] авторов, в которых предлагаются различные методы оценки напряженно-деформированного состояния и определения упругих параметров композитов, но результаты расчетов по представленным методам согласуются далеко не со всеми экспериментами и требуют доработки.

При расчетах материалов, которые состоят из относительно большого количества

[©] Razakova R. V., Turusov R. A., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

слоев, происходит увеличение суммарной площади поверхности контакта взаимодействующих слоев по отношению к объему материала, что повышает значимость учета адгезионного взаимодействия слоев.

Модель контактного слоя. Р. А. Турусов предложил модель контактного слоя с ее теоретическим обоснованием [20]. В основе указанной модели лежит гипотеза существования определенного слоя в виде щетки коротких упругих стерженьков-связей, ориентированных нормально к поверхности контакта, и слой расположен между адгезивом и субстратом (рис. 1). В контактном слое отсутствует непосредственный контакт стерженьков друг с другом и, значит, отсутствуют нормальные напряжения σ_x и σ_z . Короткие стерженьки воспринимают напряжения сдвига σ_{yx} , σ_{zy} , σ_{xz} и, естественно, нормальные напряжения σ_y . В ходе решения контактных задач механики известными методами теории упругости, на границах между слоями и в угловых точках вблизи торцов контактного слоя для касательных напряжений возникает сингулярность типа $x^{-1/2}$ при $x \rightarrow 0$, т. е. бесконечность.

Модель контактного слоя, предложенная Р. А. Турусовым, позволяет удовлетворять всем граничным условиям при решении задачи Коши, поскольку открывает возможность избежать бесконечных напряжений в угловых точках склейки. При устранении такого рода сингулярностей, становится возможным применять известные критерии прочности адгезионных соединений. Данная модель контактного слоя может считаться верной на физическом уровне строгости, так как из существующей теории и косвенного эксперимента известно, что при адгезионном контакте число связей на 1 см² составляет 10¹², т. е. во взаимодействии субстрата с адгезивом участвует каждый десятый атом, а значит можно считать, что данные контакты являются относительно редкими и не соприкасаются друг с другом.

Таким образом, контакты в совокупности составляют регулярный слой стержень-ков-связей, который имеет определенные параметры:

 E^* — модуль упругости, G^* — модуль сдвига, h^* — толщина слоя.

Если число связей на 1 см² составляет 10^{12} , то во взаимодействии субстрата с адгезивом участвует каждый сотый атом, и в этом случае параметры среды составляют $0,01 \cdot E^*$, $0,01 \cdot G^*$ и h^* .



Рис. 1. Схематическое представление адгезионной связи между приведенными в контакт слоями из разнородных материалов: А – адгезив (например, эпоксид), АМ – молекулы адгезива, S – субстрат (например, сталь), CL – контактный слой

В соответствии с теорией метода контактного слоя, в работе Р. А. Турусова [20] было получено следующее соотношение между полной деформацией слоистого стержня $\varepsilon_{zl.b.}$ и его параметрами:

$$\varepsilon_{z.l.b.} = \overline{e}_{z} + \overline{\varepsilon}_{t} = \frac{\sigma}{E_{eff.l.b.}} + \alpha_{eff.l.b.} \Delta T = q \left[\left(\frac{\nu_{0}}{E_{0}} + \frac{\nu_{1}}{E_{1}} \right) + \frac{2\delta}{\omega^{2}} \left(\frac{\mu_{0}\nu_{0}}{E_{0}h_{0}} - \frac{\mu_{1}\nu_{1}}{E_{1}h_{1}} \right) \left(1 - \frac{\tanh\left(\nu\right)}{\nu} \right) \right] + \left[\left(\alpha_{0}\nu_{0} + \alpha_{1}\nu_{1} \right) + \frac{2\beta}{\omega^{2}} \left(\frac{\mu_{0}\nu_{0}}{E_{0}h_{0}} - \frac{\mu_{1}\nu_{1}}{E_{1}h_{1}} \right) \left(1 - \frac{\tanh\left(\nu\right)}{\nu} \right) \right] \Delta T,$$
(3)

где нижние индексы 0 относятся к субстрату, а 1 — к адгезиву; E_0 , E_1 , Па, — модули Юнга; μ_0 , μ_1 — коэффициенты Пуассона; h_0 , h_1 , мм, — величины толщины; V_0 , V_1 — относительные объемные доли содержания субстрата и адгезива, соответственно; e_z — упругая деформация; ϵ_r — температурная деформация; ΔT , К — температурная разность.

Параметры ν, δ, β в соотношении (3) характеризуют контактный слой и определяются следующим образом:

$$\mathbf{v} = \frac{\omega l}{2}; \ \delta = 2 \left(\frac{\mu_1}{E_1} - \frac{\mu_0}{E_0} \right) gr; \ \beta = 2 \left(\alpha_0 - \alpha_1 \right) gr, \tag{4}$$

где *l*, мм, — размер стороны квадратного поперечного сечения (длина склейки слоя адгезива); *gr*, Па, — жесткость контактного слоя;

$$\omega^{2} = gr\left[\frac{1-\mu_{0}}{E_{0}h_{0}} + \frac{2(1-\mu_{0})}{E_{1}h_{1}}\right].$$

Если положить в соотношении (3) $\Delta T = 0$, то из него можно вывести выражение для определения эффективного (*eff*) модуля упругости $E_{eff.l.b.}$ (модуль Юнга) слоистого стерж-ня (*l.b.*), которое принимает следующий вид:

$$E_{eff.l.b.} = \left[\left(\frac{V_0}{E_0} + \frac{V_1}{E_1} \right) - \frac{2 \cdot \left(\frac{\mu_0}{E_0} - \frac{\mu_1}{E_1} \right)^2}{\frac{(1 - \mu_1)}{E_1 \cdot V_1} + \frac{(1 - \mu_0)}{E_0 \cdot V_0}} \cdot \left(1 - \frac{\tanh(\nu)}{\nu} \right) \right]^2.$$
(5)

Также из выражения (3) можно получить формулу для определения коэффициента линейного теплового расширения (КЛТР) α_{efflb} , при условии, что q = 0:

$$\alpha_{eff.l.b} = (\alpha_0 \cdot V_0 + \alpha_1 \cdot V_1) + \frac{4 \cdot (\alpha_0 - \alpha_1) \cdot (\mu_0 \cdot E_1 - \mu_1 \cdot E_0) \cdot V_0 \cdot V_1}{(1 - \mu_0) \cdot E_1 \cdot V_1 + (1 - \mu_1) \cdot E_0 \cdot V_0} \cdot \left(1 - \frac{\tanh(v)}{v}\right).$$
(6)

Если в соотношении (3) положить суммарную деформацию всего слоистого стержня равной нулю, то получается зависимость температурных напряжений σ в стержне постоянной длины от различных характеристик стержня:

$$\sigma = -\alpha_{eff.l.b.} \cdot E_{eff.l.b.} \cdot \Delta T. \tag{7}$$

 -1^{-1}

Коэффициент линейного теплового расширения (КЛТР) — это физическая величина, характеризующая относительное изменение линейных размеров тела с увеличением температуры на 1 К при постоянном давлении и без изменения фазы. КЛТР уникален для каждого материала и зависит от большого количества параметров. Это ключевое свойство материала оказывается особенно важным при исследовании композитной структуры, работающей в среде с изменяющейся температурой. Кристаллы, как правило, имеют самые низкие КЛТР, потому что их структура чрезвычайно однородна и прочна. Твердые тела с самыми высокими КЛТР имеют слабые межмолекулярные связи; к ним относятся, как правило, полимеры, для которых, как известно, характерны низкие температуры Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 16 (1) 2023

плавления. При исследовании свойств композиционных материалов, содержащих в своем составе полимеры, большое внимание уделяется температуре стеклования, ниже которой полимерный материал становится твердым и хрупким. Данный параметр определяется для каждого полимера индивидуально и зависит от химического состава и строения молекулярной цепочки. Переход из твердого и хрупкого «стекловидного» состояния в мягкое и пластичное «каучукообразное» происходит при повышении температуры.

Предпосылки расчетов. Как было указано выше, для расчета физико-механических характеристик слоистых композиционных материалов необходимо знать достоверные значения параметров адгезива, субстрата, а также характеристики адгезионного взаимодействия контактирующих слоев. При исследовании термоупругого поведения композиционных стержней были использованы геометрические и физические параметры объектов экспериментального исследования, проведенного Р. А. Турусовым [20].

На рис. 2 схематично представлена геометрия исследованных образцов. Они имеют одинаковую длину; один сделан из чистого полимера, а два других состоят из двух материалов: металла и полимера.



Рис. 2. Геометрия исследованных композитных стержней: цельного полимерного (1), составного (2) и слоистого (3) (размеры даны в мм)

Таблица 1

Параметр	Обозначение	Значение			
Геометрия образцов					
Общая длина, мм	L	100			
Размер стороны квадратного сечения, мм	l	10,0			
Толщина секций в образце 2, мм					
стальных	h _{st}	42,5			
полимерн	ой $h_{_{pol}}$	15,0			
Толщина слоев в образце 3, мм					
стальных	h_0	1,40			
полимерни	h_1	0,25			
Физические свойства материалов					
Сталь: модуль Юнга, ГПа	E_0	210			
коэффициент Пуассо	на μ ₀	0,3			
КЛТР, К ⁻¹	α_0	1,2.10-7			
Коэффициент Пуассона полимера	μ_1	0,5			
Жесткость контактного слоя, ГПа/мм	gr	25			

Исходные данные для расчетов
Образец *1* — это стержень из полимерного материала (в данном случае взят эпоксид). Образец *2* — стержень, составленный из двух стальных стержневых элементов (субстраты), между которыми находится слой из полимерного адгезива (эпоксид). Образец *3* — это слоистый стержень из стальных пластинок (субстраты), соединенных эпоксидом.

В табл. 1 представлены постоянные параметры композитов, принятые нами для расчетов. Необходимо обратить внимание на то, что слоистый и составной стержни содержат в своем составе одинаковое количество полимера и стали (в каждом из стержней 15 и 85 % соответственно).

Результаты исследований и их обсуждение

На рис. 3, *а* показаны графики температурных зависимостей модулей Юнга полимерного, составного и слоистого стержней. Модуль Юнга составного стержня (образец 2) рассчитывали по формуле смеси (1), а слоистого стержня (образец 3) — по модели Р. А. Турусова (см. формулу (5)). Модуль Юнга полимера E_1 вычисляли по эмпирической формуле, полученной путем аппроксимации экспериментальных данных, измеренных в процессе лабораторного исследования зависимости модуля Юнга эпоксидного адгезива E_1 от температуры T [20]. Формула имеет следующий вид:

$$E_1 = -18, 2 \cdot T + 8200. \tag{8}$$

Для КЛТР полимера α, также использовали эмпирическую формулу вида

$$\alpha_1 = (0,46T - 58) \cdot 10^{-6}. \tag{9}$$

Поведение кривой 1 на рис. 3, *а* показывает, что при увеличении температуры модуль упругости полимера снижается почти по линейному закону. Более точно оценить разницу между температурными зависимостями модулей упругости можно из анализа данных табл. 2. Такой анализ показывает, что модуль упругости полимера при начальной температуре полимера, равной 295 К, составляет 2831 МПа, а при температуре 395 К – 1011 МПа (уменьшается приблизительно в 2,8 раза с увеличением температуры на 100 К). Такой эффект снижения модуля упругости можно объяснить увеличением межатомных и межмолекулярных расстояний, а также ослаблением усилий взаимодействия между микрочастицами в теле материала.

Результаты, полученные по формуле смеси для составного стержня (см. кривую 2 на рис. 3, a), свидетельствует о том, что при повышении температуры модуль Юнга снижается так же, как у полимера, но кривая 2 имеет угол наклона к оси абсцисс гораздо больший, чем у кривой 1. Такая разница обусловлена тем, что составной стержень (образец 2)



Рис. 3. Расчетное влияние температуры на модули упругости (*a*) и КЛТР (*b*) полимерного (*1*), составного (*2*) и слоистого (*3*) стержней. Использованы данные табл. 1, а также формулы (8) и (9)

включает в себя секцию полимера между двумя секциями стали (относительные объемные доли полимера и стали равны соответственно 15 и 85 %), а это есть следствие того, что начальное значение модуля Юнга у такого составного стержня больше, чем у полимерного. При увеличении температуры на 100 К модуль упругости снижается в 2,7 раза.

Таблица 2

Температура, К	Модуль Юнга, МПа			КЛТР, 10 ⁻⁵ К ⁻¹		
	1	2	3	1	2	3
295	2831	17 534	101 793	7,8	2,19	5,805
305	2649	16 482	99 065	8,2	2,25	6,134
315	2467	15 420	96 132	8,7	2,32	6,465
325	2285	14 349	92 965	9,2	2,39	6,797
335	2103	13 267	89 535	9,6	2,46	7,130
345	1921	12 176	85 801	10,1	2,53	7,465
355	1739	11 074	81 718	10,5	2,60	7,801
365	1557	9 961	77 227	11,0	2,67	8,138
375	1375	8 839	72 255	11,5	2,74	8,477
385	1193	7 705	66 711	11,9	2,81	8,818
395	1011	6 561	60 475	12,4	2,88	9,161

Расчетные температурные зависимости модулей упругости и коэффициентов линейного теплового расширения (КЛТР) трех исследованных образцов

Примечание. Номера образцов соответствуют приведенным на рис. 2.

Кривая 3 на рис. 3, a, полученная по формуле Р. А. Турусова, заметно отличается от первых двух. Для этого случая важно отметить, что значение модуля Юнга при начальной температуре, полученное по формуле (5), оказывается гораздо выше такового, полученного по формуле смеси. Такой синергетический эффект в слоистой структуре возникает ввиду влияния контактного слоя, возникающего между адгезивом и субстратом. Выражение (4) позволяет учитывать наличие контактного слоя и его параметры, что и дает наблюдаемое расхождение. Поскольку расчет проводился для мягкого полимера (адгезива), модуль Юнга которого значительно выше модуля Юнга стали (субстрата), здесь вступает в силу модуль всестороннего объемного растяжения K (вместо обычного модуля упругости полимера), зависящий как от модуля упругости, так и от коэффициента Пуассона:

$$K = \frac{E}{2(1-2\mu)}.$$
(9)

В приведенном расчете коэффициент Пуассона близок к значению 0,5, а это означает главенство модуля *К* над модулем Юнга и сопротивлением слоистой структуры растяжению и сжатию.

В ходе изучения свойств материалов было установлено, что полимер обладает значительной долей свободного объема, который может представлять собой полости порядка молекулярных (мономерных размеров) или пустоты меньшей величины, связанные с нерегулярной упаковкой молекул. Процесс теплового расширения полимера представляет собой главным образом увеличение свободного объема при повышении температуры, тогда как подобные процессы в кристаллических твердых телах, с характерными для них много меньшими значениями КЛТР, связаны с ангармоничностью зависимости потенциальной энергии от межатомных или межмолекулярных расстояний [22]. В композиционных же структурах, каковыми являются слоистые материалы, разрушающие напряжения могут возникнуть, например, вследствие разницы коэффициентов линейного теплового расширения компонентов, входящих в состав слоистого композита.

На рис. 3, *b* представлены графики температурных зависимостей КЛТР полимерного, составного и слоистого стержней. Видно, что все три кривые демонстрируют рост при повышении температуры. КЛТР полимера возрастает в связи с тем, что при увеличении температуры молекулы становятся более подвижными и в процессе своего движения ослабляют межмолекулярные связи.

Согласно расчетным данным для слоистого стержня, наличие контактных слоев значительно влияет на результаты; это есть следствие преобладающего влияния модуля всестороннего объемного растяжения K (вместо обычного модуля Юнга полимера, как уже было указано выше); в итоге КЛТР слоистого стержня принимает большее значение, чем такового составного, рассчитанного по формуле смеси.



Рис. 4. Температурные зависимости температурных напряжений в полимерном (1), составном (2) и слоистом (3) стержнях (кривые 1 и 2 почти совпали) Использованы данные табл. 1, а также формулы (8), (9)

Т	а	б	л	И	Ц	а	3
_		_			_		_

Taxmana K	Напряжение σ, МПа			
Temnepatypa, K	1	2	3	
295	-9,899	-17,244	-267,866	
305	-11,991	-20,437	-336,650	
315	-13,935	-23,289	-406,812	
325	-15,681	-25,747	-477,141	
335	-17,178	-27,758	-546,201	
345	-18,377	-29,270	-612,286	
355	-19,227	-30,225	-673,335	
365	-19,678	-30,570	-726,839	
375	-19,680	-30,245	-769,702	
385	-19,182	-29,194	-798,035	
395	-18,134	-27,356	-806,866	
405	-16,486	-24,672	-789,686	
415	-14,188	-21,079	-737,708	

Расчетные температурные зависимости напряжений, вызванных нагревом, в трех образцах

Примечание. Номера образцов соответствуют приведенным на рис. 2.

Чтобы на практике избежать расслоения материалов и разрушения их структуры, очень важно правильно проводить расчет температурных напряжений в композитных материалах. Результаты наших расчетов температурных напряжений в трех образцах показали, что поведение слоистого композита при повышении температуры кардинально отличается от соответствующих реакций составного (трехсекционного) и полимерного стержней.

На основании полученных значений (табл. 3) и построенных графиков (рис. 4) можно сделать заключение, что температурные напряжения в полимерном и составном стержнях оказываются гораздо меньше, чем таковые для слоистого стержня. Это обусловлено тем, что значения модуля Юнга и КЛТР, полученные по формуле смеси, меньше, чем полученные по формуле слоистого стержня. Анализ данных позволяет утверждать, что при температуре от 300 до 400 К напряжения увеличивались по абсолютной величине, но при 380 К они начали снижаться во всех трех случаях. Более интенсивный рост КЛТР (относительно начального значения) при повышении температуры, по сравнению со скоростью снижения модуля упругости, указывает на понижение температурных напряжений при температуре 380 К.

Важно подчеркнуть, что значение КЛТР полимера гораздо выше, чем соответствующее значение для стали (см. табл. 1). В слоистом и составном стержнях полимерные и стальные слои жестко соединены друг с другом и подвергнуты нагреву, при этом каждый материал стремится расшириться в соответствии со своим значением КЛТР, но, поскольку у полимера оно выше, а у стали ниже, возникают температурные напряжения (полимер стремится расшириться, а сталь этому препятствует). Сталь при этом будет подвергаться растягивающему напряжению, так как полимер «заставит» ее расширяться за предел, который у нее обусловлен значением КЛТР. Напряжения возникают в результате разницы КЛТР адгезива (эпоксида) и субстрата (стали) и могут привести к расслоению. Как видно из приведенных зависимостей, изменение температуры во всем рассматриваемом диапазоне изменяет значение КЛТР для полимера более чем в шесть раз, а модуль упругости по мере приближения температуры к точке плавления падает до нуля. Такие зависимости справедливы и для стали, хотя и в меньшей степени.

Заключение

В статье представлены результаты расчетов термоупругих свойств слоистых композитов и проведен анализ полученных данных. В ходе анализа был выяснен физический механизм изменений, происходящих внутри материала под влиянием температурных изменений. Расчеты модуля Юнга и коэффициента линейного температурного расширения (КЛТР) проводились на основе теории метода контактного слоя для слоистого стержня и по классическим формулам смеси для составного. Теория метода контактного слоя позволяет учитывать геометрические и физико-механические параметры субстрата, адгезива и контактного слоя (слой, образующийся при их взаимодействии), поэтому моделирование и расчет становятся более точными.

Показано, что при расчете характеристик слоистого стержня необходимо уделять особое внимание адгезионному взаимодействию межфазных слоев. На основе проведенных расчетов и анализа их результатов можно сделать очевидный вывод, что при изучении термоупругих параметров стержня со слоистой структурой следует учитывать большое количество механических характеристик. В частности, значительное влияние оказывают коэффициент Пуассона, толщина составляющих слоев и жесткость контактного слоя.

Коэффициенты линейного температурного расширения вычислены с использованием метода контактного слоя и формулы смеси.

Важно отметить, что аналитическая формула (5) для определения эффективного модуля Юнга по модели контактного слоя довольно хорошо согласуется с результатами физического эксперимента и может считаться достаточно точной. Использование в качестве параметра эффективного модуля, учитывающего контактный слой, дает возможность проводить численные эксперименты путем варьирования значений механических свойств материалов, входящих в состав слоистого композита.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Barros M. A. S., Fujiyama R. T., Leite J. C. Advantages of applying composite material to replace metal alloys in aviation // Journal of Engineering and Technology for Industrial Applications. 2015. Vol. 1. No. 3. Pp. 20–29.

2. Sen F., Toparli M., Köksal N. S. The evaluation of thermal stresses in thermoplastic laminated composites with different square holes // Mathematical and Computational Applications. 2007. Vol. 12. No. 1. Pp. 59–68.

3. Awaja F., Gilbert M., Kelly G., Fox B., Pigram P. J. Adhesion of polymers // Progress in Polymer Science. 2009. Vol. 34. No. 9. Pp. 948–968.

4. Voigt W. Über die Beziehung zwischen den beiden Elastizitats konstanten Isotroper Körper // Wiedemann's Annalen der Physik und Chemie. 1889. Bd. 38. Nr. 12. S. 573–587.

5. **Reuss A.** Berechnung der Fliessgrense von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle // Zeitschrift Angewandte Mathematik und Mechanik.1929. Bd. 9. Nr. 1. S. 49–58.

6. Образцов И. Ф., Яновский Ю. Г., Згаевский В. Э. Упругие характеристики межфазного слоя полимерных матричных композитов // Доклады Академии наук. 2000. Т. 371. № 5. С. 617-620.

7. Образцов И. Ф., Яновский Ю. Г., Власов А.Н., Згаевский В. Э. Коэффициенты Пуассона межфазных слоев полимерных матричных композитов // Доклады Академии наук. 2001. Т. 378. № 3. С. 336–338.

8. Муйземнек А. Ю., Иванова Т. Н., Карташова Е. Д. Сопоставление результатов экспериментального и расчетного определения эффективных характеристик упругих свойств полимерных слоистых композитов из угле- и стеклотканей // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. 2021. № 2. С. 88–105.

9. Турусов Р. А., Берлин А. А. Адгезия и адгезионная механика // Новости материаловедения. Наука и техника. 2016. № 2. С. 17–23.

10. **Турусов Р. А.** Адгезионная механика. Определение параметров контактного слоя // Клеи. Герметики. Технологии. 2021. № 6. С. 2–11.

11. **Huang Z.-M.** Simulation of the mechanical properties fibrous composites by the bridging micromechanics model // Composites. Part A: Applied Science and Manufacturing. 2001. Vol. 32. No. 2. Pp. 143–172.

12. Andreev V., Tsybin N., Turusov R. Layered composite and contact layer. Effective modulus of elasticity // E3S Web of Conferences. 2019. Vol. 97. XXII International Scientific Conference "Construction the Formation of Living Environment" (FORM-2019). Published online 29 May 2019. P. 04071.

13. Ran Zh., Yan Y., Li J., Qi Zh., Yang L. Determination of thermal expansion coefficients for unidirectional fiber-reinforced composites // Chinese Journal of Aeronautics. 2014. Vol. 27. No. 5. Pp. 1180–1187.

14. Halpin J. C., Kardos J. L. The Halpin – Tsai equations: A review // Polymer Engineering and Science. 1976. Vol. 16. No. 5. Pp. 344–352.

15. Hashin Z., Rosen B. W. The elastic moduli of fiber reinforced materials // Journal of Applied Mechanics. 1964. Vol. 31. No. 2. Pp. 223–232.

16. Hashin Z., Shtrikman S. A variational approach to the elastic behavior of multiphase minerals // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1963. Vol. 11. No. 2. Pp. 127–140.

17. Hill R. Theory of mechanical properties of fibre-strengthen materials – III. Self-consistent model // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1965. Vol. 13. No. 4. Pp. 189–198.

18. **Budiansky B.** On the elastic moduli of some heterogeneous materials // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1965. Vol. 13. No. 4. Pp. 223–227.

19. Kerner E. The elastic and thermo-elastic properties of composite media // Proceedings of the Physical Society. B. 1956. Vol. 69. No. 8. Pp. 808–813.

20. Турусов Р. А. Адгезионная механика. М.: Изд. НИУ Московского государственного строительного университета, 2016. 228 с.

21. **Turusov R. A., Manevich L. I.** Contact layer method in adhesive mechanics // Polymer Science. Series D. 2010. Vol. 3. No. 1. Pp. 1–9.

22. **Ферри Дж.** Вязкоупругие свойства полимеров. Пер. с англ. М.: Изд-во иностранной литературы, 1963. 535 с.

REFERENCES

1. Barros M. A. S., Fujiyama R. T., Leite J. C., Advantages of applying composite material to replace metal alloys in aviation, J. Eng. Technology Industrial Appl. 1 (3) (2015) 20–29.

2. Sen F., Toparli M., Köksal N. S., The evaluation of thermal stresses in thermoplastic laminated composites with different square holes, Math. Comput. Appl. 12 (1) (2007) 59–68.

3. Awaja F., Gilbert M., Kelly G., et al., Adhesion of polymers, Prog. Polym. Sci. 34 (9) (2009) 948–968.

4. Voigt W., Über die Beziehung zwischen den beiden Elastizitats Konstanten Isotroper Körper, Wied. Ann. 38 (12) (1889) 573–587.

5. **Reuss A.**, Berechnung der Fliessgrense von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle, Z. Angew. Math. Mech. 9 (1) (1929) 49–58.

6. Obraztsov I. F., Yanovskii Yu. G., Zgayevskii V. E., Elastic characteristics of an interfacial layer formed by polymeric matrix composites, Doklady Physics. 45 (4) (2000) 175–178.

7. Obraztsov I. F., Yanovskii Yu. G., Vlasov A. N., Zgayevskii V. E., Poisson's ratios for interfacial layers of polymer matrix composites, Doklady Physics. 46 (5) (2001) 366–368.

8. Muyzemnek A. Yu., Ivanova T. N., Kartashova E. D., Comparison of experimental and computation results of finding effective characteristics of elastic properties of polymer layered composites from carbon and glass fabrics, PNRPU Mechanics Bulletin. (2) (2021) 88–105 (in Russian).

9. Turusov R. A., Berlin A. A., Adhesion and adhesion mechanics, News of Material Science and Technology. (2) (2016) 17–23 (in Russian).

10. Turusov R. A., Adhesion mechanics. Estimation of contact-layer parameters, Polym. Sci. D. 15 (1) (2022) 1–9.

11. Huang Z.-M., Simulation of the mechanical properties fibrous composites by the bridging micromechanics model, Compos. Part A. Appl. Sci. Manuf. 32 (2) (2001) 143–172.

12. Andreev V., Tsybin N., Turusov R., Layered composite and contact layer. Effective modulus of elasticity, E3S Web Conf. 97 (FORM-2019) (29 May) (2019) 04071.

13. **Ran Zh., Yan Y., Li J., et al.,** Determination of thermal expansion coefficients for unidirectional fiber-reinforced composites, Chinese J. Aeronaut. 27 (5) (2014) 1180–1187.

14. Halpin J. C., Kardos J. L., The Halpin – Tsai equations: A review, Polym. Eng. Sci. 16 (5) (1976) 344–352.

15. Hashin Z., Rosen B. W., The elastic moduli of fiber reinforced materials, J. Appl. Mech. 31 (2) (1964) 223–232.

16. Hashin Z., Shtrikman S., A variational approach to the elastic behavior of multiphase minerals, J. Mech. Phys. Solids. 11 (2) (1963) 127–140.

17. Hill R., Theory of mechanical properties of fibre-strengthen materials – III. Self-consistent model, J. Mech. Phys. Solids. 13 (4) (1965) 189–198.

18. **Budiansky B.**, On the elastic moduli of some heterogeneous materials, J. Mech. Phys. Solids. 13 (4) (1965) 223–227.

19. Kerner E., The elastic and thermo-elastic properties of composite media, // Proc. Phys. Soc. B. 69 (8) (1956) 808-813.

20. Turusov R. A., Adgezionnaya mekhanika [Adhesive mechanics], Moscow State University of Civil Engineering Publication, Moscow, 2016.

21. Turusov R. A., Manevich L. I., Contact layer method in adhesive mechanics, Polym. Sci. D. 3 (1) (2010) 1–9.

22. Ferry J. D., Viscoelastic properties of polymers, Wiley, New York, 1961.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

РАЗАКОВА Рио-Рита Вадимовна — аспирантка кафедры сопротивления материалов Национального исследовательского Московского государственного строительного университета (НИУ МГСУ), Москва, Россия.

129337, Россия, г. Москва, Ярославское шоссе, 26 chernova_riorita@mail.ru ORCID: 0000-0001-7310-5266 **ТУРУСОВ Роберт Алексеевич** — доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник ФГБУН «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук», профессор кафедры сопротивления материалов Национального исследовательского Московского государственного строительного университета (НИУ МГСУ), Москва, Россия.

119991, Россия, г. Москва, ул. Косыгина, 4. rob-turusov@yandex.ru ORCID: 0000-0002-2753-0701

THE AUTHORS

RAZAKOVA Rio-Rita V. National Research Moscow State University of Civil Engineering 26 Yaroslavskoye Ave., Moscow, 129337, Russia chernova_riorita@mail.ru ORCID: 0000-0001-7310-5266

TURUSOV Robert A.

Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, National Research Moscow State University of Civil Engineering 4 Kosygin St., Moscow, 119991, Russia rob-turusov@yandex.ru ORCID: 0000-0002-2753-0701

Статья поступила в редакцию 10.06.2022. Одобрена после рецензирования 08.07.2022. Принята 08.07.2022. Received 10.06.2022. Approved after reviewing 08.07.2022. Accepted 08.07.2022. Научная статья УДК 531.383 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16113

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ ТЕОРИИ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА И АНАЛИЗА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ПРИ РАБОТЕ С МОДЕЛЬЮ РЕЗОНАТОРА ГИРОСКОПА

С. А. Шевченко 🖾, Б. Е. Мельников

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

[⊠] shevchenko.sergei.a@yandex.ru

Аннотация. В статье предлагается малораспространенный подход к априорной оценке характеристик объекта. Математическая модель резонатора волнового твердотельного гироскопа, разрабатываемая для определения расщепления его собственной частоты, послужила объектом исследования. Расщепление частоты вызвано наличием несовершенств резонатора, обусловленных процессом производства. Для оценки характеристик модели использованы методы теории планирования эксперимента и анализа чувствительности. Модель построена на основе определяющих соотношений теории тонких упругих растяжимых оболочек, а также вариационного принципа Гамильтона. Показано, что применение рассмотренных методов позволяет выявить параметры модели, вносящие минимальный вклад в значения выходных параметров, и упростить модель путем их исключения.

Ключевые слова: волновой твердотельный гироскоп, анализ чувствительности, индекс Соболя, теория планирования эксперимента

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 21-71-10009).

Для цитирования: Шевченко С. А., Мельников Б. Е. Использование методов теории планирования эксперимента и анализа чувствительности при работе с моделью резонатора гироскопа // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 1. С. 152–162. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16113

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии СС BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16113

USING THE THEORY OF DESIGN OF EXPERIMENT AND THE SENSITIVITY ANALYSIS METHOD IN SIMULATION OF A GYROSCOPE RESONATOR

S. A. Shevchenko [⊠], B. E. Melnikov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

[™] shevchenko.sergei.a@yandex.ru

Abstract. The paper proposes a little-distributed approach to a priori estimation of object characteristics. The mathematical model of the Coriolis vibratory gyroscope resonator which is being developed to determine the splitting of its eigenfrequency, has been chosen as an object. The frequency splitting is caused by the presence of imperfections of the resonator due to the

© Шевченко С. А., Мельников Б. Е., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

manufacturing process. The theory of design of experiment and the sensitivity analysis method were used to estimate the model characteristics. The model is based on the determining relations of the theory of thin elastic tensile shells and on the Hamilton's variational principle. It was shown that the application of the taken methods allowed us to reveal the model parameters making the minimum contribution to the values of the output parameters and to simplify the model by their excluding.

Keywords: Coriolis vibratory gyroscope, sensitivity analysis, Sobol index, design of experiment

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 21-71-10009).

For citation: Shevchenko S. A., Melnikov B. E., Using the theory of design of experiment and the sensitivity analysis method in simulation of a gyroscope resonator, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1) (2023) 152–162. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16113

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons. org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Одним из наиболее перспективных направлений развития гироскопии в настоящее время является разработка высокоточных навигационных систем на базе волновых твердотельных гироскопов (ВТГ) [1 - 3]. Принцип работы ВТГ, основанный на эффекте Брайана, хорошо известен и описан литературе [4, 5]. Однако достижение точностных характеристик, достаточных для построения высокоточных навигационных систем [3], непосредственно связано с задачами, решение которых невозможно без соответствующего аккуратного математического моделирования.

К основным задачам при разработке ВТГ, связанным с математическим моделированием, можно отнести следующие:

прогнозирование значения рабочей собственной частоты и величины ее расщепления; идентификация параметров несовершенств неидеального резонатора;

разработка алгоритма балансировки резонатора ВТГ;

разработка алгоритма управления ВТГ.

В ходе моделирования важно не только уметь построить и верифицировать искомую математическую модель, но и проанализировать влияние ее переменных параметров на выходные характеристики объекта, чтобы в итоге сформировать ее наиболее компактный вариант, описывающий рассматриваемый процесс.

Для решения подобных задач предназначены методы анализа чувствительности (*англ*. Sensitivity Analysis (SA)) и, в частности, глобальный анализ чувствительности (*англ*. Global Sensitivity Analysis (GSA)) [6], а также методы теории планирования эксперимента (*англ*. Design of Experiment (DoE)) [7, 8]. Необходимо отметить, что указанные методы широко используются для работы с результатами натурных испытаний в рамках проблемы оптимизации конструкции; при этом для анализа разрабатываемых аналитических расчетных моделей их применение не столь распространено.

В настоящей работе приводится пример использования методов DoE и GSA для работы с математической моделью полусферического кварцевого резонатора ВТГ.

Описание математической модели

Математическая модель кварцевого полусферического резонатора предназначена для определения рабочей собственной частоты, а также ее расщепления, вызванного наличием несовершенств, возникших в процессе производства. Рассмотрены такие несовершенства, как разноплотность, разноупругость и разнотолщинность. Модель построена на основе определяющих соотношений теории тонких упругих растяжимых оболочек [9], а также вариационного принципа Гамильтона [10]. Основой служит выражение

© Shevchenko S. A., Melnikov B. E., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

$$\delta I = \delta \int_{t_0}^{t_1} L(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, t) dt = 0,$$

где δI – вариация искомого функционала; L = T - W (T, W – кинетическая энергия рассматриваемого элементарного объема оболочки и потенциальная энергия деформаций соответственно); q_i – обобщенные координаты в *n*-мерном пространстве; t – время.

Выражения для кинетической и потенциальной энергии, согласно формулам, представленным в [9, 11], имеют вид:

$$T = \frac{1}{2} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\overline{2}} \rho h V^{2} A_{1} A_{2} d\theta d\phi,$$

$$W = \frac{Eh}{2(1-\nu^{2})} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} \left[(\varepsilon_{1} + \varepsilon_{2})^{2} - 2(1-\nu) \left(\varepsilon_{1} \varepsilon_{2} - \left(\frac{\omega}{2}\right)^{2} \right) \right] A_{1} A_{2} d\theta d\phi +$$
$$+ \frac{Eh^{3}}{24(1-\nu^{2})} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} \left[(\kappa_{1} + \kappa_{2})^{2} - 2(1-\nu) (\kappa_{1} \kappa_{2} - \tau^{2}) \right] A_{1} A_{2} d\theta d\phi,$$

где ρ , кг/см³, — плотность материала (кварцевое стекло); V, м/с, — вектор абсолютной скорости произвольной точки упругого тела; h, м, — толщина полусферической оболочки; A_1, A_2 — параметры Ляме; ν — коэффициент Пуассона материала; E, МПа, — модуль его упругости; $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ — параметры, характеризующие удлинение срединной поверхности; κ_1, κ_2 — параметры, характеризующие изгибные деформации срединной поверхности; ω, τ — параметры, характеризующие деформации сдвига и кручения оболочки, соответственно; θ, ϕ , град, — зенитный и азимутальный углы, соответственно.

В указанных выражениях учет несовершенств параметров *E*, *h*, *ρ* осуществляется заданием их неоднородности по окружной координате по следующему закону:

$$E = E_0 \cdot (1 + amp_E \cdot \sin(k_E \cdot \phi + phase_E \cdot \pi));$$

$$h = h_0 \cdot (1 + amp_h \cdot \sin(s_h \cdot \phi + phase_h \cdot \pi));$$

$$\rho = \rho_0 \cdot (1 + amp_rho \cdot \sin(p_rho \cdot \phi + phase_rho \cdot \pi)),$$

где E_0 , h_0 , ρ_0 — базовые значения модуля упругости, толщины и плотности; *amp_E*, *k_E*, *phase_E*, *amp_h*, *s_h*, *phase_h*, *p_rho*, *amp_rho*, *phase_rho* — параметры гармоники возмущения (несовершенства).

С использованием метода Ритца [12] решение задачи сводится к решению задачи на собственные значения:

$$(A-\lambda^2 B)\mathbf{C}=0,$$

где A, B — матрицы, связанные с кинетической и потенциальной энергиями, а также координатными функциями; С — вектор-столбец неизвестных коэффициентов; λ — вектор-столбец значений собственных частот.

В результате расчета определяются значения собственных частот, соответствующие второй эллиптической форме колебаний.

Для идеального полусферического резонатора без несовершенств разница между парными значениями собственных частот для эллиптической формы колебаний (f_1 и f_2) равна нулю. При этом, в случае ненулевой амплитуды гармоник, в выражениях для E, h, ρ разница по модулю между f_1 и f_2 будет являться искомой величиной расщепления рабочей собственной частоты. Это есть свойство любой формы колебаний с изменяемостью по азимутальному углу для полусферического резонатора.

Необходимо отметить, что в настоящей работе рассматривается математическая модель, содержащая девять переменных параметров, связанных с заданием несовершенств по величинам E, h и ρ . При этом указанные параметры выбраны исходя из возможностей вычислительной техники и наглядности представляемых результатов; такой выбор не претендует на общность и полноту проведенного анализа. Все вычисления проведены с использованием программного обеспечения Matlab в связке с программным обеспечением для предсказательного моделирования и робастной оптимизации pSeven (разработки DATADVANCE).

Глобальный анализ чувствительности математической модели резонатора

Методы GSA направлены на выявление степени влияния переменных параметров функции на ее выходное (исследуемое) значение. На практике, если функциональная зависимость между входными и выходными параметрами неизвестна, но при этом имеются их экспериментальные значения, то для ее построения используют методы теории планирования эксперимента (DoE). Последние подразумевают построение оптимального плана проведения эксперимента, т. е. минимального количества проводимых экспериментов, но все же достаточного для построения функциональной зависимости между входными переменными параметрами (факторами) и выходными, а также оценку качества построенной функции. Аналогичный подход используется и при проведении виртуальных экспериментов: математическая модель представляется в виде «черного ящика» и служит только лишь для получения значений выходных параметров при заданных входных.

Как результат, по массиву данных, содержащему различные комбинации значений факторов и соответствующие им значения выходных параметров, оказывается возможным построение более простой математической модели, описывающей взаимосвязь между ними, что обычно снижает временные затраты на вычисления при дальнейшей работе.

Например, в качестве упрощенной модели часто используется полиномиальное представление:

$$y = a_0 + a_1 \cdot x_1 + a_2 \cdot x_2 + a_{11} \cdot x_1^2 + a_{22} \cdot x_2^2 + a_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 \dots$$

где y — значение выходного параметра, a_{nm} — искомые коэффициенты, x_n — значения факторов.

В рамках рассматриваемой модели за выходной параметр принимается расщепление S рабочей собственной частоты, а за факторы — параметры гармоник несовершенств при E, h и ρ : k_E , amp_E , $phase_E$, s_h , amp_h , $phase_h$, p_rho , amp_rho , $phase_rho$.

Функция вида

S(k E, amp E, phase E, s h, amp h, phase h, p rho, amp rho, phase rho)

является целевой, или функцией отклика. Геометрическая интерпретация этой функции называется поверхностью отклика.

Для построения поверхности отклика требуется массив данных, являющихся результатом реального либо виртуального эксперимента (это следует из указанного выше). Количество экспериментов должно позволять построить такую поверхность отклика, которая бы описывала зависимость факторов и выходных параметров в рассматриваемой области факторного пространства с требуемой точностью. Целесообразно, чтобы количество экспериментов было минимально необходимым. В рамках DoE существует большое количество методов для формирования оптимального плана эксперимента.

В данной работе был использован метод латинского гиперкуба (англ. Latin Hypercube Sampling (LHS)) [8], согласно которому генерируется почти случайная выборка значений факторов, равномерно заполняющая факторное пространство.

В связи с отсутствием универсального метода аппроксимации для построения непрерывной функции по известным численным значениям параметров, в настоящей работе использованы различные методы, выбор которых был обусловлен адекватностью получаемых результатов, а также высокими показателями качества построенных функций. Чтобы установить влияние факторов на выходной параметр *S*, в качестве метода GSA использовался метод Соболя [13].

Необходимо отметить, что в программном обеспечении pSeven используется подход суррогатного моделирования, обеспечивающий повышенную точность построения поверхности отклика за счет дополнительного итеративного процесса обучения (тренировка, корректировка) первичной функции отклика [14] до требуемых точностных параметров.

Результаты анализа чувствительности математической модели резонатора и их обсуждение

При работе с моделью рассмотрены три обособленных случая с различными исходными данными (интервалами варьирования факторов), что осуществлялось снижением размерности модели путем задания некоторых факторов в виде констант (без интервала варьирования). Данная особенность определялась целями минимизации расчетного вре-

Таблица 1

Использованные факторы для построения поверхностей отклика и интервалы их варьирования для трех случаев

Фактор	Интервал варьирования				
Случай І					
amp_E	0,0005 - 0,0500				
phase_E	0,5000				
E	4,000				
amp_h	0,0005 - 0,0500				
phase_h	0,5000				
h	4,000				
amp_rho	0,0005 - 0,0500				
phase_rho	0,5000				
p_rho	4,000				
	Случай II				
amp_E	0,0005 - 0,0500				
phase_E	0,000-2,000				
k_E	4,000				
amp_h	0,0005 - 0,0500				
phase_h	0,000 - 2,000				
h	4,000				
amp_rho	0,0100				
phase_rho	0,5000				
p_rho	4,000				
Случай III					
E	0,0100				
phase_E	0,5000				
<i>k_E</i>	1,000 - 12,000				
amp_h	0,0100				
phase_h	0,5000				
s_h	1,000 - 12,000				
amp_rho	0,0100				
phase_rho	0,5000				
p_rho	1,000 - 12,000				

мени, а также упрощения обработки получаемых результатов.

Во всех случаях значения, задающие интервал варьирования физических и геометрических характеристик материала (плотность, модуль упругости, толщина), выбирались на основе величин параметров несовершенств, определяемых технологическими погрешностями при механической обработке и изготовлении заготовок. Рассмотрены первые 12 гармоник несовершенств, интервал варьирования фазового угла гармоник соответствовал изменению фазового угла от 0 до 2π .

Для представления результатов использованы срезы данных по значениям полного факторного пространства, полученным с помощью построенной целевой функции. Другими словами, каждый срез представляет собой такую выборку данных, которая позволяет отследить изменение расщепления (как выходного параметра) в зависимости от выбранного фактора при постоянстве остальных (на основе выбранных значений).

Случай I. Рассмотрение математической модели с целью оценки влияния факторов amp_E , amp_h , amp_rho на выходной параметр S. Для этого использованы исходные данные табл. 1, содержащей рассмотренные факторы и интервалы их варьирования.

В соответствии с построенным планом эксперимента, в результате вычислений, проведенных методом линейной регрессии (англ. Response Surface Model (RSM)) [8, 14], была получена поверхность отклика и на ее основе вычислены индексы Соболя [13]; они показывают степень влияния исследуемых параметров на модель. На рис. 1 представлены срезы данных в направлениях, соответствующих координатным осям Split (значение расщепления частоты) и каждого из исследуемых параметров. Видно, что параметр *атр E* в рамках пределов варьирования практически не оказывает влияния на выходную величину расщепления, в то время как два других параметра влияют на расщепление в равной степени. Вдобавок в правых нижних углах срезов на рис. 1, представлены графически в виде столбцов индексы Соболя (их численные значения представлены в табл. 2). Фактически эти индексы выражают величину дисперсии выхода модели относительно каждого из факторов. Важно отметить, что суммарное значение индексов Соболя первого порядка всегда равно единице.



Рис. 1. Срезы полученных данных по факторам $amp_E(a)$, $amp_h(b)$ и $amp_rho(c)$ (случай I)

Таблица 2

Степень влияния исследуемых параметров на модель для случая I (см. табл. 1 и рис. 1)

Фактор	amp_E	amp_h	amp_rho
Значение индекса Соболя	0,00028	0,44800	0,45100

Анализ полученных результатов показывает, что в случае работы с моделью большой размерности можно упростить вычисления путем пренебрежения изменчивостью модуля упругости, ввиду малого значения индекса Соболя для параметра *amp E*.

Случай II. Рассмотрение математической модели с целью минимизировать величину расщепления при заданном (постоянном) несовершенстве в виде параметров *amp_E*, *phase_E*, *amp_h*, *phase_h*. Для этого использованы исходные данные табл. 1, содержащей факторы и интервалы их варьирования (теперь это задача с четырьмя переменными).

На рис. 2 представлены срезы данных в направлениях рассматриваемых факторов для поверхности отклика, построенной с использованием метода разреженного Гауссова процесса (англ. Sparse Gaussian Process (SGP)), представляющего собой модификацию обычного метода Гауссова процесса (англ. Gaussian Process (GP)) [14, 15] для выборок большой размерности.

Аналогично случаю I, на рис. 2 видно, что варьирование параметров разнотолщинности вносит определяющий вклад в изменение расщепления. Максимум расщепления наблюдается при совпадении фазовой составляющей разнотолщинности с фазой разноплотности (задана в качестве константы). На срезе также наблюдается значение фазы, при котором расщепление сводится к нулю, что говорит о возможности нивелирования расщепления, вызванного одним дефектом, путем ввода другого дефекта с определенными параметрами. Отметим, что данный результат оказался возможным ввиду несвязности рассматриваемых факторов в математической модели резонатора.





Рис. 2. Срезы полученных данных по факторам $amp_E(a), amp_h(b), phase_E(c)$ и $phase_h(d)$ (случай II)

На рис. 3 представлено сравнение срезов данных поверхностей отклика, построенных методами SGP и высокоразмерной аппроксимации в сочетании с Гауссовым процессом (англ. High Dimensional Approximation combined with Gaussian Processes (HDAGP)) [14, 15].



Рис. 3. Срезы полученных данных по факторам *amp_E* (*a*), *amp_h* (*b*), *phase_E* (*c*) и *phase_h* (*d*) (случай II) для поверхностей SGP и HDAGP (кривые коричневого и зеленого цветов соответственно)

При рассмотрении результатов построения поверхностей отклика можно отметить их качественное сходство, однако аппроксимация, выполненная по методу HDAGP, дает отрицательные значения расщепления. Такие значения невозможны, так как значения расщепления вычисляются как модуль разности собственных частот f_1 и f_2 для эллиптической формы колебаний.

Оценка же качества аппроксимации по методу HDAGP дает близкие, но все же лучшие результаты, по сравнению с таковыми по методу SGP (табл. 3). Указанный результат говорит о необходимости обязательных проверок построенных моделей на адекватность, важности проведения проверочных расчетов по математической модели, чтобы в рас-

Таблица 3

Метод оценки	D 2	MSE	MAPE
	Λ ²	%	
HDAGP	0,983	3,169	7,368
SGP	0,979	3,497	7,583

Оценка качества аппроксимации значений расщепления для случая ІІ

Обозначения: R^2 – коэффициент детерминации, MSE, MAPE – среднеквадратичная и максимальная ошибки прогнозирования, соответственно.

сматриваемой области (по крайней мере) аппроксимация была выполнена с точностью, достаточной для работы.

Случай III. Рассмотрение математической модели с целью получить известный результат, представленный в [5], с помощью методов DoE и GSA. В указанной работе было показано определяющее влияние 4-й гармоники несовершенства на расщепление частоты полусферического резонатора с 2-й эллиптической рабочей формой колебаний. Для данного случая использованы исходные данные табл. 1, содержащей три фактора и интервалы их варьирования. Это k E, s h u p rho.

При построении соответствующей поверхности отклика были опробованы различные методы аппроксимации, в том числе отмеченные выше. Однако ожидаемый результат удалось получить только с применением метода деревьев регрессии с градиентным усилением (*англ*. Gradient Boosted Regression Trees (GBRT)) [14, 15]. Данный метод применим для аппроксимации сложных функций и работе с большими наборами данных; при этом на выходе находится не гладкая, а ступенчатая функция, что свойственно влиянию 4-й гармоники. При условии колебаний по 2-й эллиптической форме 4-я гармоника несовершенства имеет ярко выраженное влияние на расщепление, увеличивая его на порядок, по сравнению с ближайшими гармониками (2-й и 3-й). На рис. 4 представлены срезы данных в направлениях рассматриваемых факторов для поверхности, построенной методом GBRT.

По результатам расчета с помощью данного метода удалось зафиксировать локальный максимум в области 4-й гармоники разноплотности и разнотолщинности. При этом максимум в области 4-й гармоники для разноупругости зафиксировать не удалось. Вероятно,



Рис. 4. Срезы полученных данных по факторам *s_h* (*a*), *k_E* (*b*) и *p_rho* (*c*) для поверхности, построенной методом GBRT (случай III)

это вызвано существенно меньшим влиянием фактора на расщепление частот (индекс Соболя – 0,0098) и низким качеством построенной модели (коэффициент детерминации – 0,524).

Заключение

В настоящей работе представлена возможность использования на качественном уровне методов теории планирования эксперимента (DoE) и глобального анализа его чувствительности (GSA), для того чтобы установить особенности выбранной математической модели в отношении ее поведения и оценки степени влияния ее параметров на получаемые выходные характеристики.

Указанное использование методов продемонстрировано на примере математической модели полусферического кварцевого резонатора, обладающего параметрами, описывающими неидеальность его геометрии и физико-механических свойств материала его изготовления.

Показано, что наибольшее влияние на расщепление собственных частот резонатора оказывают параметры, связанные с его разнотолщинностью и разноплотностью. При этом влияние указанных параметров сопоставимо, что позволяет устранить эффект расщепления частоты через принудительное введение одного вида несовершенства при наличии другого (например, введения разнотолщинности при наличии разноплотности).

Показано определяющее влияние 4-й гармоники несовершенств на расщепление частоты, описанное в литературе.

В результате проведенной работы отмечается эффективность методов DoE и GSA для анализа математических моделей. Применение указанных методов позволяет выявить параметры модели, вносящие минимальный вклад в значение выходных параметров, и упростить модель путем их исключения. Кроме того, появляется возможность построения полиномиальной модели, описывающей исходную математическую модель с требуемой точностью, с целью сокращения времени исследования и проведения последующей оптимизации по требуемым параметрам.

Следует отметить необходимость уделять особое внимание оценке точности построения поверхности отклика и оценке качества соответствующей функции отклика.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пешехонов В. Г. Перспективы гироскопии // Сборник трудов XIII Всероссийского совещания по проблемам управления ВСПУ-2019. М.: Изд. Института проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН, 2019. С. 36–38.

2. **Переляев С. Е.** Современное состояние и научно-технический прогноз перспектив применения зарубежных волновых твердотельных гироскопов (аналитический обзор по зарубежным материалам) // Новости навигации. 2020. № 3. С. 14–28.

3. **Delhaye F.** HRG by Safran: The game-changing technology // Proceedings of the Conference "2018 IEEE International Symposium on Inertial Sensors and Systems (INERTIAL)". 26 – 29 March 2018, Lake Como, Italy. 2018. Pp. 173–177.

4. Журавлев В. Ф., Климов Д. М. Волновой твердотельный гироскоп. М.: Наука, 1985. 125 с.

5. Лунин Б. С., Матвеев В. А., Басараб М. А. Волновой твердотельный гироскоп. Теория и технология. М.: Радиотехника, 2014. 176 с.

6. Saltelli A., Ratto M., Andres T., Campolongo F., Cariboni J., Gatelli D., Saisana M., Tarantola S. Global sensitivity analysis. The Primer. Hoboken, New Jersey, USA: John Wiley & Sons, Ltd., 2008. 292 p.

7. Ермаков С. М., Жиглявский А. А. Математическая теория оптимального эксперимента. М.: Наука, Гл. редакция физико-математической литературы, 1987. 320 с.

8. Монтгомери Д. К. Планирование эксперимента и анализ данных. Ленинград: Судостроение, 1980. 383 с.

9. Новожилов В. В., Черных К. Ф., Михайловский Е. И. Линейная теория тонких оболочек. Ленинград: Политехника, 1991. 656 с.

10. Голдстейн Г. Классическая механика. Пер. с англ. М.: Наука. Гл. редакция физико-математической литературы, 1975. 413 с. 11. Меркурьев И. В., Подалков В. В. Динамика микромеханического и волнового твердотельного гироскопов. М.: Физматлит, 2009. 226 с.

12. Бабаков И. М. Теория колебаний. М.: Гостехиздат, 1958. 628 с.

13. Sobol' I. M. Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates // Mathematics and Computers in Simulation. 2001. Vol. 55. No. 1–3. Pp. 271–280.

14. Belyaev M., Burnaev E., Kapushev E., Panov M., Prikhodko P., Vetrov D., Yarotsky D. GTApprox: Surrogate modeling for industrial design // Advanced in Engineering Software. 2016. Vol. 102. December. Pp. 29–39.

15. Бурнаев Е., Зайцев А., Панов М., Приходько П., Янович Ю. Моделирование нестационарной ковариационной функции гауссовского процесса на основе разложения по словарю базисных функций // «Информационные технологии и системы – 2011". 34-я конференция молодых ученых и специалистов ИППИ РАН. 2–7 октября 2011, г. Геленджик. С. 357–362.

REFERENCES

1. **Peshekhonov V. G.,** Perspektivy giroskopii [Prospects for gyroscopy], In book: Transactions of the 13-th All-Russian Conf. on Management Problems "VSPU-2019", Published by The Trapeznikov Institute of Control Sciences RAS (2019) 36–38 (in Russian).

2. **Perelyaev S. E.,** Current state and scientific and technical forecast of the perspectives of application of foreign hemispherical resonator gyros (analytical review of foreign materials), Navigation News. (3) (2020) 14–28 (in Russian).

3. **Delhaye F.,** HRG by Safran: The game-changing technology, Proc. Conf. "2018 IEEE International Symposium on Inertial Sensors and Systems (INERTIAL)", 26 – 29 March 2018, Lake Como, Italy (2018) 173–177.

4. **Zhuravlev V. F., Klimov D. M.,** Volnovoi tverdotelnii giroskop [Wave solid-state gyro], Nauka Publ., Moscow, 1985 (in Russian).

5. Lunin B. S., Matveev V. A., Basarab M. A., Volnovoi tverdotelnii giroskop. Teoriya i tekhnologiya [Solid-state wave gyroscope. Theory and technology], Radiotechnika Publ., Moscow, 2014 (in Russian).

6. Saltelli A., Ratto M., Andres T., et al., Global sensitivity analysis. The Primer, John Wiley & Sons, Ltd., Hoboken, New Jersey, USA, 2008.

7. Ermakov S. M., Zhiglyavskii A. A., Matematicheskaya teoriya optimal'nogo eksperimenta. [Mathematical theory of optimal experiment], Nauka, Moscow, 1987 (in Russian).

8. Montgomery D., Design and analysis of experiments. John Wiley & Sons, Ltd., Hoboken, New Jersey, USA, 2013.

9. Novozhilov V. V., Chernykh K. F., Mikhailovskii E. I., Lineinaya teoriya tonkikh obolochek [The linear theory of thin shells] Politekhnika, Leningrad, 1991 (in Russian).

10. Goldstein H., Classical mechanics, Addison-Wesley Pub. Co, Cambridge, 1950.

11. Merkur'ev I. V., Podalkov V. V., Dinamika mikromekhanicheskogo i volnovogo tverdotel'nogo giroskopov [MEMS and CVG dynamics], Fizmatlit Publ., Moscow, 2009 (in Russian).

12. **Babakov I. M.,** Teoriya kolebanii [Oscillation theory], Gos. Izd. Technik.-Teor. Lit., Moscow, 1958 (in Russian).

13. Sobol' I. M., Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates, Math. Comput. Simul. 55 (1–3) (2001) 271–280.

14. Belyaev M., Burnaev E., Kapushev E., et al., GTApprox: Surrogate modeling for industrial design, Adv. Eng. Softw. 102 (December) 29–39.

15. Burnaev E., Zaytsev A., Panov M., et al., Modeling of non-stationary covariance function of Gaussian process using decomposition in dictionary of nonlinear functions, Proc. Conf. "Information Technology and Systems – 2011". Oct. 2–7 (2011) 357–362.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ШЕВЧЕНКО Сергей Александрович — инженер Высшей школы механики и процессов управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 shevchenko.sergei.a@yandex.ru ORCID: 0000-0003-3367-416X

МЕЛЬНИКОВ Борис Евгеньевич — доктор технических наук, профессор Высшей школы механики и процессов управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 melnikovboris@mail.ru

THE AUTHORS

SHEVCHENKO Sergei A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia shevchenko.sergei.a@yandex.ru ORCID: 0000-0003-3367-416X

MELNIKOV Boris E.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia melnikovboris@mail.ru

Статья поступила в редакцию 04.08.2022. Одобрена после рецензирования 19.10.2022. Принята 19.10.2022. Received 04.08.2022. Approved after reviewing 19.10.2022. Accepted 19.10.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2023

Научное издание

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS» TOM 16, № 1, 2023

Учредитель и издатель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-51457 от 19.10.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор В. К. Иванов – председатель ред. коллегии д-р физ.-мат. наук, профессор А. Э. Фотиади – зам. председателя ред. коллегии д-р физ.-мат. наук, профессор В. В. Дубов д-р физ.-мат. наук, профессор П. А. Карасёв канд. физ.-мат. наук, доцент В. М. Капралова канд. физ.-мат. наук О. А. Ящуржинская – научный редактор, корректор А. С. Колгатина – переводчик Н. А. Бушманова – ответственный секретарь

Телефон редакции 8 (812) 552-62-16

Сайт https://physmath.spbstu.ru/

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка Н. А. Бушмановой

Подписано в печать 30.03.2023. Формат 60х84/8. Печать цифровая. Усл. печ. л. Тираж 1000. Заказ .

Отпечатано с готового оригинал-макета, предоставленного ИЦ "ИКИ", в Издательско-полиграфическом центре Санкт-Петербургского политехнического университета. 195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29. Тел.: (812) 552-77-17; 550-40-14.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки»

1.ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 года журнал издавался в составе сериального издания "Научно-технические ведомости СПбГПУ". Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», журнал издавали под сдвоенными международными стандартными сериальными номерами ISSN 1994-2354 (сериальный) 2304-9782. В 2012 году он зарегистрирован как самостоятельное периодическое издание ISSN 2304-9782 (Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.). С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика**, включая следующие шифры научных специальностей: 1.1.8., 1.1.9., 1.3.2., 1.3.3., 1.3.4., 1.3.5., 1.3.6., 1.3.7., 1.3.8., 1.3.11., 1.3.19.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базах данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), Web of Science (Emerging Sources Citation Index).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ 2.1. Оформление материалов

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

В списки литературы **рекомендуется** включать ссылки на научные статьи, монографии, сборники статей, сборники конференций, электронные ресурсы с указанием даты обращения, патенты.

Как правило, нежелательны ссылки на диссертации и авторефераты диссертаций (такие ссылки допускаются, если результаты исследований еще не опубликованы, или не представлены достаточно подробно).

В списки литературы **не рекомендуется** включать ссылки на учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, ГОСТы и др. нормативные документы, на законы и постановления, а также на архивные документы (если все же необходимо указать такие источники, то они оформляются в виде сносок).

Рекомендуемый объем списка литературы для обзорных статей – не менее 50 источников, для остальных статей – не менее 10.

Доля источников давностью менее 5 лет должна составлять не менее половины. Допустимый процент самоцитирования – не выше 10 – 20. Объем ссылок на зарубежные источники должен быть не менее 20%.

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор текста осуществляется в редакторе MS Word.

6. **Формулы** набираются в редакторе MathType (не во встроенном редакторе Word) (мелкие формулы, символы и обозначения набираются без использования редактора формул). **Таблицы** набираются в том же формате, что и основной текст. В тексте буква «ё» заменяется на букву «е» и оставляется только в фамилиях.

7. Рисунки (в формате .tiff, .bmp, .jpeg) и таблицы оформляются в виде отдельных файлов. Шрифт – Times New Roman, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без знаков переноса. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (http://journals.spbstu.ru). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончится ДОСРОЧНО.

E-mail: physics@spbstu.ru, Сайт журнала: https://physmath.spbstu.ru/