МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



# НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические науки

# TOM 16, №3 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.3, 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  $\Pi$  Nº  $\Phi$ 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

Смирнов М. Ю., Филиппов В. В., Зияутдинов В. С., Богоносов К. А. Феноменологический подход к описанию фазовых переходов в твердых телах	9
Сахненко А. В., Милинский А. Ю., Барышников С. В., Стукова Е. В., Егорова И. В. Диэлек- трические и тепловые свойства нанокомпозитов на основе иодида диизопропиламмо- ния и наночастиц оксида алюминия	19
Харин Н. Ю., Паневин В. Ю., Петрук А. Д., Винниченко М. Я., Норватов И. А., Федоров В. В., Фирсов Д. А. Влияние стимулированного межзонного излучения на терагерцовую фотолюминесценцию в слоях арсенида галлия n-типа	29
Математическое моделирование физических процессов	
Алифов А. А. Взаимодействие вынужденных, параметрических и автоколебаний при ограниченном возбуждении и запаздываниях	39
Коёкин В. Ю., Булович С. В. Математическое моделирование методом узлового анализа теплофизических процессов в роторно-лопастном двигателе с внешним подводом тепла	49
Баранов М. А., Карсеева Э. К., Цыбин О. Ю. Суперкомпьютерные динамические модели глицина, триптофана и дифенилаланина в электрических полях терагерцового и инфра- красного спектральных диапазонов	59
Физическое материаловедение	
<b>Грищенко А. И., Игнатович И. А., Петросян О. Л.</b> Оптимизация микроструктуры компо- зиционных материалов с учетом ограничений на их свойства	73
Физика молекул	
<b>Лебедев А. А., Давыдов С. Ю.</b> Теоретическое исследование взаимодействия макромоле- кулы с квазисвободным и эпитаксиальным графеном, сформированном на политипах карбида кремния	87
Радиофизика	
Темкина В. С., Лиокумович Л. Б., Арчелков А. Б., Бучилко И. Р., Медведев А. В., Петров А. В. Описание волоконных световодов с линейным двулучепреломлением при анализе практи- ческих оптоволоконных схем методом векторов и матриц Джонса	95
Теоретическая физика	
<b>Хадка Ч. Б.</b> Вывод преобразования Лоренца для определения сжатия пространства (статья на английском языке)	115
Механика	
Савиковский А. В., Семенов А. С. Расчет параметров разрушения для трещин в	

Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 16 (3) 2022

Афанасов Е. Н., Кадыров С. Г., Певзнер В. В. Задача Стокса для эллиптического контура ... 177

# Contents

#### **Condensed matter physics**

Smirnov M. Yu., Filippov V. V., Ziyautdinov V. S., Bogonosov K. A. Phenomenological approach to the description of phase transitions in solids	9
Sakhnenko A. V., Milinskiy A. Yu., Baryshnikov S. V., Stukova E. V., Egorova I. V. Dielectric and thermal properties of nanocomposites based on diisopropylammonium iodide and alumina nanoparticles	19
Kharin N. Yu., Panevin V. Yu., Petruk A. D., Vinnichenko M. Ya., Norvatov I. A., Fedorov V. V., Firsov D. A. Influence of stimulated interband emission on terahertz photoluminescence in n-type gallium arsenide layers	29
Simulation of physical processes	
<b>Alifov A. A.</b> The interaction of mixed forced, parametric and self-excited oscillations at limited excitation and delays	20

Koyokin V. Yu., Bulovich S. V. Simulation of thermophysical processes in a rotor-blade engine with	
external heat supply by nodal analysis	49

**Baranov M. A., Karseeva E. K., Tsybin O. Yu.** Supercomputer dynamical models of glycine, tryptophan and diphenyl-L-alanine in the electrical fields of terahertz and infrared spectral ranges 59

#### Physical materials technology

Grishchenko A. I., Ignatovich I. A., Petrosian O. L. Optimization of the microstructure of compos-	
ite materials taking into account the constraints on their properties	73

#### **Physics of molecules**

#### **Radiophysics**

Temkina V. S., Liokumovich L. B., Archelkov A. B., Buchilko I. R., Medvedev A. V., Petrov A. V.	
Description of polarization-maintaining fibers in analyzing the practical fiber-optic circuits using	
the Jones formalism	95

#### **Theoretical physics**

Khadka C. B. Derivation of the Lorentz transformation for determination of space contraction ..... 115

#### Mechanics

Savikovskii A. V., Semenov A. S. Computation of fracture parameters for cracks in materials with	
cubic symmetry in the plane strain state1	131

Fedotov A. V., Belyaev A. K., Polyanskiy V. A. Numerical study of the efficiency of modal filter method and observer method for implementation of modal control of vibrations of elastic	
systems	160
Afanasov E. N., Kadyrov S. G., Pevzner V. V. The Stokes problem for an elliptic contour	177

## Физика конденсированного состояния

Научная статья УДК 538.9 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16301

### ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

М. Ю. Смирнов <sup>1</sup>, В. В. Филиппов <sup>2</sup>  $\boxtimes$ ,

#### В. С. Зияутдинов <sup>1</sup>, К. А. Богоносов <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Московский государственный университет технологий и управления имени К. Г. Разумовского, г. Москва, Россия; <sup>2</sup> Липецкий государственный педагогический университет имени П. П. Семенова-Тян-Шанского, г. Липецк, Россия

#### ⊠ wwfilippow@mail.ru

Аннотация. В работе рассмотрен общий модельный подход к проблеме описания конкуренции и сосуществования различных фаз конденсированного состояния на основе теории фазовых переходов второго рода Ландау. Показано, что многокомпонентный параметр порядка приводит к более сложной (по сравнению с однокомпонентным) картине фазовых переходов и возникновению областей на фазовой диаграмме, в которых различные пространственно-упорядоченные состояния могут конкурировать или сосуществовать. Рассмотренная модель применима для анализа фазовых переходов в твердых телах с различными электрическими свойствами и магнитными состояниями. Предлагаемый подход позволяет численно моделировать свободную энергию твердого тела вблизи точек фазового перехода. Указаны необходимые условия и границы применимости анализируемой расчетной модели.

**Ключевые слова:** фазовый переход второго рода, параметр порядка, феноменологический подход, конкуренция и сосуществование фаз

Для цитирования: Смирнов М. Ю., Филиппов В. В., Зияутдинов В. С., Богоносов К. А. Феноменологический подход к описанию фазовых переходов в твердых телах // Научнотехнические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 9–18. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16301

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.16301

## PHENOMENOLOGICAL APPROACH TO THE DESCRIPTION OF PHASE TRANSITIONS IN SOLIDS

M. Yu. Smirnov <sup>1</sup>, V. V. Filippov <sup>2</sup>  $\bowtie$ ,

#### V. S. Ziyautdinov<sup>1</sup>, K. A. Bogonosov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Moscow State University of Technology and Management, Moscow, Russia;

<sup>2</sup> Lipetsk State Pedagogical University named after P. P. Semenov-Tyan-Shansky,

Lipetsk, Russia

<sup>™</sup> wwfilippow@mail.ru

© Смирнов М. Ю., Филиппов В. В., Зияутдинов В. С., Богоносов К. А., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Abstract. A general model approach to the problem of describing the competition and coexistence of different phases of a condensed state is considered on the basis of Landau's theory of second-order phase transitions. We show that the multicomponent order parameter leads to a more complex pattern of phase transitions and the appearance of regions in the phase diagram in which different spatially ordered states can compete or coexist. The solution of the necessary equations of the Ginzburg–Landau theory was carried out by the variational method. The model considered in this paper is applicable to the analysis of phase transitions in solids with different electrical properties (transitions to the superconducting state, metal–dielectric and metal–semiconductor transformations) and magnetic states (para-magnet–ferromagnet, para-magnet–antiferromagnet). The proposed approach makes it possible to numerically simulate the free energy of a solid near the phase transition points. The necessary conditions and limits of applicability of the analyzed computational model are shown.

**Keywords:** second-order phase transition, order parameter, phenomenological approach, competition and coexistence of phases

**For citation:** Smirnov M. Yu., Filippov V. V., Ziyautdinov V. S., Bogonosov K. A., Phenomenological approach to the description of phase transitions in solids, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 9–18. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16301

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

#### Введение

В современной теории конденсированных сред [1, 2] нередко требуется рассматривать раздельное или одновременное сосуществование различных состояний (или фаз) [3, 4]. Отдельные фазовые переходы в твердых телах, связанные с резким изменением их электрических и магнитных свойств, не находят объяснения в рамках существующих моделей фазовых переходов первого или второго рода. Детальное рассмотрение данной проблемы на микроскопическом уровне требует применения достаточно сложных вычислительных схем [5, 6] в силу отсутствия универсальных методов решения и анализа возникающих нелинейных уравнений. При экспериментальном подходе к проблеме приходится иметь дело с величинами, лишь косвенно связанными с конкретным микроскопическим механизмом и характеризующими поведение макроскопическими величинами [7, 8]. Поэтому чрезвычайно плодотворным оказывается феноменологический подход, развитый В. Л. Гинзбургом и Л. Д. Ландау, основанный на общей термодинамической теории Ландау фазовых переходов второго рода [9] и являющийся универсальным применительно к металлам, полупроводникам и диэлектрикам.

В данной статье рассмотрен феноменологический подход к проблеме описания фазовых переходов второго рода с сосуществованием и конкуренцией различных упорядоченных состояний.

В настоящем исследовании построена методика расчета свободной энергии вблизи точек фазового перехода с применением вариационного метода к уравнению Гинзбурга – Ландау. Выполнено компьютерное моделирование термодинамических параметров и проведено сопоставление полученных результатов с экспериментальными данными.

#### Постановка физико-математической задачи

Рассмотрим основы теории фазовых переходов второго рода Ландау, которая построена на разложении свободной энергии по степеням параметра порядка вблизи точки фазового перехода, где параметр порядка мал. Область применимости теории ограничена близостью к критической температуре фазового перехода:  $T_C - T << T_C$ .

Разложение плотности свободной энергии по степеням параметра порядка  $\Psi$ , в соответствии с теорией фазовых переходов второго рода, можно записать в следующем виде [9, 10]:

© Smirnov M. Yu., Filippov V. V., Ziyautdinov V. S., Bogonosov K. A., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

$$F_{1} = F_{0} + \alpha \left|\Psi\right|^{2} + \frac{\beta}{2} \left|\Psi\right|^{4}, \qquad (1)$$

где  $F_1$ ,  $F_0$  — величины свободной энергии тела при низких температурах в отсутствие внешнего магнитного поля и в нормальном состоянии при  $T > T_c$ , соответственно;  $\alpha$ ,  $\beta$  — некоторые феноменологические коэффициенты разложения, характеризующие материал.

Эти феноменологические параметры выражаются через наблюдаемые макроскопические величины.

Определим такое значение параметра порядка, при котором свободная энергия достигает минимума:

$$\frac{dF_{s0}}{d|\Psi|^2} = 0 \Longrightarrow |\Psi_0|^2 = -\frac{\alpha}{\beta}$$

Поскольку при  $T = T_c$  параметр порядка должен обращаться в нуль, а при  $T < T_c$  отличен от нуля, то и коэффициент  $\alpha = 0$  при  $T = T_c$  и  $\alpha < 0$  при  $T < T_c$ . В первом порядке по  $(T_c - T)$  можно записать  $\alpha = \tilde{\alpha}(T - T_c)$ , где  $\tilde{\alpha}$  не зависит от близости к  $T_c$ . Коэффициент  $\beta$  можно считать положительным и от температуры не зависящим [11]. Это приведет к минимуму функционала при  $T < T_c$  и отличному от нуля параметру порядка  $\Psi$ . С другой стороны, при  $T > T_c$  минимум будет достигнут при нулевом значении параметра порядка, что соответствует нормальному состоянию образца.

В общем случае неоднородного тела во внешнем магнитном поле необходимо исследовать разложение свободной энергии Гиббса по степеням  $\Psi$  [11]:

$$G_{\rm SH} = G_n + \int \left[ \alpha \left| \Psi \right|^2 + \frac{\beta}{2} \left| \Psi \right|^4 + \frac{1}{4m} \left| -i\hbar\nabla\Psi - \frac{2e}{c} \mathbf{A}\Psi \right|^2 + \frac{\left(\operatorname{rot} \mathbf{A}\right)^2}{8\pi} - \frac{\operatorname{rot} \mathbf{A} \cdot \mathbf{H}}{4\pi} \right] dV,$$

где m — масса свободного электрона; **H** — напряженность внешнего магнитного поля; предпоследнее слагаемое определяет плотность магнитной энергии (здесь гоt **A**(**r**) задает напряженность магнитного поля в данной точке тела); слагаемое с градиентным членом представляет собой плотность кинетической энергии электронов; интегрирование ведется по всему объему.

Найдем такие уравнения относительно  $\Psi(\mathbf{r})$  и  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ , которые давали бы минимальное значение свободной энергии. Для этого необходимо решить вариационные задачи:

$$\delta_{\Psi^*}G_{sH} = 0, \ \delta_{\Psi}G_{sH} = 0, \ \delta_{A}G_{sH} = 0.$$

Первая из указанных вариаций приводит к хорошо известному из теории сверхпроводимости первому уравнению Гинзбурга — Ландау и соответствующему граничному условию [10]:

$$\alpha \Psi + \beta |\Psi|^2 \Psi + \frac{1}{4m} \left( -i\hbar \nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi = 0, \qquad (2)$$
$$\left( i\hbar \nabla + \frac{2e}{c} \mathbf{A} \Psi \right) \mathbf{n} = 0,$$

где **n** – единичный вектор нормали к поверхности сверхпроводника.

Вариация по  $\Psi$  приводит к комплексно-сопряженному уравнению. Получим уравнение относительно векторного потенциала **A**; для этого необходимо решить последнюю из указанных вариационных задач:

$$\mathbf{j}_{s} = -\frac{i\hbar e}{2m} \left( \Psi^{*} \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^{*} \right) - \frac{2e^{2}}{mc} \mathbf{A} \left| \Psi \right|^{2}, \qquad (3)$$

что представляет собой второе уравнение теории Гинзбурга – Ландау [10].

#### Основные результаты расчетов

Приведенные в предыдущем разделе выкладки хорошо описывают переход между двумя фазами. В случае конкуренции или сосуществования большего количества фаз структура

функционала (1), являющегося основой феноменологического описания, должна отличаться от рассмотренной ранее. Должен отличаться и вид самого параметра порядка.

Стоит отметить, что структура параметра порядка может быть получена при исследовании микроскопической теории явления, как это сделано для функционала Гинзбурга — Ландау в схеме среднего поля Бардина, Купера и Шриффера при спаривающем притяжении (че-му соответствует однокомпонентный комплексный параметр порядка) [12].

В общем случае параметр порядка может быть задан в виде

$$\Psi(\mathbf{R},\mathbf{k}) = \sum_{s} \Psi_{s}(\mathbf{R}) \varphi_{s}(\mathbf{R},\mathbf{k}),$$

где  $\Psi_s(\mathbf{R})$  — коэффициенты разложения параметра порядка по полной ортонормированной системе функций  $\varphi_s(\mathbf{R}, \mathbf{k})$ , получаемой из микроскопического описания состояния тела.

Зависимость коэффициентов разложения от радиуса-вектора **R** позволяет описывать неоднородности строения материала.

Пусть состояние твердого вещества описывается двухкомпонентным параметром порядка, как например, это получено в статье [13]. Разложение плотности свободной энергии по степеням параметра порядка в таком случае представляется в виде  $f = f_0 + f_g + f_m$  [14], где

$$f_{0} = \sum_{ss'} A_{ss'} \Psi_{s}^{*} \Psi_{s'} + \frac{1}{2} \sum_{ss'tt'} B_{ss'tt'} \Psi_{s}^{*} \Psi_{s'}^{*} \Psi_{t} \Psi_{t'},$$

представляет собой разложение плотности свободной энергии по второй и четвертой степеням параметра порядка.

Здесь матрицы  $A_{ss'}$  и  $B_{ss'tt'}$  определяются либо из микроскопического описания, либо выражаются через величины, наблюдаемые макроскопически. Элементы матрицы  $A_{ss'}$ , как и в случае исследования функционала (1), должны зависеть от температуры образца, определяя тем самым температуру установления упорядоченного состояния.

Градиентный вклад следует выражению

$$f_g = \frac{\hbar^2}{4m} \sum_{ss'} \left[ \hat{D} \Psi_s \right]^+ M_{ss'} \left[ \hat{D} \Psi_{s'} \right],$$

где элементы матрицы  $M_{ss'}$  также определяются микроскопической теорией или выража-

ются на основе макроскопических наблюдаемых величин; оператор  $\hat{D} = -i\nabla - \frac{2e}{\hbar c}\mathbf{A}$ .

Данный вклад учитывает не только внешнее магнитное поле, но и внутреннее. И, наконец, плотность энергии магнитного поля выражается как

$$f_m = \frac{z_0}{8\pi} (\operatorname{rot} \mathbf{A})^2.$$

Производя вариацию функционала, получим систему из двух уравнений (для случая двухкомпонентного параметра порядка) вида

$$\sum_{s'} A_{ss'} \Psi_{s'} + \sum_{s'tt'} B_{ss'tt'} \Psi_{s'}^* \Psi_t \Psi_{t'} + \sum_{s'} M_{ss'} \left( -i\nabla - \frac{2e}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^* \Psi_{s'} = 0$$

и граничные условия

$$\sum_{s'} M_{ss'} \left( i \nabla + \frac{2e}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi_{s'} \mathbf{n} = 0.$$

Полученная система уравнений может приводить к нескольким нетривиальным решениям, которые могут отличаться, например, относительной фазой компонент параметра порядка. Эти минимумы полностью определяются соотношением между элементами матриц  $A_{ss'}$ ,  $B_{ss'tt'}$  и  $M_{ss'}$ , как, например, рассмотрено в работах [14, 15].

С другой стороны, возникновение одного из упорядоченных состояний можно описать обычным разложением свободной энергии по четным степеням данного параметра порядка:

$$f = a_1 \psi^2 + \frac{1}{2} b_1 \psi^4.$$

Другое упорядоченное состояние может быть описано аналогично:

$$f = a_2 \alpha^2 + \frac{1}{2} b_2 \alpha^4.$$

Здесь коэффициенты  $a_i$  определяют температуру перехода из основного состояния в упорядоченное, аналогично коэффициенту  $\alpha$  в разложении (1). Конкуренция двух упорядоченных состояний приводит к ненулевому значению градиентного вклада, что приводит к появлению дополнительного слагаемого  $b_{1,2}\psi_2\alpha_2$ .

Таким образом, функционал, описывающий сосуществование и конкуренцию двух упорядоченных состояний, можно описать в виде

$$f = a_1 \psi^2 + a_2 \alpha^2 + \frac{1}{2} b_1 \psi^4 + \frac{1}{2} b_2 \alpha^4 + b_{12} \psi^2 \alpha^2.$$
(4)

Коэффициенты  $a_1$  и  $a_2$  можно записать в следующем виде [11]:

$$a_1 = -a'\tau', a_2 = -a''\tau'', \tau' = \frac{T_1 - T}{T_1}, \tau'' = \frac{T_2 - T}{T_2},$$

где  $T_1$ ,  $T_2$  — температуры переходов в соответствующие упорядоченные состояния, ниже которых могут быть отличны от нуля параметры порядка  $\psi$  и  $\alpha$ .

Приведенное выше разложение имеет смысл лишь в окрестности малой области фазовой диаграммы, где линии графиков  $T_1$  и  $T_2$  либо пересекаются, либо проходят близко друг к другу.

В более общем случае многокомпонентного параметра порядка можно говорить о формулах, аналогичных (4), которые задают появление различных видов упорядоченного состояния и их сосуществование и конкуренцию [16 – 20].

Рассмотренная выше модель применима исключительно для микро- и макротел, поскольку не учитывает вклада поверхностного натяжения, значимого для наночастиц [21, 22]. Величина и форма поверхности вносят весьма существенный вклад в общую энергию в наноматериалах [23, 24] и значительно влияют на термодинамические параметры фазовых переходов [23, 25, 26]. Как показано в работах [27 – 29], вкладом поверхностной энергии для однородных твердых частиц можно пренебречь при размерах более 200 нм по каждому из пространственных направлений, поскольку вклад поверхности в общую энергетику системы в этом случае не превышает 2 %.

#### Анализ модели и результатов расчетов

Рассмотрим, к чему может приводить функционал с двухкомпонентным параметром порядка, аналогичный уравнению (4). Для этого исследуем его на наличие минимумов и проследим изменение топологии изолиний свободной энергии. На рис. 1 показаны изолинии свободной энергии (4)  $f(\psi, \alpha) = \text{const}$ , а на рис. 2 — фрагмент фазовой диаграммы.

В нормальной фазе при  $T > T_1$  и  $T > T_2$  свободная энергия имеет минимум при  $\psi = 0$ ,  $\alpha = 0$  (см. рис. 1, *a* и рис. 2, область *N* правее ломаной линии 2-*C*-1'), который при пе-

реходе в область с 
$$T < T_2$$
 и  $T > T_1$  в α-фазу смещается по оси α в точку  $\psi = 0$ ,  $\alpha = \sqrt{-\frac{a_2}{b_2}}$ 

(см. рис. 1, *b* и рис. 2, область  $\alpha$  в секторе 2'-*C*-1'). Этот минимум, однако, является единственной особой точкой свободной энергии не во всей области существования  $\alpha$ -фазы, а лишь в ее верхней части. При переходе через линию  $T < T_1$  к минимуму, определяющему

термодинамически устойчивое  $\alpha$ -состояние, добавляется седловая точка при  $\psi = \sqrt{-\frac{a_1}{b_1}},$ 

 $\alpha = 0$ , в которой свободная энергия имеет минимум по переменной  $\psi$  при  $\alpha = 0$  (рис. 1, *c* и рис. 2, заштрихованный треугольник 2'*C*4).



Рис. 1. Топология изолиний свободной энергии в координатах ψ и α (горизонтальная и вертикальная оси, соответственно), показывающая возможные состояния на фазовой диаграмме: нормальная фаза (*a*);
α-фаза без ψ-фазы (*b*) и с ее флуктуациями (*c*); сосуществование α- и ψ-фаз (*d*); ψ-фаза с флуктуациями α-фазы (*e*) и ψ-фаза (*f*).
Максимумы *M*, минимумы *m* и седла свободной энергии *S* показаны жирными точками



Рис. 2. Фрагмент фазовой диаграммы состояния твердого тела в окрестности линий перехода: границы возможного возникновения упорядоченного состояния показаны прямыми 1 – 1' и 2 – 2' (N – нормальное состояние без упорядочения); буквами ψ, α, ψ + α отмечены соответствующие фазы и их сосуществование (заштрихованные области соответствуют развитым флуктуациям одной фазы при наличии другой). Линии фазовых переходов выделены жирными линиями

С другой стороны, при переходе из нормального состояния в область с  $T > T_2$  и  $T < T_1$ в  $\psi$ -фазу, минимум смещается по оси  $\psi$  в точку  $\alpha = 0$ ,  $\psi = \sqrt{-\frac{a_1}{b_1}}$  (см. рис. 1, f и область  $\psi$  в секторе 2-C-1 на рис. 2). Этот минимум также дополняется седловой точкой с координатами  $\alpha = \sqrt{-\frac{a_2}{b_2}}$  и  $\psi = 0$  при переходе через линию  $T < T_2$  (см. рис. 1, e и рис. 2, заштрихованный треугольник 1C3). Наконец, на фазовой диаграмме можно обнаружить область, в которой будут сосуществовать  $\alpha$ - и  $\psi$ - фазы (рис. 1, d и область  $\psi$  +  $\alpha$  ниже ломаной линии 3-C-4 на рис. 2). При этом оказывается, что фазовый переход происходит не при температурах  $T_1$  и  $T_2$ . Указанные температуры показывают границы возможного возникновения упорядоченного состояния, и в областях конкуренции фаз (см. рис. 1, *с* и *e*) определяют области развитых флуктуаций конкуренции имевшегося упорядоченного состояния с появляющимся порядком. Фазовый переход в область сосуществования происходит при более низкой температуре (линии 3-*C* и 4-*C* на рис. 2) и характеризуется топологией изолиний свободной энергии, как на рис. 1, *d*. Стоит отметить, что в точке *C* на рис. 2 сходятся области четырех различных фаз состояния вещества.

#### Заключение

Таким образом, использование теории фазовых переходов второго рода в качестве основы феноменологического рассмотрения конкурирующих и сосуществующих фаз при выборе соответствующего параметра порядка, который может быть получен из микроскопического описания состояния вещества, позволяет на качественном уровне описывать экспериментально наблюдаемые состояния конденсированных сред.

Феноменологический подход оказывается более простым при вычислениях, чем микроскопическое описание, однако не позволяет определить те механизмы, которые приводят к возникновению упорядочения в системе. Границы применимости рассмотренного подхода — близость к границе фазового перехода, область, в которой достаточно первых двух слагаемых в разложении свободной энергии по степеням параметра порядка.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Girvin S. M., Yang K. Modern condensed matter physics. 1st edition. Cambridge: Cambridge University Press, 2019. 714 p.

2. Anderson P. W. Basic notions of condensed matter physics. Boca Raton, USA: CRC Press, 2018, 564 p.

3. Koblischka M. R., Koblischka-Veneva A. Superconductivity 2022 // Metals. 2022. Vol. 12. No. 4. P. 568.

4. Ильинский А. В., Шадрин Е. Б. Фазовый переход полупроводник — металл в окислах ряда Магнели: VO и V<sub>2</sub>O<sub>3</sub> // Физика твердого тела. 2022. Т. 64. № 10. С. 1552–1556.

5. Jeong M. Y., Yang H.-J., Kim H. S., Kim Y. B., Lee S. B., Han M. J. Crucial role of out-of-plane Sb p-orbitals in Van Hove singularity formation and electronic correlations in the superconducting kagome metal CsV<sub>3</sub>Sb<sub>5</sub> // Physical Review B. 2022. Vol. 105. No. 23. P. 235145.

6. Choudhary K., Garrity K. Designing high- $T_c$  superconductors with BCS-inspired screening, density functional theory, and deep-learning // Npj Computational Materials. 2022. Vol. 8. 22 November. P. 244.

7. **Набиуллин И. Р., Гадиев Р. М., Лачинов А. Н.** Влияние фазового перехода второго рода на электропроводность структуры металл/полупроводник // Физика и техника полупроводников. 2019. Т. 53. № 4. С. 462–465.

8. Фролов К. В., Алексеева О. А., Любутин И. С., Ксенофонтов В., Смирнова Е. С., Темеров В. Л., Гудим И. А., Любутина М. А. Структурный и магнитные фазовые переходы в мультиферроике HoFe<sub>3</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>4</sub> по данным мессбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифракции // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2022. Т. 162. № 5. С. 718–729.

9. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Теоретическая физика: Т. IX. Статистическая физика. Ч. 2. Теория конденсированного состояния. М.: Физматлит, 2021. 440 с.

10. Шмидт В. В. Введение в физику сверхпроводников. Изд. 2-е. М.: Московский центр непрерывного математического образования (ЦНМО), 2000. 397 с.

11. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Т. V. Статистическая физика. Ч. 1. М.: Физматлит, 2021. 616 с.

12. Минеев В. П., Самохин К. В. Введение в теорию необычной сверхпроводимости. М.: Изд-во МФТИ, 1998. 144 с.

13. Белявский В. И., Копаев Ю. В. Сверхпроводимость отталкивающихся частиц // Успехи физических наук. 2006. Т. 176. № 5. С. 457–485.

14. Белявский В. И., Копаев Ю. В., Смирнов М. Ю. Тетракритическая точка и токовые циркуляции в сверхпроводящем состоянии // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2005. Т. 128. № 3. С. 525–543.

15. Belyavsky V. I., Kopaev Yu. V., Smirnov M. Yu. Interplay of the superconducting state and orbital antiferromagnetic state of the high-temperature cuprate superconductors // Physical Review B. 2005. Vol. 72. No. 13. P. 132501.

16. Елесин В. Ф., Капаев В. В., Копаев Ю. В. Существование ферромагнетизма и неоднородной сверхпроводимости // Успехи физических наук. 2004. Т. 174. № 9. С. 1017–1022.

17. Mukuda H., Shimizu S., Iyoi A., Kitaoka Y. High- $T_c$  superconductivity and antiferromagnetism in multilayered copper oxides (A new paradigm of superconducting mechanism) // Journal of the Physical Society of Japan. 2012. Vol. 81. No. 1. P. 011008.

18. **Гильмутдинов В. Ф., Тимиргазин М. А., Аржников А. К.** Сосуществование магнетизма и сверхпроводимости в высокотемпературных сверхпроводниках // Химическая физика и мезоскопия. 2018. Т. 20. № 3. С. 365–377.

19. Timirgazin M. A., Gilmutdinov V. F., Arzhnikov A. K. Phase diagrams of singlet superconducting states with mixed symmetry // Physica C: Superconductivity and its Applications. 2019. Vol. 557. 15 February. Pp. 7–11.

20. Yamase H., Eberlein A., Metzner W. Coexistence of incommensurate magnetism and superconductivity in the two-dimensional Hubbard model // Physical Review Letters. 2016. Vol. 116. No. 9. P. 096402.

21. Сдобняков Н. Ю., Самсонов В. М., Базулев А. Н., Кульпин А. Н. О поверхностном натяжении нанокристаллов различной природы // Конденсированные среды и межфазные границы. 2007. Т. 9. № 3. С. 255–260.

22. Магомедов М. Н. О поверхностном давлении для ограниченного нанокристалла // Письма в журнал технической физики. 2005. Т. 31. № 1. С. 24–34.

23. Магомедов М. Н. Изменение термодинамических свойств твердого раствора Si-Ge при уменьшении размера нанокристалла // Физика твердого тела. 2019. Т. 61. № 11. С. 2169–2177.

24. Магомедов М. Н. О зависимости поверхностной энергии от размера и формы нанокристалла // Физика твердого тела. 2004. Т. 46. № 5. С. 924–937.

25. **Нечаев В. Н., Шуба А. В.** О возможном механизме повышения температуры фазового перехода в композите сегнетоэлектрик-диэлектрик // Физика твердого тела. 2014. Т. 56. № 5. С. 949–952.

26. Магомедов М. Н. О температуре сверхпроводящего перехода для нанокристаллов металлов // Физика твердого тела. 2003. Т. 45. № 7. С. 1159–1163.

27. **Суздалев И. П.** Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов (Серия: Синергетика: от прошлого к будущему. № 25). М.: Либроком, 2019. 592 с.

28. **Нечаев В. Н., Шуба А. В.** Размерные эффекты в фазовых переходах и физических свойствах ферроиков. М.: ИНФРА-М, 2023. 384 с.

29. Нечаев В. Н., Шуба А. В. Об аномальном влиянии внешнего электрического поля на фазовый переход второго рода в тонкой сегнетоэлектрической пленке // Физика твердого тела. 2020. Т. 62. № 4. С. 567–573.

#### REFERENCES

1. Girvin S. M., Yang K., Modern condensed matter physics, 1st edition, Cambridge University Press, Cambridge, 2019.

2. Anderson P. W., Basic notions of condensed matter physics. CRC Press, Boca Raton, USA, 2018.

3. Koblischka M. R., Koblischka-Veneva A., Superconductivity 2022, Metals. 12 (4) (2022) 568.

4. Ilinskiy A. V., Shadrin E. B., Semiconductor – metal phase transition in oxides of Magneli series: VO and  $V_2O_3$ , Phys. Solid State. 64 (10) (2022) 1533–1537.

5. Jeong M. Y., Yang H.-J., Kim H. S., et al., Crucial role of out-of-plane Sb *p*-orbitals in Van Hove singularity formation and electronic correlations in the superconducting kagome metal  $CsV_3Sb_5$ , Phys. Rev. B. 105 (23) (2022) 235145.

6. Choudhary K., Garrity K., Designing high- $T_c$  superconductors with BCS-inspired screening, density functional theory, and deep-learning, Npj Comput. Mater. 8 (22 Nov.) (2022) 244.

7. Nabiullin I. R., Gadiev R. M., Lachinov A. N., Effect of a second-order phase transition on the electrical conductivity of metal/semiconductor structures, Semicond. 53 (4) (2019) 439–441.

8. Frolov K. V., Alekseeva O. A., Lyubutin I. S., et al., Structural and magnetic phase transitions in the multiferroic  $HoFe_3(BO_3)_4$  observed by Mussbauer spectroscopy and X-ray diffraction, JETP. 135 (5) (2022) 698–707.

9. Landau L. D., Lifshitz E. M., Pitaevskii L. P., Course of theoretical physics. Vol. 9. Statistical Physics. Part 2, Elsevier, New Delhi, 2020.

10. Schmidt V. V., The physics of superconductors: Introduction to fundamentals and applications, Edited by P. Müller, A. V. Ustinov, Springer, Berlin, 1997.

11. Landau L. D., Lifshitz E. M., Course of theoretical physics Vol. 5. Statistical physics. Part 1, Elsevier, New Delhi, 2020.

12. Mineev V. P., Samokhin K. V., Landau L. D., Introduction to unconventional superconductivity, CRC Press, Boca Raton, Florida, USA, 1999.

13. Belyavskii V. I., Kopaev Y. V., Superconductivity of repulsive particles, Phys.-Usp. 49 (5) (2006) 441-467.

14. Belyavsky V. I., Kopaev Y. V., Smirnov M. Yu., Tetracritical point and staggered vortex currents in superconducting state, JETP. 101 (3) (2005) 452–467.

15. Belyavsky V. I., Kopaev Y. V., Smirnov M. Yu., Interplay of the superconducting state and orbital antiferromagnetic state of the high-temperature cuprate superconductors, Phys. Rev. B. 72 (13) (2005) 132501.

16. Elesin V. F., Kapaev V. V., Kopaev Y. V., Coexistence of ferromagnetism and nonuniform superconductivity, Phys.-Usp. 47 (9) (2004) 949.

17. Mukuda H., Shimizu S., Iyoi A., Kitaoka Y., High- $T_c$  superconductivity and antiferromagnetism in multilayered copper oxides (A new paradigm of superconducting mechanism), J. Phys. Soc. Jap. 81 (1) (2012) 011008.

18. Gilmutdinov V. F., Timirgazin M. A., Arzhnikov A. K., Coexistence of magnetism and superconductivity in high-temperature superconductors, Chem. Phys. Mesosc. 20 (3) (2018) 365–377 (in Russian).

19. Timirgazin M. A., Gilmutdinov V. F., Arzhnikov A. K., Phase diagrams of singlet superconducting states with mixed symmetry, Phys. C: Supercond. Appl. 557 (15 Febr) (2019) 7–11.

20. Yamase H., Eberlein A., Metzner W., Coexistence of incommensurate magnetism and superconductivity in the two-dimensional Hubbard model, Phys. Rev. Lett. 116 (9) (2016) 096402.

21. Sdobnyakov N. Yu., Samsonov V. M., Bazulev A. N., Kulpin D. A., On the surface tension of nanocrystalls of the different nature, Condens. Matt. Interphases. 9 (3) (2007) 255–260 (in Russian).

22. **Magomedov M. N.,** The surface pressure in a faceted nanocrystal, Techn. Phys. Lett. 31 (1) (2005) 13–17.

23. **Magomedov M. N.,** Change in the thermodynamic properties of a Si–Ge solid solution at a decrease of the nanocrystal size, Phys. Solid State. 61 (11) (2019) 2145–2154.

24. **Magomedov M. N.,** Dependence of the surface energy on the size and shape of a nanocrystal, Phys. Solid State. 46 (5) (2004) 954–968.

25. Nechaev V. N., Shuba A. V., On the possible mechanism of increase in the phase transition temperature in a ferroelectric-insulator composite, Phys. Solid State. 56 (5) (2014) 985–988.

26. **Magomedov M. N.,** On the superconducting transition temperature for metallic nanocrystals, Phys. Solid State. 45 (7) (2003) 1213–1218.

27. **Suzdalev I. P.,** Nanotekhnologiya: Fiziko-khimiya nanoklasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Nanotechnology: Physics-chemistry of nanoparticles, nanostructures and nanomaterials], Librokom Publishing, Moscow, 2019 (in Russian).

28. Nechaev V. N., Shuba A. V., Razmernye effekty v fazovyh perekhodah i fizicheskih svojstvah ferroikov. [Size effects in phase transitions and physical properties of ferroics], INFRA-M Publishing, Moscow, 2023 (in Russian).

29. Nechaev V. N., Shuba A. V., On anomalous influence of an external electric field on a second-order transition in a thin ferroelectric film, Phys. Solid State. 62 (4) (2020) 653–659.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СМИРНОВ Михаил Юрьевич — кандидат физико-математических наук, доцент Московского государственного университета технологий и управления имени К. Г. Разумовского, г. Москва, Россия. 109004, Россия, г. Москва, ул. Земляной Вал, 73. m\_u\_smirnov@mail.ru ORCID: 0000-0002-9820-9253

ФИЛИППОВ Владимир Владимирович — доктор физико-математических, наук, профессор Липецкого государственного педагогического университета имени П. П. Семенова-Тян-Шанского, г. Липецк, Россия. 398020, Россия, г. Липецк, ул. Ленина, 42 wwfilippow@mail.ru

ORCID: 0000-0003-4323-351X

ЗИЯУТДИНОВ Владимир Сергеевич — кандидат педагогических наук, доцент Московского государственного университета технологий и управления имени К. Г. Разумовского, г. Москва, Россия.

109004, Россия, г. Москва, ул. Земляной Вал, 73. zevslipetsk@yandex.ru ORCID: 0000-0002-5136-837X

БОГОНОСОВ Константин Александрович — кандидат технических наук, доцент Московского государственного университета технологий и управления имени К. Г. Разумовского, г. Москва, Россия.

109004, Россия, г. Москва, ул. Земляной Вал, 73. k.bogonosov@mgutm.ru ORCID: 0000-0002-1038-2351

#### THE AUTHORS

#### SMIRNOV Mikhail Yu.

Moscow State University of Technology and Management 73 Zemlyanoy Val St., Moscow, 109004, Russia m\_u\_smirnov@mail.ru ORCID: 0000-0002-9820-9253

#### FILIPPOV Vladimir V.

Lipetsk State Pedagogical University named after P. P. Semenov-Tyan-Shansky 42 Lenin St., Lipetsk, 398020, Russia wwfilippow@mail.ru ORCID: 0000-0003-4323-351X

#### ZIYAUTDINOV Vladimir S.

Moscow State University of Technology and Management 73 Zemlyanoy Val St., Moscow, 109004, Russia zevslipetsk@yandex.ru ORCID: 0000-0002-5136-837X

#### **BOGONOSOV** Konstantin A.

Moscow State University of Technology and Management 73 Zemlyanoy Val St., Moscow, 109004, Russia k.bogonosov@mgutm.ru ORCID: 0000-0002-1038-2351

Статья поступила в редакцию 11.04.2023. Одобрена после рецензирования 16.05.2023. Принята 16.05.2023. Received 11.04.2023. Approved after reviewing 16.05.2023. Accepted 16.05.2023.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2023

Научная статья УДК537.226 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16302

## ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ИОДИДА ДИИЗОПРОПИЛАММОНИЯ И НАНОЧАСТИЦ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

#### А. В. Сахненко<sup>1</sup>, А. Ю. Милинский<sup>2</sup>, С. В. Барышников<sup>2</sup>,

#### Е.В. Стукова <sup>1</sup><sup>⊠</sup>, И.В. Егорова <sup>2</sup>

<sup>1</sup>Амурский государственный университет, г. Благовещенск, Россия;

<sup>2</sup> Благовещенский государственный педагогический университет, г. Благовещенск, Россия

#### <sup>⊠</sup> lenast@bk.ru

Аннотация. В работе синтезированы нанокомпозиты на основе иодида диизопропиламмония (DIPAI) и наночастиц Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (размер наночастиц 100 нм) с варьированием объемной доли последнего (0,05; 0,10; 0,20). Исследованы температурные зависимости диэлектрической проницаемости и сигнала дифференциального термического анализа синтезированных соединений (в интервале 300 – 400 K) в режимах нагрева и охлаждения. Зарегистрированы также их инфракрасные спектры при комнатной температуре. Анализ измеренных температурных зависимостей указывает на изменение последовательности фазовых переходов в композитах по сравнению с чистым DIPAI. Совокупность полученных результатов позволяет сделать вывод, что в структуре нанокомпозита проявляется изменение водородных связей с участием аминогрупп, что может приводить к появлению сегнетоэлектрического состояния в DIPAI.

**Ключевые слова:** сегнетоэлектрик, диэлектрическая проницаемость, нанокомпозит, фазовый переход, DIPAI, оксид алюминия

Для цитирования: Сахненко А. В., Милинский А. Ю., Барышников С. В., Стукова Е. В., Егорова И. В. Диэлектрические и тепловые свойства нанокомпозитов на основе иодида диизопропиламмония и наночастиц оксида алюминия // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 19–28. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16302

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

#### Originalarticle

DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16302

## DIELECTRIC AND THERMAL PROPERTIES OF NANOCOMPOSITES BASED ON DIISOPROPYLAMMONIUM IODIDE AND ALUMINA NANOPARTICLES

A. V. Sakhnenko<sup>1</sup>, A. Yu. Milinskiy<sup>2</sup>, S. V. Baryshnikov<sup>2</sup>

E. V. Stukova <sup>1</sup><sup>™</sup>, I. V. Egorova <sup>2</sup>

<sup>1</sup> Amur State University, Blagoveshchensk, Russia;

<sup>2</sup> Blagoveshchensk State Pedagogical University, Blagoveshchensk, Russia

⊠ lenast@bk.ru

© Сахненко А. В., Милинский А. Ю., Барышников С. В., Стукова Е. В., Егорова И. В., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого. Abstract. In the paper, nanocomposites based on diisopropylammonium iodide (DIPAI.) and  $Al_2O_3$  nanoparticles (sized 100 nm) have been synthesized with varying a volume fraction of the latter (0.05, 0.10, 0.20). Temperature dependences of the permittivity and a signal of differential thermal analysis of the samples (in the range of 300 - 400 K) were studied in heating and cooling modes. Their infrared spectra were recorded at room temperature as well. An analysis of the measured temperature dependences indicated a change in the sequence of phase transitions in nanocomposites compared with the pure DIPAI. The totality of the results obtained allowed us to conclude that a change in hydrogen bonds with the participation of amino groups manifested itself in the nanocomposite structure took place. This can lead to the appearance of a ferroelectric state in the DIPAI.

Keywords: ferroelectric, permittivity, nanocomposite, phase transition, DIPAI, alumina

**For citation:** Sakhnenko A. V., Milinskiy A. Yu., Baryshnikov S. V., Stukova E. V., Egorova I. V., Dielectric and thermal properties of nanocomposites based on diisopropylammonium iodide and alumina nanoparticles, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 19–28. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16302

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

#### Введение

Сегнетоэлектрики, спонтанную поляризацию P<sub>s</sub> которых можно переключить внешним электрическим полем, исследуются уже более 100 лет [1]. За это время были открыты тысячи неорганических и органических материалов, обладающих спонтанной поляризацией. Однако практическое применение в основном получили неорганические оксидные перовскиты, в связи с их высокой стабильностью, большой диэлектрической проницаемостью и спонтанной поляризациией. Несмотря на это, сегодня ведется активный поиск органических сегнетоэлектриков, ввиду их низкой стоимости, простоты обработки, экологичности и биосовместимости. В качестве примеров такого успешного поиска можно привести кроконовую кислоту [2], хлорид и бромид диизопропиламмония [3, 4]. Эти вещества конкурируют с неорганическими перовскитными сегнетоэлектриками по значениям спонтанной поляризации и температуры Кюри. Относительно иодида диизопропиламмония (DIPAI), который является третьим представителем сегнетоэлектриков на основе диизопропиламина, в литературе имеются противоречивые сведения [5, 6]. В исследовании [5] были выращены кристаллы DIPAI, спонтанная поляризация которых равна примерно 33 мкКл·см<sup>-2</sup>. Однако авторы [6] при изучении синтезированных ими кристаллов DIPAI не выявили в них полярного состояния. В работе [7] было показано, что для перевода DIPAI в сегнетоэлектрическое состояние его необходимо нагреть выше температуры 423 К.

Известно, что одним из способов модификации свойств сегнетоэлектрических материалов является создание на их основе композитов [8]. Поскольку DIPAI представляет собой органический сегнетоэлектрик со сложной молекулярной структурой, добавление в него наночастиц оксида алюминия Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> может привести к взаимодействию на молекулярном уровне, способствующему закреплению поляризации молекул сегнетоэлектрика (это было показано, например, для триглицинсульфата [9]).

В настоящей статье приводятся результаты исследования диэлектрических и тепловых свойств нанокомпозитов  $(DIPAI)_{1-x}/(Al_2O_3)_x$ , полученных при смешивании порошка DIPAI с наночастицами оксида алюминия размером 100 нм. Проведено также сравнение с объемными образцами DIPAI.

#### Образцы и методика эксперимента

Кристаллы DIPAI обладают орторомбической неполярной симметрией с пространственной группой  $P2_12_12_1$  [5, 6]. При их нагревании выше комнатных температур в DIPAI возникают один или два фазовых перехода (в зависимости от технологии получения и температурной предыстории). В работе [5], в которой сообщалось о сегнетоэлектричестве

© Sakhnenko A. V., Milinskiy A. Yu., Baryshnikov S. V., Stukova E. V., Egorova I. V., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

в DIPAI, было показано, что при нагревании кристаллов DIPAI до 369 К формируется сегнетоэлектрическая моноклинная фаза с симметрией  $P2_1$ , стабильная до 415 К. Выше этой температуры структура DIPAI трансформируется в неполярную моноклинную фазу  $P2_1/m$ . При дальнейшем охлаждении от температуры свыше 415 К, в области около 407 К наблюдается переход в моноклинную сегнетоэлектрическую фазу, обладающую симметрией  $P2_1$ . Авторы другой работы [6] не обнаружили сегнетоэлектрической фазы в полученных ими кристаллах DIPAI. При 376 К в кристаллах DIPAI наблюдали переход из орторомбической фазы  $P2_12_12_1$  в моноклинную фазу  $P2_1/m$ .

В нашем эксперименте получение DIPAI (иодид диизопропиламмония  $[(изо-C_3H_7)_2NH_2]I)$  основывалось на взаимодействии эквимолярных количеств диизопропиламина (изо- $C_3H_7)_2NH$  (Sigma) и иодоводородной кислоты (57 %, AcrosOrganics) в водном растворе [8]. В общем виде реакция протекает по следующему уравнению:

 $(изо-C_3H_7)_2NH + HI = [(изо-C_3H_7)_2NH_2]I.$ 

При проведении синтеза 0,1 моль гидроиодида НІ растворяли в 10 мл дистиллированной воды. К полученному раствору медленно, при охлаждении добавляли 0,1 моль диизопропиламина. После испарения растворителя при комнатной температуре были получены крупные бесцветные прозрачные игольчатые кристаллы, которые перекристаллизовывали из горячего этанола. Кристаллы промывали диэтиловым эфиром и сушили в темном месте в эксикаторе над хлоридом кальция. Выход составил 68 %.

Образцы композитов (DIPAI)<sub>1-x</sub>/(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>x</sub> (x = 0.05; 0,10; 0,20; x -объемные доли) были получены с использованием порошков DIPAI (~10 мкм) и Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с размером частиц 100 нм. Композиты приготавливали путем тщательного перемешивания указанных порошков в агатовой ступке. Для исследования диэлектрических свойств полученный порошок прессовали в виде дисков размером Ø10 × 1,5 мм под давлением 7500 кг/см<sup>2</sup>.

Для измерения диэлектрических свойств (диэлектрической проницаемости  $\varepsilon$ ) использовали иммитансметр E7-25 с частотным диапазоном от 20 до 10<sup>6</sup> Гц. Перед измерениями для создания электродов на образец наносили серебряную пасту. Температура фиксировалась с точностью 0,1 К при помощи термометра TC-6621. Измерения проводили в температурном интервале от 300 до 440 К, в автоматическом режиме со скоростью 1 К/мин. Погрешность определения диэлектрической проницаемости исследуемых образцов не превышала 5 %. Измерения температурных зависимостей сигнала ДТА проводили на синхронном термоанализаторе Linsies STA PT 1600, производства США (максимальное разрешение – 0,3 мкВт). В нашем эксперименте скорость нагрева и охлаждения образцов составляла 1 К/мин.

Инфракрасные (ИК) спектры образцов DIPAI,  $Al_2O_3$  и композита (DIPAI)<sub>0,80</sub>/ $(Al_2O_3)_{0,20}$ в виде таблеток, запрессованных с КВг, регистрировали на интерференционном ИК-спектрометре с Фурье-преобразованием ФСМ-2202 (отечественного производства) в диапазоне 400 - 4000 см<sup>-1</sup>. Управление прибором и обработку спектров осуществляли по программе FSpec (версия 4.0.0.2 для Windows, ООО «Мониторинг», Россия).

#### Экспериментальные результаты и обсуждение

Полученный в данной работе образец DIPAI, согласно температурным зависимостям  $\varepsilon'$  и сигналу ДТА, обнаруживает один фазовый переход при нагревании и один при охлаждении (рис. 1). Это позволяет заключить, что сегнетоэлектрическая фаза не формируется, а переход происходит между двумя параэлектрическими фазами при температурах 376 и 360 К при нагреве и охлаждении. Значения температуры переходов согласуются с данными статьи [7]. На температурных зависимостях тангенса угла диэлектрических потерь tgδ имеются минимумы при 381 и 361 К в режимах нагрева и охлаждения соответственно. С увеличением частоты уменьшаются величины  $\varepsilon'(\omega)$  и tg $\delta(\omega)$ , что согласуется с данными, полученными для монокристаллов [6]. Дальнейшие исследования показали, что температурная предыстория не меняет последовательность фазовых переходов в DIPAI, в отличие от образцов, полученных в работе [7].

Для композитов (DIPAI)<sub>0,95</sub>/(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>0,05</sub> результаты исследования диэлектрической проницаемости и сигнала ДТА также указывают на наличие двух фазовых переходов (рис. 2). В режиме нагрева максимум сигнала DTA наблюдается при температуре 360 K, а при охлаждении – около 358 K.



Рис. 1. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости ε' и сигнала DTA (на вставке), полученные на частоте 10 кГц для образца DIPAI при нагреве (символы красного цвета) и охлаждении (синего цвета)



Рис. 2. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости є' и сигнала DTA (на вставке), полученные на частоте 10 кГц для образца композита (DIPAI)<sub>0.95</sub>/(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>0.05</sub> при нагреве (символы красного цвета) и охлаждении (синего цвета)

При увеличении содержания наночастиц  $Al_2O_3$  до 10%, по данным сигнала DTA и диэлектрической проницаемости  $\varepsilon'(T)$ , в режиме нагрева прослеживаются два фазовых перехода: при 362 и 376 К (рис. 3). Это соответствует формированию сегнетоэлектрической фазы, согласно данным работы [7]. В режиме охлаждения наблюдается один фазовый переход при 358 К.

В композите  $(DIPAI)_{0.80}/(Al_2O_3)_{0.20}$  также наблюдаются два фазовых перехода при нагревании: около 363 и 378 К; и один при охлаждении, при температуре примерно 358 К (рис. 4).

Оксид алюминия относится к линейным диэлектрикам, и частицы  $Al_2O_3$  не обладают дипольными моментами, которые могли бы индуцировать появление сегнетоэлектрической фазы в DIPAI. Поэтому единственным возможным механизмом взаимодействия наночастиц DIPAI и  $Al_2O_3$  является их взаимодействие на молекулярном уровне. Для проверки этого предположения были получены ИК-спектры чистого DIPAI и композита (DIPAI)<sub>0.80</sub>/( $Al_2O_3$ )<sub>0.20</sub>.



Рис. 3. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости є' и сигнала DTA (на вставке), полученные на частоте 10 кГц для образца композита (DIPAI)<sub>0,90</sub>/(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>0,10</sub> при нагреве (символы красного цвета) и охлаждении (синего цвета)



Рис. 4. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости є' и сигнала DTA (на вставке), полученные на частоте 10 кГц для образца композита (DIPAI)<sub>0,80</sub>/(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>0,20</sub> при нагреве (символы красного цвета) и охлаждении (синего цвета)

Супрамолекулярная структура галогенидов диизопропиламмония обусловлена водородными связями N-H…Hlg, где Hlg = Cl, Br, I. В ряду галогенид-ионов Cl<sup>-</sup>, Br<sup>-</sup>, I<sup>-</sup> расстояние H…Hlg увеличивается с соответствующим ростом атомного радиуса галогена. В кристалле DIPAI иодид-ионы I<sup>-</sup>, выполняя мостиковую роль, объединяют катионы диизопропиламмония. Фазовый переход, наблюдаемый при нагревании кристаллов DIPAI, сопровождается их сложной структурной перестройкой, которая обусловлена образованием оптических изомеров катионами DIPA, их перегруппировкой в кристалле, изменением упаковки цепей. Прочность водородных связей N-H…I в двух фазах существенно различна.

Расстояния N–H···I в кристалле DIPAI моноклинной сингонии (комнатная температура) составляют 2,81 Å (поперек цепей) и 2,67 Å (вдоль цепей), а в орторомбической сингонии (405 K) - 3,03 и 2,82 Å [9, 6]. Водородные связи N–H···I в DIPAI намного длиннее и, как следствие, лабильнее, чем в хлоридном и бромидном аналогах.

Полосы поглощения в ИК-спектрах соединений были нами идентифицированы в соответствии с данными работ [10, 11]. В ИК-спектре DIPAI валентным симметричным и асимметричным колебаниям связей С-Н структурного фрагмента С(СН<sub>3</sub>) соответствуют полосы поглощения при 2810,3, 2833,3 и 2967,7 см<sup>-1</sup>, деформационным симметричным и асимметричным колебаниям связей С-Н – полосы поглощения при 1379,6 и 1469,6 см<sup>-1</sup>. Валентные колебания связей N-Н проявляются группой полос поглощения при

3296,8, 3385,0, 3410,4, 3424,4, 3438,8, 3447,8 см<sup>-1</sup>.

Полосы при 1573,9 см<sup>-1</sup> (1579,1 см<sup>-1</sup>, плечо) и 1325,4 см<sup>-1</sup> обусловлены деформационными колебаниями связей N–H. В ИК-спектрах образцов DIPAI–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и DIPAI имеется полоса поглощения в области симметричных валентных колебаний структурного фрагмента CNC с максимумом при 1182,7 см<sup>-1</sup>.

Лабильность водородных связей в структуре DIPAI способствует их перегруппировке и образованию новых связей в композите (DIPAI)<sub>0,80</sub>/(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>0,20</sub>. В ИК-спектре оксида алюминия полоса поглощения при 3770–3730 см<sup>-1</sup> (рис. 5,*a*) соответствуют льюисовскому основному центру [12]. Значительное сглаживание и исчезновение полосы поглощения 3760,0 см<sup>-1</sup> в данной области спектра может свидетельствовать об образовании в системе DIPAI–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> водородных связей N–H···O–Al между атомами водорода NH<sub>2</sub>-групп и координационно-ненасыщенными атомами кислорода, являющимися основными центрами. Присутствие в оксиде алюминия кислотных льюисовских центров – атомов алюминия – предполагает возможность их участия в (Al···I)-взаимодействиях, которые приводят к значительному снижению интенсивности полос поглощения при 3566,8 и 3588,1 см<sup>-1</sup>. Взаимодействиям такого типа посвящены публикации [13, 14].

Частоты валентных колебаний  $NH_2 - и$  *i*-Pr-групп зависят от степени их участия в водородной связи. Образование водородных связей проявляется сдвигом полос, соответствующих v(N-H) и v(C-H) в сторону низких частот [10, 11]. В спектре DIPAI-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> полоса поглощения валентных колебаний N-H (3424,4 см<sup>-1</sup>) смещена в низкочастотную



Рис. 5. Спектры ИК-поглощения для образцов  $Al_2O_3$  (красная кривая) DIPAI (зеленая кривая) и композита (DIPAI)<sub>0,80</sub>/ $(Al_2O_3)_{0,20}$  (синяя кривая) в интервалах волновых чисел 4000–3100 см<sup>-1</sup> (*a*) и 1610–1560 см<sup>-1</sup> (*b*)

область спектра (3422,5 см<sup>-1</sup>). Кроме того, полоса поглощения деформационных колебаний (1573,9 см<sup>-1</sup>) смещена и проявляется при 1574,3 см<sup>-1</sup>, плечо при 1579,1 см<sup>-1</sup> не выражено, что указывает на подавление деформационных колебаний N–H связей (рис. 5,*b*). Это подтверждает предположение об упрочнении водородных связей, в образовании которых участвуют аминогруппы. В то же время не наблюдается смещения полосы поглощения валентных и деформационных колебаний (С–H)-связей *i*-Pr-групп.

Совокупность обсуждаемых результатов позволяет сделать вывод, что в структуре образца DIPAI-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> проявляется изменение водородных связей с участием аминогрупп, что может приводить к появлению сегнетоэлектрического состояния в DIPAI.

#### Заключение

Как было показано в статье [6], фазовый переход в кристаллах DIPAI обусловлен перестройкой катионной субструктуры, в которой ионы  $i-(C_3H_7)_2NH_2^+$  переориентируются примерно на 90° вдоль длинной оси и вращаются в орторомбическом направлении [100]. Одновременно эти ионы разделяются на два эквивалентных положения, связанных между собой как зеркальная плоскость. Это приводит к ориентации дипольных моментов иона  $i-(C_3H_7)_2NH_2^+$  вдоль одного из метастабильных направлений. Этот процесс изменяет упаковку цепей и вызывает деформацию анионной структуры.

DIPAI и DIPAB при комнатной температуре изоструктурны и имеют аналогичную кристаллическую упаковку. Более крупные ионы вызывают увеличение межатомных расстояний и увеличение объема элементарной ячейки, что, в свою очередь, влияет на силу взаимодействия водородных связей. Наряду с увеличением ионных радиусов наблюдается увеличение всех расстояний от донора до акцептора. В DIPAI происходит фазовый переход в неупорядоченное состояние  $P2_1/m$ , и фаза сдвинута примерно на 50 K в сторону более низких температур, по сравнению с DIPAB; это указывает на существенно более слабые связи N–H–I, по сравнению со связями N–H–Br.

Анализ всей совокупности полученных нами результатов позволяет сделать вывод, что в структуре образца DIPAI-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> проявляется изменение водородных связей N-H-I с участием аминогрупп, что может стабилизировать сегнетоэлектрическое состояние в соединении DIPAI.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Физика сегнетоэлектриков: современный взгляд. Под ред. Рабе К. М., Ана Ч. Г., Трискона Ж.-М. Пер. с англ. М.: Изд-во «Лаборатория знаний», 2020. 443 с.

2. Horiuchi S., Tokunaga Y., Giovannetti G., Picozzi S., Itoh H., Shimano R., Kumai R., Tokura Y. Above-room-temperature ferroelectricity in a single-component molecular crystal // Nature. 2010. Vol. 463. No. 7282. Pp. 789–792.

3. Fu D.-W., Zhang W., Cai H.-L., Ge J.-Z., Zhang Y., Xiong R.-G. Diisopropylammonium chloride: a ferroelectric organic salt with a high phase transition temperature and practical utilization level of spontaneous polarization // Advanced Materials. 2011. Vol. 23. No. 47. Pp. 5658–5662.

4. Fu D.-W., Cai H.-L., Liu Y., Zhang W., Zhang Y., Chen X., Giovannetti G., Capone M., Li J., Xiong R. Diisopropylammonium bromide is a high-temperature molecular ferroelectric crystal // Science. 2013. Vol. 339. No. 6118. Pp. 425–428.

5. Ravi K. S., Diptikanta S., Siva P., Hariharan N., Handady L.B., Tayur N. G. R., Suja E. Observation of ferroelectric phase and large spontaneous electric polarization in organic salt of diisopropylammonium iodide // Journal of Applied Physics. 2017. Vol. 121. No. 11. Pp. 114101–114105.

6. Piecha-Bisiorek A., Gagor A., Isakov D., Zieliński P., Gałązka M., Jakuba R. Phase sequence in disopropylammonium iodide: avoided ferroelectricity by the appearance of a reconstructed phase // Inorganic Chemistry Frontiers. 2017. Vol. 4. No. 3. Pp. 553–558.

7. Milinskiy A. Yu, Baryshnikov S. V., Egorova I. V, Nguyen H. T. Dielectric properties of ferroelectric diisopropylammonium iodide // Phase Transitions. 2019. Vol. 92. No. 4. Pp. 406–410.

8. Jiang C., Tong W.-Y., Lin H., Luo C., Peng H., Duan C.-G. Effect of counter anions on ferroelectric properties of diisopropylammonium-cation based molecular crystals // Physica Status Solidi. A. 2017. Vol. 214. No. 6. P. 1700029.

9. Cambridge Structural Database System, Version 5.43, 2021. https://www.ccdc.cam.ac.uk.

10. Smith B. C. Infrared spectral interpretation: A systematic approach. Florida, USA: Boca Raton: CRC Press, 1998. 288 p.

11. **Nakamoto K.** Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds. NewYork: J. Wiley&Sons, 1986. 484 p.

12. **Чукин Г. Д.** Строение оксида алюминия и катализаторов гидрообессеривания. Механизмы реакций. М.: Типография Паладин, ООО «Принта», 2010. 288 с.

13. Epstein L. M., Shubina E. S. New types of hydrogen bonding in organometallic chemistry // Coordination Chemistry Reviews. 2002. Vol. 231. No. 1–2. Pp. 165–181.

14. Brammer L. Metals and hydrogen bonds // Dalton Transactions. 2003. No. 16. Pp. 3145-3157.

#### REFERENCES

1. Rabe K. M., Ahn C. H., Triscone J.-M., Physics of ferroelectrics: A modern perspective, Springer Science & Business Media, Florida, USA, 2007.

2. Horiuchi S., Tokunaga Y., Giovannetti G., et al., Above-room-temperature ferroelectricity in a single-component molecular crystal, Nature. 463 (7282) (2010) 789–792.

3. Fu D.-W., Zhang W., Cai H.-L., et al., Diisopropylammonium chloride: a ferroelectric organic salt with a high phase transition temperature and practical utilization level of spontaneous polarization, Adv. Mater. 23 (47) (2011) 5658–5662.

4. Fu D.-W., Cai H.-L., Liu Y., et al., Diisopropylammonium bromide is a high-temperature molecular ferroelectric crystal, Science. 339 (6118) (2013) 425–428.

5. Ravi K. S., Diptikanta S., Siva P., et al., Observation of ferroelectric phase and large spontaneous electric polarization in organic salt of diisopropylammonium iodide, J. Appl. Phys. 121 (11) (2017) 114101–114105.

6. **Piecha-Bisiorek A., Gągor A., Isakov D., et al.,** Phase sequence in diisopropylammonium iodide: avoided ferroelectricity by the appearance of a reconstructed phase, Inorg. Chem. Front. 4 (3) (2017) 553–558.

7. Milinskiy A. Yu, Baryshnikov S. V., Egorova I. V, Nguyen H. T., Dielectric properties of ferroelectric diisopropylammonium iodide, Ph. Transit. 92 (4) (2019) 406–410.

8. Jiang C., Tong W.-Y., Lin H., et al., Effect of counter anions on ferroelectric properties of diisopropylammonium-cation based molecular crystals, Phys. Status Solidi. A. 214 (6) (2017) 1700029.

9. Cambridge Structural Database System, Version 5.43, 2021. https://www.ccdc.cam.ac.uk.

10. Smith B. C., Infrared spectral interpretation: A systematic approach, CRC Press, Boca Raton, Florida, USA, 1998.

11. Nakamoto K., Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds, J. Wiley & Sons, New York, 1986.

12. Chukin G. D., Stroyeniye oksida alyuminiya i katalizatorov gidroobesserivaniya. Mekhanizmy reaktsiy [The structure of alumina and hydrodesulfurization catalysts. The reaction mechanisms], "Paladin" Printing House, "Printa" Ltd., Moscow, 2010 (in Russian).

13. Epstein L. M., Shubina E. S., New types of hydrogen bonding in organometallic chemistry, Coord. Chem. Rev. 231 (1–2) (2002) 165–181.

14. Brammer L., Metals and hydrogen bonds, Dalton Trans. (16) (2003) 3145-3157.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**САХНЕНКО Анна Владиславовна** — аспирантка кафедры физики Амурского государственного университета, г. Благовещенск, Россия.

675027, Россия, Амурская область, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21 anna\_izbickaya@mail.ru ORCID: 0009-0005-7943-1229 **МИЛИНСКИЙ Алексей Юрьевич** — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физического и математического образования Благовещенского государственного педагогического университета, г. Благовещенск, Россия.

675000, Россия, Амурская область, г. Благовещенск, ул. Ленина, 104 a.milinskiy@mail.ru ORCID: 0000-0001-7525-4396

БАРЫШНИКОВ Сергей Васильевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физического и математического образования Благовещенского государственного педагогического университета, г. Благовещенск, Россия.

675000, Россия, Амурская область, г. Благовещенск, ул. Ленина, 104 svbar2003@list.ru ORCID:0000-0002-3362-8975

СТУКОВА Елена Владимировна — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Амурского государственного университета, г. Благовещенск, Россия. 675027, Россия, Амурская область, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21 lenast@bk.ru ORCID:0000-0002-7981-7456

ЕГОРОВА Ирина Владимировна — доктор химических наук, профессор, заведующая кафедрой химии Благовещенского государственного педагогического университета, г. Благовещенск, Россия. 675000, Россия, Амурская область, г. Благовещенск, ул. Ленина, 104 bgpu.chim.egorova@mail.ru ORCID: 0000-0001-8799-608X

#### THE AUTHORS

#### SAKHNENKO Anna V.

Amur State University 21 Ignatievskoe Ave., Blagoveshchensk, 675027, Russia anna\_izbickaya@mail.ru ORCID: 0009-0005-7943-1229

MILINSKIY Alexey Yu.

Blagoveshchensk State Pedagogical University 104 Lenin St., Blagoveshchensk, 675000, Russia a.milinskiy@mail.ru ORCID: 0000-0001-7525-4396

#### **BARYSHNIKOV Sergey V.**

Blagoveschensk State Pedagogical University 104 Lenin St., Blagoveshchensk, 675000, Russia svbar2003@list.ru ORCID: 0000-0002-3362-8975

STUKOVA Elena V. Amur State University 21 Ignatievskoe Ave., Blagoveshchensk, 675027, Russia lenast@bk.ru ORCID: 0000-0002-7981-7456 EGOROVA Irina V. Blagoveshchensk State Pedagogical University 104 Lenin St., Blagoveshchensk, 675000, Russia bgpu.chim.egorova@mail.ru ORCID: 0000-0001-8799-608X

Статья поступила в редакцию 13.06.2023. Одобрена после рецензирования 06.07.2023. Принята 06.07.2023. Received 13.06.2023. Approved after reviewing 06.07.2023. Accepted 06.07.2023.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2023

Научная статья УДК 538.958 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16303

## ВЛИЯНИЕ СТИМУЛИРОВАННОГО МЕЖЗОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ТЕРАГЕРЦОВУЮ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ В СЛОЯХ АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ *n*-ТИПА

Н. Ю. Харин<sup>1</sup> <sup>⊠</sup>, В. Ю. Паневин<sup>1</sup>, А. Д. Петрук<sup>2</sup>, М. Я. Винниченко<sup>1</sup>, И. А. Норватов<sup>1</sup>, В. В. Федоров<sup>3</sup>, Д. А. Фирсов<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

#### Санкт-Петербург, Россия;

<sup>2</sup> Университет штата Нью-Йорк в Стоуни Брук, г. Стоуни Брук, США; <sup>3</sup> Академический университет им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия

#### <sup>III</sup> kharin.nikita66@gmail.com

Аннотация. В работе исследована возможность увеличения интенсивности терагерцового (ТГц) излучения при оптической межзонной накачке в эпитаксиальном слое GaAs, легированном мелкими донорами, за счет реализации условий для стимулированного межзонного излучения ближнего инфракрасного (ИК) диапазона, интенсивно опустошающего основное состояние донора. Получены спектры фотолюминесценции в ближнем ИК и ТГц диапазонах в до- и постпороговом режимах генерации излучения ближнего ИК диапазона. В ТГц спектрах наблюдается изменение характера зависимости интенсивности излучения от накачки, связанное с уменьшением излучательного времени жизни электронов на примесном уровне.

**Ключевые слова:** фотолюминесценция, терагерцовое излучение, примесный переход, эпитаксиальный слой, объемный полупроводник, стимулированное излучение

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-22-00105).

Для цитирования: Харин Н. Ю., Паневин В. Ю., Петрук А. Д., Винниченко М. Я., Норватов И. А., Федоров В. В., Фирсов Д. А. Влияние стимулированного межзонного излучения на терагерцовую фотолюминесценцию в слоях арсенида галлия *n*-типа // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 29–38. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16303

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.16303

## INFLUENCE OF STIMULATED INTERBAND EMISSION ON TERAHERTZ PHOTOLUMINESCENCE IN *n*-TYPE GALLIUM ARSENIDE LAYERS

N. Yu. Kharin<sup>1</sup> , V. Yu. Panevin<sup>1</sup>, A. D. Petruk<sup>2</sup>, M. Ya. Vinnichenko<sup>1</sup>,

I. A. Norvatov<sup>1</sup>, V. V. Fedorov<sup>3</sup>, D. A. Firsov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

<sup>2</sup> State University of New York at Stony Brook, Stony Brook, USA;

<sup>3</sup> Alferov University of RAS, St. Petersburg, Russia

<sup>™</sup> kharin.nikita66@gmail.com

© Харин Н. Ю., Паневин В. Ю., Петрук А. Д., Винниченко М. Я., Норватов И. А., Федоров В. В., Фирсов Д. А., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

**Abstract.** In the paper, a possibility of increasing the terahertz (THz) radiation intensity under optical interband pumping in the epitaxial GaAs layer doped with shallow donors has been studied. An increase in the intensity of THz radiation was achieved by implementation of conditions for stimulated interband radiation in the near-IR range, which depopulated intensively the donor ground state. The photoluminescence spectra of the samples were measured by Fourier spectrometer. Photoluminescence spectra were recorded in the near-IR and THz ranges in the sub- and post-threshold working conditions of radiation generation in the near-IR range. In the THz spectra, a change in behavior of the dependence of the radiation intensity on pumping was observed. The change was due to a decrease in the radiative lifetime of electrons at the impurity level.

**Keywords:** photoluminescence, terahertz radiation, impurity transition, epitaxial layer, bulk semiconductor, stimulated emission

**Funding:** The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 22-22-00105).

**For citation:** Kharin N. Yu., Panevin V. Yu., Petruk A. D., Vinnichenko M. Ya., Norvatov I. A., Fedorov V. V., Firsov D. A., Influence of stimulated interband emission on terahertz photoluminescence in *n*-type gallium arsenide layers, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 29–38. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16303

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

#### Введение

Создание оптоэлектронных устройств, работающих в терагерцовом (ТГц) диапазоне, является предметом исследования множества научных групп. Подобный интерес обусловлен широкой областью применения ТГц излучения. Спектры поглощения различных органических веществ обладают характерными особенностями в ТГц диапазоне [1], что позволяет осуществлять мониторинг состояния атмосферы, анализ газов, контроль скрытого содержимого закрытых пакетов. Это излучение может применяться в системах безопасности, биологии, медицине [2]. Наблюдение спектральных линий в ТГц спектральном диапазоне с помощью гетеродинных методов изучения излучения Вселенной может помочь в понимании состава и происхождения Солнечной системы [3].

Весьма совершенным компактным и достаточно мощным полупроводниковым источником ТГц излучения в настоящее время является квантово-каскадный лазер [4 – 6], однако его применение ограничено сложностью технологического процесса и высокой стоимостью производства. В связи с этим проведение фундаментальных исследований, направленных на разработку новых физических основ генерации ТГц излучения в полупроводниках, выступает актуальной задачей.

Перспективный подход к разработке полупроводниковых источников ТГц излучения — это использование оптических переходов носителей заряда с участием примесных уровней, поскольку энергия связи мелких примесей в полупроводниках лежит в ТГц диапазоне. Источники ТГц излучения с межзонной оптической накачкой на примесных переходах носителей заряда в легированных объемных полупроводниках впервые были продемонстрированы на примерах *n*-GaAs и *p*-Ge [7], а также *n*-GaN [8]. Если рассматривать донорные полупроводники, то излучение ТГц диапазона, исследованное в работе [8], было связано с переходами неравновесных электронов из зоны проводимости и возбужденных донорных состояний на основное состояние донора при межзонной оптической накачке. Опустошение основного донорного состояния, конечного для ТГц переходов электронов, происходило за счет межзонной излучательной электрон-дырочной рекомбинации, протекающей спонтанным образом между основным донорным состоянием и валентной зоной. ТГц излучение такой природы было также обнаружено и исследовано в структурах с квантовыми ямами GaAs/AlGaAs [9].

© Kharin N. Yu., Panevin V. Yu., Petruk A. D., Vinnichenko M. Ya., Norvatov I. A., Fedorov V. V., Firsov D. A., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

В описанном механизме генерации ТГц излучения, его интенсивность определяется скоростью опустошения конечного состояния для ТГц переходов электронов.

Таким образом, увеличение скорости опустошения основного примесного состояния должно привести к увеличению интенсивности ТГц излучения. Интенсивное опустошение основного примесного состояния может быть реализовано с помощью стимулированного межзонного излучения в ближнем инфракрасном (ИК) диапазоне на переходах из основного состояния донора в валентную зону. Условия для возникновения такого стимулированного излучения должны быть реализованы в исследуемой нами структуре.

Использование подобного механизма эффективного опустошения конечного состояния для оптических переходов было продемонстрировано ранее для увеличения интенсивности примесной ТГц фотолюминесценции в лазерных наноструктурах с легированными квантовыми ямами GaAs/AlGaAs [10, 11], а также в диодных структурах с вертикально связанными квантовыми точками InGaAs/AlGaAs [12], где возникновение стимулированного межзонного излучения между основными уровнями электронов и дырок в квантовых точках использовалось для увеличения интенсивности излучения среднего ИК диапазона, связанного с внутризонными переходами носителей заряда между уровнями квантовых точек.

В настоящей работе исследуется влияние стимулированного излучения в ближнем ИК диапазоне на характеристики ТГц излучения, возникающего при примесных переходах неравновесных электронов в эпитаксиальных слоях *n*-GaAs при межзонной оптической накачке.

#### Методы и материалы

Основной объект исследования — это структура с эпитаксиальным слоем арсенида галлия GaAs, легированным донорами кремния.

Образец был получен методом молекулярно-пучковой эпитаксии на полуизолирующей подложке GaAs, при этом концентрация легирующей донорной примеси кремния составляла  $1,0\cdot10^{16}$  см<sup>-3</sup>. Температура роста составляла 620 - 630 °C, отношение потоков галлия и мышьяка (Ga : As) при росте эпитаксиальных слоев составляло 1 : 3. Эпитаксиальный слой находился в волноводе для ближнего ИК излучения, созданном слоями твердого раствора Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As с градиентом состава *x*. Толщина эпитаксиального слоя составляла 0,52 мкм. Для создания условий возникновения стимулированного излучения ближнего ИК диапазона использовался высокодобротный резонатор полного внутреннего отражения, получаемый с помощью скалывания граней образца, предварительно сошлифованного до толщины около 100 мкм.

В экспериментах использовалось три вида образцов: с резонатором полного внутреннего отражения (размер  $0,4 \times 0,4$  мм), без резонатора (геометрический размер  $5 \times 5$  мм) и подложка с удаленными эпитаксиальными слоями.

Образцы припаивались индием к медной пластине, которая была прижата к медному держателю оптического криостата замкнутого цикла Janis PTCM-4-7, позволяющего плавно изменять температуру образца в диапазоне от 4 до 320 К.

Для исследования спектров фотолюминесценции в ближнем ИК диапазоне использовался решеточный монохроматор Horiba Jobin Yvon FHR 640 с голографической дифракционной решеткой 1200 штр/мм. В качестве детектора излучения использовалась ПЗС-матрица. Неравновесные носители заряда возбуждались излучением полупроводникового лазера (Nd : YAG с удвоением частоты в нелинейном кристалле LiIO<sub>3</sub>, длина волны излучения – 532 нм).

Измерения спектров фотолюминесценции при невысоком уровне возбуждения проводились с помощью лазера, работающего в непрерывном режиме. Для возбуждения стимулированного излучения ближнего ИК диапазона использовался импульсный лазер большой мощности с той же длиной волны излучения. Частота следования импульсов составляла 8 кГц, длительность импульса – 250 нс.

Те же самые лазеры использовались для изучения фотолюминесценции в ТГц диапазоне. Спектры регистрировались с помощью вакуумного Фурье-спектрометра Bruker Vertex 80v, работающего в режиме step-scan. Детектором служил кремниевый болометр, охлаждаемый жидким гелием. На входе болометра находился фильтр из полиэтилена, покрытого алмазной пылью, с пропусканием в диапазоне энергий кванта от 6 до 100 мэВ. В спектрометре использовался светоделитель из лавсана, входное окно спектрометра было выполнено из белого полиэтилена; оно дополнительно экранировалось с помощью черного полиэтилена для предотвращения попадания излучения накачки в измерительную часть установки. С помощью lock-in усилителя SR 830 сигнал с болометра извлекался из шумов, затем поступал на компьютер для обработки интерферограммы и получения спектра.

#### Результаты и их обсуждение

На рис. 1 приведены спектры фотолюминесценции структуры с резонатором и подложки в ближнем ИК диапазоне для разных интенсивностей оптической накачки при T = 4 К. Использовался непрерывный режим накачки — уровень возбуждения не достигал порога возникновения в структуре с резонатором стимулированного излучения ближнего ИК диапазона.



Рис. 1. Спектры фотолюминесценции в ближнем ИК диапазоне при разных интенсивностях оптической накачки для структуры с резонатором (*a*) и для подложки (*b*). Температура измерения *T* = 4 K

На спектрах фотолюминесценции эпитаксиального слоя (см. рис. 1,*a*) наблюдается несколько особенностей. Отметим, что в спектрах структур с резонатором и спектрах подложки не наблюдается оптических переходов при энергии кванта, равной ширине запрещенной зоны GaAs (1,519 эВ для T = 4 K), вследствие низкой температуры и возбуждения экситонов. Линия излучения при энергии 1,514 эВ, обозначенная на спектрах как "Х", соответствует энергии свободного экситона в GaAs [13] и отчетливо видна на всех спектрах фотолюминесценции. Пик при энергии 1,509 эВ, обозначенный как "D<sub>si</sub>", отсутствует в спектрах фотолюминесценции подложки (см. рис. 1,*b*), поэтому мы можем утверждать, что этот пик связан с эпитаксиальным слоем и соответствует переходам с участием донора кремния. В пользу данной интерпретации также говорит значительное уширение экситонной линии в спектрах фотолюминесценции эпитаксиального слоя, по сравнению с аналогичной линией в спектрах подложки. В спектрах фотолюминесценции эпитаксиального слоя, притаксиального слоя экситонная и инией в спектрах подложки. В спектрах отолюминесценции эпитаксиального коло сроят слоя экситонная и испектрах подложки. В спектрах отолюминесценции эпитаксиального слоя, по сравнению с аналогичной линией в спектрах подложки. В спектрах отолюминесценции эпитаксиального слоя уровня присутствующих ионизированных примесей [14].

Спектральное расстояние между пиком  $D_{si}$  и шириной запрещенной зоны GaAs составляет около 10 мэВ, что согласуется со спектром наблюдаемого нами ТГц излучения (см. далее). Пик излучения при энергии 1,493 эВ, обозначенный " $A_c$ ", по-видимому, связан с неконтролируемой акцепторной примесью углерода, возникающей в процессе роста GaAs-содержащих полупроводниковых структур и подложек [15].

Линия излучения при энергии 1,485 эВ, обозначенная как "А<sub>si</sub>", вероятно, связана с включением амфотерной легирующей примеси кремния в нашей структуре в качестве акцептора. Найденная из спектров фотолюминесценции энергия связи акцепторной примеси кремния в нашей структуре равна 35 мэВ, что согласуется с литературными данными [16]. Данная линия отсутствует на спектрах подложки (см. рис. 1,*b*), что также говорит о происхождении данной особенности в спектре: она связана с легированием. Стоит отметить, что с ростом уровня накачки данная линия сливается с высокоинтенсивным углеродным пиком и практически неразличима в спектрах при интенсивном возбуждении. Этот факт, вероятно, связан с низкой концентрацией акцепторов кремния в нашей структуре. Слабо различимые особенности в спектрах в диапазоне от 1,450 до 1,460 эВ относятся к фононным репликам, связанным с акцепторами углерода в нашей структуре [17].

На рис 2,*а* приведены данные по фотолюминесценции в ближнем ИК диапазоне, полученные при высоких уровнях импульсной оптической накачки. При достижении некоторого порога интенсивности накачки линия излучения D<sub>si</sub>, связанная с донорной примесью кремния в нашей структуре, начинает преобладать по интенсивности над остальными линиями излучения.



Рис. 2. Спектры фотолюминесценции в ближнем ИК диапазоне при разных мощностях оптической накачки для структуры с резонатором (*a*), а также их обработка: зависимости интегральной интенсивности отдельных пиков от интенсивности оптической накачки (*b*). Температура измерения *T* = 4 К

Мы аппроксимировали экспериментальный спектр с тремя особенностями (см. рис. 2,*a*) тремя лоренцевскими контурами. Площади отдельных контуров соответствовали интегральной интенсивности излучения каждого пика. Таким образом были получены зависимости интегрального сигнала фотолюминесценции в ближнем ИК-диапазоне для отдельных пиков от интенсивности накачки (приведены на рис. 2,*b*). Пороговый характер зависимости для линии излучения  $D_{si}$ , связанной с донорами кремния в нашей структуре, указывает на начало генерации стимулированного излучения. Пороговая интенсивность оптического возбуждения, определенная из полученной зависимости, составляет около 100 Вт/см<sup>2</sup>.

На рис. 3 приведены спектры ТГц фотолюминесценции для образцов с резонатором и без него. В спектрах, полученных для образца с эпитаксиальным слоем, но без резонатора (см. рис. 3,a), наблюдается широкая линия излучения в области энергий кванта от 15 до 30 мэВ. Такую же линию излучения мы наблюдаем в спектре подложки (кривая черного цвета на рис. 3,a). Таким образом, эта линия может быть связана с внутрицентровыми переходами между состояниями акцепторной примеси углерода или с переходами с основного акцепторного состояния в валентную зону. Данная линия присутствует как в спектрах излучения эпитаксиальных слоев, так и в спектре подложки. Энергия данных переходов согласуется с литературными данными [16]. Полоса излучения в диапазоне энергий кванта 5 – 13 мэВ не наблюдается в спектре подложки и, следовательно, эта полоса может быть связана с наличием донорной примеси кремния в эпитаксиальных слоях арсенида галлия. При увеличении мощности оптической накачки интенсивности линий, связанных как с донорами, так и с акцепторами, монотонно растут.

На спектрах ТГц фотолюминесценции образца с резонатором (см. рис. 3,*b*) видно, что возгорание стимулированного излучения ближнего ИК диапазона при интенсивностях накачки, превышающих 100 Вт/см<sup>2</sup>, приводит к изменению характера зависимости интенсивности ТГц фотолюминесценции от уровня накачки. Спектры на рис. 3,*b* можно



Рис. 3. Спектры фотолюминесценции в ТГц диапазоне для подложки (кривая черного цвета) и для структуры без резонатора (цветные кривые) при разных интенсивностях оптической накачки (*a*), спектры для структуры с резонатором также при разных интенсивностях оптической накачки (*b*). *На вставке*: зависимости интегральной интенсивности спектральных полос излучения, связанных с донорами и акцепторами, от уровня накачки. Температура измерения *T* = 4 К

аппроксимировать двумя лоренцевскими контурами. На вставке к рис. 3,*b* приведены полученные нами зависимости интегральной интенсивности излучения этих двух полос от интенсивности оптической накачки. Видно, что интенсивность полосы излучения в диапазоне энергий кванта от 5 до 13 мэВ, связанной с донорами, продолжает расти после порога стимулированного излучения, тогда как полоса от 15 до 30 мэВ, связанная с акцепторами, демонстрирует поведение, близкое к насыщению.

Подобные зависимости интенсивности излучения, связанного с переходами с участием донорных и акцепторных состояний, подтверждают тезис о влиянии стимулированного излучения ближнего ИК диапазона на интенсивность оптических переходов в ТГц области спектра. В наших экспериментах стимулированное излучение ближнего ИК диапазона возникает с участием донорных состояний. При достижении порога стимулированного излучения донорные состояния начинают более интенсивно опустошаться, поскольку излучательное время жизни электронов на основном донорном уровне уменьшается. При этом переходы электронов из зоны проводимости на уровень донора с испусканием ТГц фотонов идут более интенсивно и начинают преобладать над ТГц излучением, связанным с акцепторными примесями. После начала стимулированного излучения в ближнем ИК диапазоне ТГц излучение, связанное с переходами электронов с основного акцепторного уровня в валентную зону, испытывает насыщение. Это можно объяснить стабилизацией концентрации дырок в валентной зоне с ростом уровня накачки после начала стимулированного излучения в ближнем ИК диапазоне.

#### Заключение

Проведенное исследование показало, что стимулированное излучение ближнего ИК диапазона, возникающее при оптической межзонной накачке эпитаксиального слоя *n*-GaAs, помещенного в оптический волновод и резонатор полного внутреннего отражения, существенно влияет на интенсивность оптических переходов электронов из зоны проводимости на состояния примеси, увеличивая интенсивность терагерцового излучения, связанного с примесными переходами.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Federici J. F., Schulkin B., Huang F., Gary D., Barat R. Oliveira F., Zimdars D. THz imaging and sensing for security applications – explosives, weapons and drugs // Semiconductor Science and Technology. 2005. Vol. 20. No. 7. Pp. 266–280.

2. Perenzoni M., Paul D. J. (Eds.) Physics and applications of terahertz radiation. Series: Springer Series in Optical Science. Vol. 173. Dordrecht (Netherlands): Springer, 2014.

3. **Kulesa C.** Terahertz spectroscopy for astronomy: From comets to cosmology // IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology. 2011. Vol. 1. No. 1. Pp. 232–240.

4. Khalatpour A., Paulsen A. K., Deimert C., Wasilewski Z. R., Hu Q. High-power portable terahertz laser systems // Nature Photonics. 2021. Vol. 15. No. 1. Pp. 16–20.

5. Lu Q. Y., Bandyopadhyay N., Slivken S., Bai Y., Razeghi M. Room temperature terahertz quantum cascade laser sources with 215  $\mu$ W output power through epilayer-down mounting // Applied Physics Letters. 2013. Vol. 103. No. 1. P. 011101.

6. Belkin M. A., Capasso F. New frontiers in quantum cascade lasers: high performance room temperature terahertz sources // Physica Scripta. 2015. Vol. 90. No. 11. P. 118002.

7. Андрианов А. В., Захарьин А. О., Иванов Ю. Л., Кипа М. С. Примесная терагерцовая люминесценция при межзонном фотовозбуждении полупроводников // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 91. № 2. С. 102–105.

8. Захарьин А. О., Бобылев А. В., Андрианов А. В. Терагерцовое излучение при межзонном фотовозбуждении слоев GaN // Физика и техника полупроводников. 2012. Vol. 46. No. 9. Pp. 1158–1162.

9. Фирсов Д. А., Воробьев Л. Е., Паневин В. Ю., Софронов А. Н., Балагула Р. М., Махов И. С., Козлов Д. В., Васильев А. П. Терагерцовое излучение, связанное с примесными переходами электронов в квантовых ямах при оптической и электрической накачке // Физика и техника полупроводников. 2015. Т. 49. № 1. С. 30–34.

10. Makhov I. S., Panevin V. Y., Sofronov A. N., Firsov D. A., Vorobjev L. E., Vinnichenko M. Y., Vasil'ev A. P., Maleev N. A. The effect of stimulated interband emission on the impurity-assisted farinfrared photoluminescence in GaAs/AlGaAs quantum wells // Superlattices and Microstructures. 2017. Vol. 112. December. Pp. 79–85.

11. Vinnichenko M. Ya., Makhov I. S., Panevin V. Yu., Sofronov A. N., Firsov D. A., Vorobjev L. E., Sadofev Yu. G., Vasiliev A. P. Terahertz radiation related to the electron relaxation after interband optical pumping in doped quantum wells // Proceedings of The 41st International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz); 25–30 September 2016. Copenhagen, Denmark (2016) No. 16502800.

12. Воробьев Л. Е., Фирсов Д. А., Шалыгин В. А., Тулупенко В. Н., Шерняков Ю. М., Леденцов Н. Н., Устинов В. М., Алфёров Ж. И. Спонтанное излучение дальнего ИК диапазона при переходах носителей заряда между уровнями квантовых точек // Письма в ЖЭТФ. 1998. Т. 67. № 4. С. 256-260.

13. Nam S. B., Reynolds D. C., Litton C. W., Almassy R. J., Collins T. C., Wolfe C. M. Freeexciton energy spectrum in GaAs // Physical Review B. 1976. Vol. 13. No. 2. Pp. 761–767.

14. **Ploog K., Fischer A., Künzel H.** The use of Si and Be impurities for novel periodic doping structures in GaAs grown by molecular beam epitaxy // Journal of The Electrochemical Society. 1981. Vol. 128, No. 2. Pp. 400–410.

15. Dingle R., Weisbuch C., Störmer H. L., Morkoc H., Cho A. Y. Characterization of high purity GaAs grown by molecular beam epitaxy // Applied Physics Letters. 1982. Vol. 40. No. 6. Pp. 507–510.

16. **Kisker D. W., Tews H., Rehm W.** Luminescence study of C, Zn, Si, and Ge acceptors in GaAs // Journal of Applied Physics. 1983. Vol. 54. No. 3. Pp. 1332–1336.

17. Huang Q., Ulbrich R. G. Carbon-acceptor-induced cascade scattering by acoustic phonons above the  $(e, A^0)$  threshold in GaAs // Physical Review B. 2001. Vol. 64. No. 11. P. 113205.

#### REFERENCES

1. Federici J. F., Schulkin B., Huang F., et al., THz imaging and sensing for urity applications – explosives, weapons and drugs, Semicond. Sci. Technol. 20 (7) (2005) 266–280.

2. Perenzoni M., Paul D. J. (Eds.), Physics and applications of terahertz radiation, Series: Springer Series in Optical Science. Vol. 173. Springer, Dordrecht (Netherlands), 2014.

3. Kulesa C., Terahertz spectroscopy for astronomy: From comets to cosmology, IEEE Trans. Terahertz Sci. 1 (1) (2011) 232–240.

4. Khalatpour A., Paulsen A. K., Deimert C., et al., High-power portable terahertz laser systems, Nat. Photonics. 15 (1) (2021) 16–20.

5. Lu Q. Y., Bandyopadhyay N., Slivken S., et al., Room temperature terahertz quantum cascade laser sources with 215  $\mu$ W output power through epilayer-down mounting, Appl. Phys. Lett. 103 (1) (2013) 011101.

6. Belkin M. A., Capasso F., New frontiers in quantum cascade lasers: high performance room temperature terahertz sources, Phys. Scr. 90 (11) (2015) 118002.

7. Andrianov A. V., Zakhar'in A. O., Ivanov Y. L., Kipa M. S., Terahertz impurity luminescence under the interband photoexcitation of semiconductors, JETP Lett. 91 (2) (2010) 96–99.

8. Zakhar'in A. O., Bobylev A. V., Andrianov A. V., Teraherz emission upon the interband excitation of GaN layers, Semicond. 46 (9) (2912) 1135–1139.

9. Firsov D. A., Vorobjev L. E., Panevin V. Y., et al., Terahertz radiation associated with the impurity electron transition in quantum wells upon optical and electrical pumping, Semicond. 49 (1) (2015) 28–32.

10. Makhov I. S., Panevin V. Y., Sofronov A. N., et al., The effect of stimulated interband emission on the impurity-assisted far-infrared photoluminescence in GaAs/AlGaAs quantum wells, Superlattices Microstr. 112 (December) (2017) 79–85.

11. Vinnichenko M. Ya., Makhov I. S., Panevin V. Yu., et al., Terahertz radiation related to the electron relaxation after interband optical pumping in doped quantum wells, Proc. of 41st Int. Conf. on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz), 25–30 Sept. 2016, Copenhagen, Denmark (2016) 16502800.

12. Vorob'ev L. E., Firsov D. A., Shalygin V. A., et al., Spontaneous far-IR emission accompanying transitions of charge carriers between levels of quantum dots, JETP Lett. 67 (4) (1998) 275–279.

13. Nam S. B., Reynolds D. C., Litton C. W., et al., Free-exciton energy spectrum in GaAs, Phys. Rev. B. 13 (2) (1976) 761–767.

14. Ploog K., Fischer A., Künzel H., The use of Si and Be impurities for novel periodic doping structures in GaAs grown by molecular beam epitaxy, J. Electrochem. Soc. 128 (2) (1981) 400–410.

15. Dingle R., Weisbuch C., Sturmer H. L., et al., Characterization of high purity GaAs grown by molecular beam epitaxy, Appl. Phys. Lett. 40 (6) (1982) 507–510.

16. Kisker D. W., Tews H., Rehm W., Luminescence study of C, Zn, Si, and Ge acceptors in GaAs, J. Appl. Phys. 54 (3) (1983) 1332–1336.

17. Huang Q., Ulbrich R. G., Carbon-acceptor-induced cascade scattering by acoustic phonons above the  $(e, A^0)$  threshold in GaAs, Phys. Rev. B. 64 (11) (2001) 113205.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ХАРИН Никита Юрьевич** — инженер Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 kharin.nikita66@gmail.com ORCID: 0000-0002-2220-881X

ПАНЕВИН Вадим Юрьевич — старший преподаватель Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 pvyu@rphf.spbstu.ru ORCID: 0000-0003-4424-1722

**ПЕТРУК Антон Дмитриевич** — *PhD-студент Университета штата Нью-Йорк в Стоуни Брук, г. Стоуни Брук, США.* USA, 100 Nicolls Rd, Stony Brook, NY 11794-2350 ianton583@gmail.com ORCID: 0000-0003-1824-9173
ВИННИЧЕНКО Максим Яковлевич — кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 mvin@spbstu.ru ORCID: 0000-0002-6118-0098

**НОРВАТОВ Илья Алексеевич** — стажер-исследователь Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 norv2@mail.ru ORCID: 0000-0002-0048-7512

ФЕДОРОВ Владимир Викторович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Санкт-Петербургского академического университета РАН им. Ж. И. Алфёрова, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3 burunduk.uk@gmail.com ORCID: 0000-0001-5547-9387

ФИРСОВ Дмитрий Анатольевич — 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 dmfir@rphf.spbstu.ru ORCID: 0000-0003-3947-4994

#### THE AUTHORS

#### KHARIN Nikita Yu.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia kharin.nikita66@gmail.com ORCID: 0000-0002-2220-881X

PANEVIN Vadim Yu.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia pvyu@rphf.spbstu.ru ORCID: 0000-0003-4424-1722

PETRUK Anton D. State University of New York at Stony Brook 100 Nicolls Rd, Stony Brook, New York, 11794-2350, USA ianton583@gmail.com ORCID: 0000-0003-1824-9173

VINNICHENKO Maxim Ya. Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia mvin@spbstu.ru ORCID: 0000-0002-6118-0098 NORVATOV Ilya A. Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia norv2@mail.ru ORCID: 0000-0002-0048-7512

FEDOROV Vladimir V. Alferov University of RAS 8/3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia burunduk.uk@gmail.com ORCID: 0000-0001-5547-9387

FIRSOV Dmitry A. Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia dmfir@rphf.spbstu.ru ORCID: 0000-0003-3947-4994

Статья поступила в редакцию 06.07.2023. Одобрена после рецензирования 12.07.2023. Принята 12.07.2023. Received 06.07.2023. Approved after reviewing 12.07.2023. Accepted 12.07.2023.

# Математическое моделирование физических процессов

Научная статья УДК 534.16 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16304

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВЫНУЖДЕННЫХ, ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ И АВТОКОЛЕБАНИЙ ПРИ ОГРАНИЧЕННОМ ВОЗБУЖДЕНИИ И ЗАПАЗДЫВАНИЯХ

### А. А. Алифов 🖂

Институт машиноведения им. А. А. Благонравова РАН, Москва, Россия

<sup>⊠</sup> alishir@mail.ru

Аннотация. На основе динамической модели фрикционной автоколебательной системы рассмотрено влияние запаздываний в упругости и вызывающего автоколебания трения на смешанные вынужденные, параметрические и автоколебания при взаимодействии колебательной системы с источником энергии. Решение нелинейных дифференциальных уравнений движения колебательной системы и источника энергии построено с использованием метода прямой линеаризации. Последний отличается от известных методов анализа нелинейных систем множеством преимуществ, в том числе простотой применения. На основе критериев Рауса – Гурвица получены условия устойчивости для анализа стационарных движений. Чтобы получить информацию о влиянии запаздываний на режимы колебаний, проведены расчеты. Установлено, что это влияние очень существенное. Устойчивость стационарных колебаний зависит как от характеристики источника энергии, так и от величины запаздывания, появляется слабая или очень слабая устойчивость.

**Ключевые слова:** ограниченное возбуждение, колебания, запаздывание, критерии Рауса – Гурвица, прямая линеаризация

Для цитирования: Алифов А. А. Взаимодействие вынужденных, параметрических и автоколебаний при ограниченном возбуждении и запаздываниях // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 39–48. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16304

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.16304

# THE INTERACTION OF MIXED FORCED, PARAMETRIC AND SELF-EXCITED OSCILLATIONS AT LIMITED EXCITATION AND DELAYS

#### A. A. Alifov ⊠

Mechanical Engineering Research Institute of the RAS, Moscow, Russia

#### <sup>III</sup> alishir@mail.ru

**Abstract.** On the basis of a dynamic model of a frictional self-oscillating system, the influence of delays in elasticity and friction causing self-oscillations on mixed forced, parametric and self-oscillations during the interaction of an oscillating system with an energy source has been considered. The solution of nonlinear differential equations of motion of an oscillatory system and an energy source was constructed using the method of direct linearization. The latter differs from the known methods for the analysis of nonlinear systems by many advantages,

© Алифов А. А., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

including ease of use. Based on the Routh - Hurwitz criteria, the stability conditions for the analysis of stationary motions were obtained. Calculations were carried out to obtain information on the influence of delays on the oscillation modes. This influence was established to be very significant. The stability of stationary oscillations depends both on the characteristics of the energy source and on the magnitude of the delay; a weak or very weak stability appears.

Keywords: limited excitation, oscillations, delay, Routh – Hurwitz criteria, direct linearization

For citation: Alifov A. A., The interaction of mixed forced, parametric and self-excited oscillations at limited excitation and delays, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 39–48. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16304

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

#### Введение

Обострение глобальных экологических проблем (изменение климата, кислотные осадки, загрязнение воздуха и воды, накопление ядерных отходов, последствия их действия на окружающую среду) вызывает большую тревогу у широкой общественности во всем мире. Как отмечается во многих публикациях на эту тему, рациональным решением можно считать энергосбережение. Энергетика является основой развития базовых отраслей промышленности, ее темпы развития выше темпов развития других отраслей, и в то же время она является одним из больших источников неблагоприятного воздействия на окружающую среду и человека. Неконтролируемый рост энергопотребления, высокая техногенная нагрузка на окружающую среду и их влияние на климат может привести к глобальному экологическому кризису. Поэтому ни одна научная проблема не привлекает такого пристального внимания, как проблема изменения климата. Уменьшение энергопотребления, переход на эффективное использование энергии и всемерной ее экономии составляют главные задачи человечества.

В решение связанных с этим задач может вносить некоторый вклад теория взаимодействия источника энергии и колебательной системы. Хотя эффект был обнаружен А. Зоммерфельдом в 1902 г., его последовательное теоретическое обоснование было проведено В. О. Кононенко лишь в 50-х годах прошлого столетия. Результаты его исследований подытожены в известной в мире монографии [1, 2], которые привели к возникновению в теории колебаний нового направления. Во множестве публикаций исследователей во всем мире, в том числе в работах [3 – 5] и других исследованиях, нашло отражение дальнейшее развитие этой теории. В работе [6] показана связь проблем экологии с уровнем потребляемой энергии, метрологией, точностью моделей расчета систем и обработки деталей.

В работах [7 - 23] и др. рассмотрены различные вопросы, связанные с явлением гистерезиса (запаздывания). Необходимость его учета возникает во многих задачах, например в различных отраслях техники (транспортировка, электроника, автоматическое регулирование, радиотехника, цветная металлургия, процессы массообмена, производство бумаги и стекла и др.), в оптике, управлении, биологии (исследования крови, мозга и т. п.) и др.

При циклически изменяющихся напряжениях с максимальной амплитудой и существенно ниже предела упругости наблюдается динамический гистерезис, обусловленный неупругостью или вязкоупругостью. В механических системах запаздывание обуславливается внутренним трением в материалах, несовершенством их упругих свойств и др. Оно оказывает большое влияние на процесс регулирования и устойчивость системы, при этом его наличие может быть как вредным, так и полезным. Запаздывание может привести к возникновению колебаний в следящих системах, ленточных транспортерах, регуляторах, прокатных станах и др.

Целью работы является анализ влияния запаздываний в упругости и вызывающего автоколебания трения на смешанные вынужденные, параметрические и автоколебания при взаимодействии колебательной системы с источником энергии.

© Alifov A. A., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

#### Модель и уравнения

Рассмотрим модель фрикционной автоколебательной системы (рис. 1). Она хорошо описывает автоколебания, возникающие во многих объектах машиностроения из-за трения (в тормозах, текстильном оборудовании, металлорежущих станках и т. п.), широко используется для их анализа (см. например, работы [24 - 26]). Тело с массой *m* лежит на ленте, приводимой в движение двигателем, имеющим моментную характеристику  $M(\dot{\phi})$ , где  $\dot{\phi}$  – скорость вращения ротора двигателя.

Возникающая между телом и лентой сила трения T(U) зависит от относительной скорости  $U = V - \dot{x}$ , где  $V = r_0 \dot{\phi}$  ( $r_0 = \text{const} - \text{радиус точки приложения силы трения) и может$ обуславливать его автоколебания. Сила <math>T(U) в реальных условиях (она наблюдалась также в космических экспериментах [27]) широко распространена в виде

$$T(U) = R(\operatorname{sgn} U - \alpha_1 U + \alpha_2 U^3),$$

где R — нормальная сила реакции;  $\alpha_1 = \text{const}$ ,  $\alpha_3 = \text{const} - \text{положительные величины}$ ; sgnU=1 при U>0, sgnU=-1 при U<0; в состоянии покоя (U=0) имеет место ограничение  $-R \le T(0) \le R$ .

Нелинейную функцию *T*(*U*) на основе метода прямой линеаризации (см. работы [28 - 31]) можно заменить функцией



Рис. 1. Модель автоколебательной системы: тело с массой *m* лежит на ленте, приводимой в движение двигателем, имеющим моментную характеристику  $M(\dot{\phi}); \dot{\phi}$  – скорость вращения ротора двигателя, c – коэффициент жесткости пружины, T – сила трения и  $r_0$  – радиус точки ее приложения

где коэффициенты линеаризации 
$$B_T$$
,  $k_T$  определяются выражениями  
 $B_T = -\alpha_1 u + \alpha_3 u^3 + 3\alpha_3 N_2 u a^2 p^2$ ,  
 $k_T = \alpha_1 - 3\alpha_3 u^2 - \alpha_3 \overline{N}_3 \upsilon^2$ ,  
 $N_2 = (2r+1)/(2r+3)$ ,  
 $\overline{N}_3 = (2r+3)/(2r+5)$ ,  
 $a = \max |x|$ ,

 $T_* = R(\operatorname{sgn} U + B_T + k_T \dot{x}),$ 

 $\upsilon = \max |\dot{x}|.$ 

Интервал выбора параметра точности линеаризации *r* не ограничен, но достаточен выбор в пределах 0 – 2.

С учетом действия на тело внешней вынуждающей силы  $\lambda \sin v_1 t$ , параметрического воздействия ( $b\cos vt$ )x, запаздываний  $\tau = \text{const}$  и  $\Delta = \text{const}$ , математической моделью системы являются нелинейные дифференциальные уравнения

$$m\ddot{x} + k_0\dot{x} + c_0x + c_\tau x_\tau = T(U_\Delta) - \lambda \sin v_1 t - bx \cos v t,$$

$$I\ddot{\phi} = M(\dot{\phi}) - r_0 T(U),$$
(2)

где  $k_0 = \text{const}, c_0 = \text{const} - \text{соответственно коэффициенты демпфирования и жесткости;} I - суммарный момент инерции вращающихся частей;$ 

$$c_{\tau} = \text{const}, \ U_{\Delta} = r_0 \dot{\varphi} - \dot{x}_{\Delta}, \ \dot{x}_{\Delta} = \dot{x}(t - \Delta), \ x_{\tau} = x(t - \tau).$$

Уравнения (2) с учетом вида функции (1) принимают вид

$$m\ddot{x} + k_0\dot{x} + cx = -c_{\tau}x_{\tau} + R\left(\operatorname{sgn}U_{\Delta} + B_T + k_T\dot{x}_{\Delta}\right) + \lambda \sin v_1 t - bx \cos v t,$$
(3)  
$$I\ddot{\varphi} = M(\dot{\varphi}) - r_0 R(\operatorname{sgn}U_{\Delta} + B_T + k_T\dot{x}_{\Delta}).$$

41

(1)

#### Решение дифференциальных уравнений

В работе [28] рассмотрено следующее, общего вида нелинейное уравнение с нелинейными функциями  $\overline{F}(\dot{x})$  и f(x), линеаризованными по методу прямой линеаризации:

$$\ddot{x} + \overline{F}(\dot{x}) + \overline{f}(x) = H(t, x). \tag{4}$$

С использованием замены переменных  $x = \upsilon p^{-1} \cos \psi$ ,  $\dot{x} = -\upsilon \sin \psi$ ,  $\psi = pt + \xi$ ,  $\upsilon = \max |\dot{x}|$  получены уравнения стандартной формы для определения нестационарных значений  $\upsilon$  и  $\xi$ :

где

$$\frac{d\upsilon}{dt} = -\frac{k\upsilon}{2} - H_s(\upsilon,\xi), \quad \frac{d\xi}{dt} = \frac{\omega^2 - p^2}{2p} - \frac{1}{\upsilon}H_c(\upsilon,\xi), \tag{5}$$

$$H_{s}(\upsilon,\xi) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} H(\cdots) \sin \psi \, d\psi, \ H_{c}(\upsilon,\xi) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} H(\cdots) \cos \psi \, d\psi.$$

Используя уравнения (5), получим из уравнений (3), с учетом выражений

$$\upsilon = ap, \ p = \nu/2, \ \dot{x}_{\Delta} = -\upsilon \sin(\psi - p\Delta), \ x_{\tau} = \upsilon v^{-1} \cos(\psi - \nu\tau)$$

следующие уравнения (для двух случаев), чтобы определить нестационарные значения a,  $\xi$ , u: a)  $u \ge ap$ 

$$\frac{da}{dt} = -\frac{1}{4pm} (2aA + 2\lambda\cos\xi - ab\sin 2\xi),$$
  
$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{4pma} (2aE + 2\lambda\sin\xi + ab\cos 2\xi), \quad \frac{du}{dt} = \frac{r_0}{I} \Big[ M (u/r) - r_0 R (1 + B_T) \Big]; \quad (6a)$$

b) *u* < *ap* 

$$\frac{da}{dt} = -\frac{1}{4pm} \left( 2aA - \frac{8R}{\pi ap} \sqrt{a^2 p^2 - u^2} + 2\lambda \cos \xi - ab \sin 2\xi \right),$$

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{4pma} \left( 2aE + 2\lambda \sin \xi + ab \cos 2\xi \right),$$

$$\frac{du}{dt} = \frac{r_0}{I} \left[ M \left( u/r \right) - r_0 R \left( 1 + B_T \right) - \frac{r_0 R}{\pi} (3\pi - 2\psi_*) \right],$$
(6b)
$$\frac{du}{dt} = p(k_0 - qk_T \cos p\Delta) - c_T \sin p\tau, E = m(\omega_0^2 - p^2) + c_T \cos p\tau - pqk_T \sin p\Delta,$$

$$\omega_0^2 = c_0/m, \ \psi_* = 2\pi - \arcsin(u/ap).$$

При выводе уравнений (6b) использован прием, описанный в работе [3], и при усреднении происходит замена  $V = r_0 \dot{\phi}$  на  $u = r_0 \Omega$ . Условия  $\dot{a} = 0$ ,  $\xi = 0$ ,  $\dot{u} = 0$  в уравнениях (6a) и (6b) дают уравнения для стационарных

условия u = 0,  $\zeta = 0$ , u = 0 в уравнениях (оа) и (оо) дают уравнения для стационарных движений.

В случае  $u \ge ap$  (а) имеем следующие соотношения для амплитуды и фазы:

$$(a^{2}D - 2\lambda^{2})^{2} - 4\lambda^{2}(\lambda^{2} + 2bGa^{2}) = 0, \text{ tg}\xi = L(baL - \lambda)/aA,$$
(7)  

$$G = b + 2E, D = 4A^{2} + G^{2} - 2bG, L = \left[\lambda \pm \sqrt{\lambda^{2} + 2ba^{2}(b + 2E)}\right]/2ab,$$
(7)

а в случае u < ap (b) амплитуда определяется приближенной формулой  $ap \approx u$ .

Условие  $\dot{u} = 0$  позволяет определить стационарные значения скорости u из уравнения  $M(u/r_0) - S(u) = 0,$ 

где выражение S(u) представляет нагрузку на источник энергии и имеет вид: a)  $u \ge ap \ S(u) = r_0 R(1 + B_T),$ 

b)  $u < ap \ S(u) = r_0 R [(1 - B_T) + \pi^{-1} (3\pi - 2\psi_*)].$ С учетом приближенного равенства  $ap \approx u$  выражение S(u) упрощается в случае u < ap(b).

#### Условия устойчивости стационарных колебаний

Составив уравнения в вариациях для случаев (6а), (6b) и используя критерии Рауса – Гурвица, получим следующие условия устойчивости:

$$D_{1} > 0, D_{3} > 0, D_{1}D_{2} - D_{3} > 0,$$
(8)

где  $D_1 = -(b_{11} + b_{22} + b_{33}), D_2 = b_{11}b_{33} + b_{11}b_{22} + b_{22}b_{33} - b_{23}b_{32} - b_{12}b_{21} - b_{13}b_{31},$  $D_3 = b_{11}b_{23}b_{32} + b_{12}b_{21}b_{33} - b_{11}b_{22}b_{33} - b_{12}b_{23}b_{31} - b_{13}b_{21}b_{32}.$ 

Имеют место следующие коэффициенты в случае скоростей  $u \ge ap$  (a):

$$b_{11} = \frac{r_0}{I} \Big[ Q + r_0 R \Big( \alpha_1 - 3\alpha_3 u^2 - 3\alpha_3 N_2 a^2 p^2 \Big) \Big], \ b_{12} = -6N_2 \alpha_3 R u a p^2 r_0^2 I^{-1}, \ b_{13} = 0,$$
  

$$b_{21} = -\frac{3}{m} \alpha_3 R u a \cos p\Delta, \ b_{22} = \frac{1}{4pm} \Big[ 2 \big( c_\tau \sin p\tau + pRk_\tau \cos p\Delta \big) + b \sin 2\xi \Big],$$
  

$$b_{23} = \frac{1}{2pm} \big( \lambda \sin \xi + ba \cos 2\xi \big), \ b_{31} = \frac{3}{m} \alpha_3 R u \sin p\Delta,$$
  

$$b_{32} = \frac{1}{2pma^2} \Big( 2\overline{N}_3 \alpha_3 R a^3 p^3 \sin p\Delta - \sin \xi \Big), \ b_{33} = \frac{1}{2pma} \big( \lambda \cos \xi - ab \sin 2\xi \big),$$
  

$$Q = \frac{d}{dv} M \big( u/r \big).$$

где ( du

 $b_{\gamma}$ 

В случае скоростей u < ap (b) изменяются лишь коэффициенты

$$b_{11} = \frac{r_0}{I} \left[ Q + r_0 R(\alpha_1 - 3\alpha_3 u^2 - 3\alpha_3 N_2 a^2 p^2) - \frac{2r_0 R}{\pi \sqrt{a^2 p^2 - u^2}} \right],$$
  

$$b_{12} = -\frac{2Rr_0^2}{I} \left[ 3N_2 \alpha_3 uap^2 + \frac{u}{\pi a \sqrt{a^2 p^2 - u^2}} \right],$$
  

$$b_{21} = -\frac{auR}{m} \left[ 3\alpha_3 \cos p\Delta - \frac{2}{\pi a^2 p^2 \sqrt{a^2 p^2 - u^2}} \right],$$
  

$$c_2 = \frac{1}{4pm} \left[ 2(c_\tau \sin p\tau + pRk_T \cos p\Delta) + b \sin 2\xi \right] - \frac{2Ru^2}{\pi ma^2 p^2 \sqrt{a^2 p^2 - u^2}},$$

а другие – те же, что и для скоростей  $u \ge ap$  (a).

#### Расчетные результаты

Чтобы получить информацию о влиянии запаздываний на динамику системы, были проведены расчеты при следующих значениях параметров:  $\omega = 1c^{-1}$ ,  $m = 1 \text{ кгс} \cdot c^2 \cdot cm^{-1}$ ,  $b = 0.07 \text{ кгс} \cdot cm^{-1}$ ,  $k = 0.02 \text{ кгс} \cdot cm^{-1}$ ,  $c_{\tau} = 0.05 \text{ кгс} \cdot cm^{-1}$ , R = 0.5 кгс,  $\alpha_1 = 0.84 \text{ c} \cdot cm^{-1}$ ,  $\alpha_3 = 0.18 \text{ c}^3 \cdot cm^{-3}$ ,  $r_0 = 1 \text{ см}$ ,  $I = 1 \text{ кгс} \cdot c \cdot cm^2$ .



Рис. 2. Зависимость амплитуды от частоты при отсутствии запаздываний ( $\Delta = 0, \tau = 0$ ). Использовано значение параметра точности линеаризации r = 1,5



 $\pi/2$  (кривые 1),  $\pi$  (кривые 2),  $3\pi/2$  (кривые 3)

Для скорости использовано значение u = 1,2 см·с<sup>-1</sup>, а величины запаздываний  $p\tau$  и  $p\Delta$  выбраны из интервала (0,  $3\pi/2$ ).

Амплитудно-частотные кривые a(p), представленные на рис. 2 и 3, построены с использованием параметра точности r = 1,5 ( $N_3 = 3/4$  для  $k_T$ ). Полученные данные, как показал анализ, полностью совпадают с результатами, которые можно получить, если использовать асимптотический метод усреднения Боголюбова – Митропольского [32]. Результаты, приведенные на рис. 2, где  $a_a$  означает амплитуду автоколебаний, представляют случай отсутствия запаздываний ( $\Delta = 0, \tau = 0$ ) и даны для сравнения.

Колебания с соответствующими амплитудами устойчивы в пределах заштрихованных секторов для крутизны характеристики источника энергии  $Q = dM(u/r_0)/du$ . Эти секторы должны быть указаны на графике нагрузки S(u) на источник энергии, но для краткости показаны на амплитудных кривых. В пределах наполненных черным цветом секторов присутствует слабая устойчивость, т. е. условие (или условия) устойчивости (8) выполняются в виде 0,000X > 0, где  $X \le 9$ . Следует также отметить, что на ряде участков кривых имеется еще более слабая устойчивость в виде 0,0000Y > 0, где  $Y \le 9$ . Такая слабая или очень слабая устойчивость наблюдается при всех значениях запаздываний, хотя показана лишь для  $p\Delta = \pi/2$ .

#### Заключение

В настоящей работе рассмотрена динамика фрикционной автоколебательной системы с источником энергии ограниченной мощности при наличии вынуждающей силы и параметрического воздействия, запаздываний в упругости и трения, вызывающего автоколебания. Для получения информации о влиянии этих запаздываний на динамические характеристики смешанных вынужденных, параметрических и автоколебаний были проведены расчеты на основе выведенных уравнений стационарных движений. Полученные графические результаты наглядно показывают данное влияние на динамику колебаний, оно очень существенное. С ним также связана нагрузка, соответственно динамика и расход энергии источника. Это влияние приводит к ряду важных выводов:

происходит сдвиг амплитудных кривых в амплитудно-частотной плоскости;

амплитудные кривые весьма значительно изменяют форму, приобретая вид, свойственный нелинейной упругости (мягкой, жесткой);

устойчивость стационарных колебаний зависит как от характеристики источника энергии, так и от величины запаздывания, появляется слабая или очень слабая устойчивость колебаний.

Полученные результаты позволяют планировать дальнейшие исследования. Использованный в работе подход применим для анализа различных колебательных процессов. Полученные в этом направлении данные могут служить инструментом для расчета реальных объектов на практике для оптимального выбора их параметров и характеристик источников энергии, минимизации энергопотребления и вредного воздействия на природу.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кононенко В. О. Колебательные системы с ограниченным возбуждением. М.: Наука, 1964. 236 с.

2. Kononenko V. O. Vibrating systems with a limited power-supply. London: Iliffe, 1969. 236 p.

3. Alifov A. A., Frolov K. V. Interaction of nonlinear oscillatory systems with energy sources. New York: Taylor & Francis Group, 1990. 352 p.

4. **Manevich A. I.** An oscillator-rotator system: Vibrational maintenance of rotation, stationary synchronous regimes, stability, vibration mitigation // Journal of Sound and Vibration. 2018. Vol. 437. 22 December. Pp. 223–241.

5. Cveticanin L., Zukovic M., Cveticanin D. Non-ideal source and harvesting // Acta Mechanica. 2017. Vol. 228. No. 10. Pp. 3369–3379.

6. Alifov A. A. About calculation of self-oscillatory system delayed and limited excitation // Proceedings of the International Scientific and Technical Conference "Measurement and Quality: Problems, Prospects"; November 21–23, 2018, AzTU, Baku, Azerbaijan. Pp. 289–293.

7. Saha A., Wahi P. An analytical study of time-delayed control of friction-induced vibrations in a system with a dynamic friction model // International Journal of Non-Linear Mechanics. 2014. Vol. 63. July. Pp. 60–70.

8. Третьякова Т. В., Вильдеман В. Э. Пространственно-временная неоднородность процессов неупругого деформирования металлов. М.: Физматлит, 2017. 120 с.

9. **Корнет М. Е., Шишкина А. В.** О непараметрической идентификации безынерционных систем с запаздыванием // Современные технологии. Системный анализ. Моделирование. 2018. № 3 (59). С. 16–23.

10. Тхан В. З., Дементьев Ю. Н., Гончаров В. И. Повышение точности расчета систем автоматического управления с запаздыванием // Программные продукты и системы. 2018. Т. 31. № 3. С. 521–526.

11. Петров Н. Н. Простое групповое преследование с фазовыми ограничениями и запаздыванием информации // Известия Российской академии наук. Теория и системы управления. 2018. № 1. С. 39-44.

12. Кащенко С. А. Динамика логистического уравнения с запаздыванием и диффузией и с быстро осциллирующими по пространственной переменной коэффициентами // Доклады Академии наук. 2018. Т. 482. № 5. С. 508–512.

13. Павловская А. Т., Хартовский В. Е. Управление линейными системами с запаздыванием нейтрального типа посредством регуляторов с обратной связью динамической структуры // Известия Российской академии наук. Теория и системы управления. 2014. № 3. С. 3–18.

14. Goncharov V., Berchuk D., Than V., Alexandrov I. Parametric identification of control objects to provide the improved accuracy on start or end point of timing response // Applied Mechanics and Materials. 2017. Vol. 865. Chapter 6. Pp. 525–531.

15. **Метельский А. В., Хартовский В. Е.** Синтез регуляторов успокоения решения вполне регулярных дифференциально-алгебраических систем с запаздыванием // Дифференциальные уравнения. 2017. Т. 53. № 4. С. 547–558.

16. Sykora H. T., Sadeghpour M., Ge J. I., Bachrathy D., Orosz G. On the moment dynamics of stochastically delayed linear control systems // International Journal of Robust and Nonlinear Control. 2020. Vol. 30. No. 18. Pp. 8074–8097.

17. Otto A., Just W., Radons G. Nonlinear dynamics of delay systems: an overview // Philosophical Transactions of the Royal Society A. 2019. Vol. 377. No. 2153. Article ID: 20180389.

18. Daza A., Wagemakers A., Sanjuán M. A. F. Wada property in systems with delay // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2017. Vol. 43. February. Pp. 220–226.

19. Keller A. A. Time-delay systems with application to mechanical engineering process dynamics and control // International Journal of Mathematics and Computers in Simulation. 2018. Vol. 12. June. Pp. 64–73.

20. Liu C., Han M., Gong Z., Teo K. L. Robust parameter estimation for constrained time-delay systems with inexact measurements // Journal of Industrial and Management Optimization. 2021. Vol. 17. No. 1. Pp. 317–337.

21. Ramachandran P., Ram Y. M. Stability boundaries of mechanical controlled system with time delay // Mechanical Systems and Signal Processing. 2012. Vol. 27. February. Pp. 523–533.

22. Coccolo M., Zhu B., Sanjuán M. A. F., Sanz-Serna J. M. Bogdanov – Takens resonance in time-delayed systems // Nonlinear Dynamics. 2018. Vol. 91. No. 3. Pp. 1939–1947.

23. Araujo J. M., Bettega J., Dantas N. J. B., Dórea C. E. T., Richiedei D., Tamellin I. Vibration control of a two-link flexible robot arm with time delay through the robust receptance method // Applied Sciences. 2021. Vol. 11. No. 21. P. 9907.

24. Алифов А. А. Смешанные вынужденные, параметрические и автоколебания при неидеальном источнике энергии и запаздывающих силах // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. 2021. Т. 29. № 5. С. 739–750.

25. Челомей В. Н. (предс.). Вибрации в технике: Справочник. В 6 тт. Т. 5. Колебания нелинейных механических систем. Под ред. И. И. Блехмана. М.: Машиностроение, 1979. 351 с.

26. Климов Д. М. Об одном виде автоколебаний в системе с сухим трением // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. 2003. № 3. С. 6–12.

27. Фролов К. В. Избранные труды. В 2 тт. Т. 1. Вибрация и техника. М.: Наука, 2007. 351 с.

28. **Броновец М. А., Журавлёв В. Ф.** Об автоколебаниях в системах измерения сил трения // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. 2012. № 3. С. 3–11.

29. Алифов А. А. Методы прямой линеаризации для расчета нелинейных систем. Москва – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2015. 74 с.

30. Алифов А. А., Фарзалиев М. Г., Джафаров Э. Н. Расчет методом прямой линеаризации автоколебательной системы с источником энергии // Вестник машиностроения. 2018. № 1. С. 30–32.

31. Alifov A. A. Calculating mixed forced and self-oscillations for delayed elastic constraint and a limited power energy source // Journal of Machinery Manufacture and Reliability. 2020. Vol. 49. No. 2. Pp. 105–109.

32. Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М.: Наука, 1974. 408 с.

#### REFERENCES

1. Kononenko V. O., Vibrating systems with a limited power-supply, Nauka, Moscow, 1964 (in Russian).

2. Kononenko V. O., Vibrating systems with limited power-supply, Iliffe, London, 1969.

3. Alifov A. A., Frolov K. V., Interaction of nonlinear oscillatory systems with energy sources, Hemisphere Pub. Corp. Taylor & Francis Group, New York, 1990.

4. **Manevich A. I.,** An oscillator-rotator system: Vibrational maintenance of rotation, stationary synchronous regimes, stability, vibration mitigation, J. Sound Vib. 437 (22 Decem.) (2018) 223–241.

5. Cveticanin L., Zukovic M., Cveticanin D., Non-ideal source and energy harvesting, Acta Mech. 228 (10) (2017) 3369–3379.

6. Alifov A. A., About calculation of self-oscillatory system delayed and limited excitation, Proc. Int. Sci. Techn. Conf. "Measurement and Quality: Problems, Prospects", Nov. 21–23, 2018, AzTU, Baku, Azerbaijan (2018) 289–293.

7. Saha A., Wahi P., An analytical study of time-delayed control of friction-induced vibrations in a system with a dynamic friction model, Int. J. Non-Linear Mech. 63 (July) (2014) 60–70.

8. Tretyakova T. V., Wildemann V. E., Prostranstvenno-vremennaya neodnorodnost protsessov neuprugogo deformirovaniya metallov [Spatial-temporal inhomogeneity of the processes of inelastic deformation of metals], Fizmatlit Publishing, Moscow, 2017 (in Russian).

9. Kornet M. E., Shishkina A. V., About non-parametric identification of infinitely fast systems with delay, Modern technologies. System analysis. Modeling. (3(59)) (2018) 16–23 (in Russian).

10. Than V. Z., Dement'ev Ju. N., Goncharov V. I., Improving the accuracy calculation of time delay automatic control, Software & Systems. (3(31)) (2018) 521–526 (in Russian).

11. **Petrov N. N.,** Simple group pursuit subject to phase constraints and data delay, J. Comput. Syst. Sci. 57 (1) (2018) 37–42.

12. **Kashchenko S. A.,** Dynamics of a delay logistic equation with diffusion and coefficients rapidly oscillating in a space variable, Doklady Mathematics. 98 (2) (2018) 522–525.

13. **Pavlovskaya A. T., Khartovskii V. E.,** Control of neutral delay linear systems using feedback with dynamic structure, J. Comput. Syst. Sci. 53 (3) (2014) 305–319.

14. Goncharov V., Berchuk D., Than V., Alexandrov I., Parametric identification of control objects to provide the improved accuracy on start or end point of timing response, Appl. Mech. Mater. 865 (Ch. 6) (2017) 525–531.

15. Metel'skiĭ A. V., Khartovskii V. E., Synthesis of damping controllers for the solution of completely regular differential-algebraic delay systems, Differ. Equ. 53 (4) (2017) 539–550.

16. Sykora H.T., Sadeghpour M., Ge J.I., et al., On the moment dynamics of stochastically delayed linear control systems, Int. J. Robust Nonlinear Control. 30 (18) (2020) 8074–8097.

17. Otto A., Just W., Radons G., Nonlinear dynamics of delay systems: an overview, Phil. Trans. R. Soc. A. 377 (2153) (2019) 20180389.

18. Daza A., Wagemakers A., Sanjuán M. A. F., Wada property in systems with delay, Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat. 43 (Febr.) (2017) 220–226.

19. Keller A. A., Time-delay systems with application to mechanical engineering process dynamics and control, Int. J. Math. Comput. Simul. 12 (June) (2018) 64–73.

20. Liu C., Han M., Gong Z., Teo K. L, Robust parameter estimation for constrained time-delay systems with inexact measurements, J. Ind. Manag. Optim. 17 (1) (2021) 317–337.

21. Ramachandran P., Ram Y. M., Stability boundaries of mechanical controlled system with time delay, Mech. Syst. Signal Process. 27 (Febr.) (2012) 523–533.

22. Coccolo M., Zhu B., Sanjuán M. A. F., Sanz-Serna J. M., Bogdanov – Takens resonance in time-delayed systems, Nonlinear Dyn. 91 (3) (2018) 1939–1947.

23. Araujo J. M., Bettega J., Dantas N. J. B., et al., Vibration control of a two-link flexible robot arm with time delay through the robust receptance method, Appl. Sci. 11 (21) (2021) 9907.

24. Alifov A. A., Mixed forced, parametric, and self-oscillations with nonideal energy source and lagging forces, Izvestiya VUZ. Applied Nonlinear Dynamics. 29 (5) (2021) 739–750 (in Russian).

25. **Chelomey V. N.** (chairman), Vibratsii v technike: spravochnik [Vibrations in machinery: Handbook], in 6 Vols., Vol. 5, Edited by Blekhman I. I., Publishing House of Mechanical Engineering, Moscow, 1979 (in Russian).

26. Klimov D. M., Ob odnom vide avtokolebaniy v sisteme s sukhim treniyem [On one type of self-excited vibrations in a system with dry friction], Mechanics of Solids. (3) (2003) 6-12 (in Russian).

27. **Frolov K. V.,** Izbrannyye trudy v 2 tt, t. 1. Vibratsiya i tekhnika [Selected works in 2 Vols., Vol. 1. Vibration and technology]. Nauka Publishing, Moscow, 2007 (in Russian).

28. Bronovets M. A., Zhuravlev V. F., On self-excited vibrations in friction force measurement systems, Mechanics of Solids. 47 (3) (2012) 261–268.

29. Alifov A. A., Metody pryamoy linearizatsii dlya rascheta nelineynykh system [Methods of direct linearization for calculation of nonlinear systems], Research Center "Regular and Chaotic Dynamics", Moscow, 2015 (in Russian).

30. Alifov A. A., Farzaliev M. G, Jafarov E. N., Dynamics of a self-oscillatory system with an energy source, Russian Engineering Research. 38 (4) (2018) 260–262.

31. Alifov A. A., Calculating mixed forced and self-oscillations for delayed elastic constraint and a limited power energy source, J. Mach. Manuf. Reliab. 49 (2) (2020) 105–109.

32. **Bogoliubov N. N., Mitropolsky Y. A.,** Asymptotic methods in the theory of non-linear oscillations, CRC Press, Florida, USA, 1961.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

АЛИФОВ Алишир Али оглы — доктор технических наук, главный научный сотрудник лаборатории динамических процессов Института машиноведения имени А. А. Благонравова Российской академии наук, Москва, Россия.

101000, Россия, г. Москва, Малый Харитоньевский пер., 4 alishir@mail.ru ORCID: 0000-0003-2327-068X

#### THE AUTHOR

ALIFOV Alishir Ali Mechanical Engineering Research Institute of the RAS 4 Malij Haritonjevskij lane, Moscow, 101000, Russia alishir@mail.ru ORCID: 0000-0003-2327-068X

Статья поступила в редакцию 11.02.2023. Одобрена после рецензирования 18.06.2023. Принята 18.06.2023.

Received 11.02.2023. Approved after reviewing 18.06.2023. Accepted 18.06.2023.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2023

Научная статья УДК 621.412 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16305

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ УЗЛОВОГО АНАЛИЗА ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В РОТОРНО-ЛОПАСТНОМ ДВИГАТЕЛЕ С ВНЕШНИМ ПОДВОДОМ ТЕПЛА

# В. Ю. Коёкин, С. В. Булович 🖾

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

#### Санкт-Петербург, Россия

<sup>⊠</sup> bulovic@yandex.ru

Аннотация. Известный алгоритм математического моделирования в узловых значениях применен для анализа работы роторно-лопастного двигателя с внешним подводом тепла. Методика расчета позволяет при помощи формирования графа в виде матрицы связей, когда коммутация узлов зависит от времени, получать требуемое сочетание обменных процессов между введенными элементами. Значения термодинамических функций, найденные в результате расчета по известному алгоритму, сопоставлены с их значениями, взятыми из индикаторных диаграмм. Продемонстрировано влияние конечной скорости протекания процессов тепло- и массообмена на значения давления и температуры в рамках повторяющегося циклического процесса.

Ключевые слова: роторно-лопастной двигатель, метод узлового анализа, циклический процесс, численное моделирование

Для цитирования: Коёкин В. Ю., Булович С. В. Математическое моделирование методом узлового анализа теплофизических процессов в роторно-лопастном двигателе с внешним подводом тепла // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 49–58. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16305

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.16305

# SIMULATION OF THERMOPHYSICAL PROCESSES IN A ROTOR-BLADE ENGINE WITH EXTERNAL HEAT SUPPLY BY NODAL ANALYSIS

#### V. Yu. Koyokin, S. V. Bulovich 🖾

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

#### <sup>⊠</sup> bulovic@yandex.ru

**Abstract.** The well-known algorithm of mathematical modeling in nodal values has been used to analyze the operation of a rotary-blade engine with external heat supply. The calculation procedure allows obtaining the required combination of exchange processes between the introduced elements using the formation of a graph in the form of a connection matrix when the switching of nodes depends on time. The values of thermodynamic functions found as a result of calculation by a known algorithm were compared with their values taken from indicator diagram characteristics. The influence of the finite rate of heat and mass transfer processes on the pressure and temperature values within a repetitive cyclic process was demonstrated.

© Коёкин В. Ю., Булович С. В., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Keywords: rotary-blade engine, nodal analysis method, cyclic process, numerical simulation

**For citation:** Koyokin V. Yu., Bulovich S. V., Simulation of thermophysical processes in a rotor-blade engine with external heat supply by nodal analysis, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 49–58. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16305

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

#### Введение

Принципиальным ответом на запрос современности относительно создания экологически чистого двигателя является конструкция в виде двигателя с внешним подводом тепла. В этом случае подразумевается, что термодинамический процесс с рабочим телом будет происходить по замкнутому циклу. В настоящее время существует несколько типов конструкций, где реализуется циклический процесс, который включает теплообмен с отводом тепла от рабочего тела, сжатие, теплообмен с подводом тепла и расширение (рабочий ход).

Если процесс изменения состояния рабочего тела описывается при помощи двух изотерм и двух адиабат, то такой цикл считают совершенным (цикл Карно). Его кпд определяется уровнем температур рабочего тела в нагревателе и охладителе. Не уступают по этому показателю и машины, где организация процесса проведена по циклу Стирлинга. Он описывается при помощи двух изотерм и двух изохор. В общем случае кпд процесса будет ниже идеального, но применение в цикле регенератора тепла позволяет добиться также высокого значения этого показателя при оценке эффективности процесса.

Примечательно, что при выборе одинаковых значений температуры на линиях изотерм работа, совершаемая по циклу Стирлинга, будет больше, чем по циклу Карно. Поэтому легко объясним продолжающийся поиск перспективной конструкции двигателя, когда рабочий процесс в той или иной степени приближается к циклу Карно или Стирлинга.

Известны три основные модификации поршневого двигателя Стирлинга: α-, β- и γ-типа. Они различаются по количеству используемых цилиндров и организации процесса теплообмена [1]. Однако все модификации обладают общим недостатком: рабочее тело совершает осциллирующие движения между областями нагрева и отвода тепла. В большинстве случаев такой режим движения рабочего тела приводит к дополнительным потерям энергии, которая затрачивается на разгон и торможение. Частично устранить этот недостаток позволяет организация циркуляционного движения рабочего тела между теплообменными аппаратами. Принцип поддержания инерционного движения рабочего тела реализован в ряде конструкций, но определенными преимуществами обладает роторно-лопастной двигатель с внешним подводом тепла [2].

Если сравнить роторно-лопастной двигатель с роторно-поршневым двигателем Ванкеля, бесшатунным двигателем Баландина, то в рассматриваемом двигателе возможны очень высокие рабочие обороты. Все детали хорошо уравновешены, газораспределение осуществляется окнами.

Для идеальной роторно-лопастной машины цикл организован в виде двух изохор и двух адиабат. В изохорных процессах происходит подвод и отвод тепла, адиабатические процессы используются для совершения работы и сжатия газа. Совершаемую работу и кпд такого цикла можно оценить через разности температуры в процессе нагрева и охлаждения рабочего тела.

ния рабочего тела. Если ввести величины  $T_s^{heat}$  и  $T_e^{heat}$  (К) как начальную и конечную температуру рабочего тела в нагревателе, а величины  $T_s^{cool}$  и  $T_e^{cool}$  (К) – как начальную и конечную температуру в охладителе, то удельные значения подведенного тепла  $q^{heat}$  (Дж/кг) и отведенного  $q^{cool}$  (Дж/кг), а также удельная работа A (Дж/кг) будут определяться выражениями

$$q^{heat} = c_V \left( T_e^{heat} - T_s^{heat} \right), \tag{1}$$

© Koyokin V. Yu., Bulovich S. V., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Математическое моделирование физических процессов

$$q^{cool} = c_V \left( T_e^{cool} - T_s^{cool} \right), \tag{1}$$
$$A = q^{heat} + q^{cool},$$

где  $c_{\nu} Дж/(кг \cdot K)$ , — удельная теплоемкость при постоянном объеме.

Для рассматриваемого процесса кпд составит

$$\eta = \frac{A}{q^{heat}} = 1 - \frac{T_s^{cool} - T_e^{cool}}{T_e^{heat} - T_s^{heat}}.$$
(2)

С учетом принадлежности узловых значений температуры в цикле попарно одной и той же адиабате, которая в переменных T-V выражается зависимостью  $TV^{\gamma-1} = \text{const}$ , и ввести величину *n* как отношение максимального значения объема в рассматриваемом цикле к минимальному, можно определить кпд через изменение объема и показатель адиабаты:

$$\eta = 1 - n^{1 - \gamma}. \tag{3}$$

Из приведенной формулы (3) следует, что для получения высокого кпд процесса отношение объемов должно быть по возможности максимальным, а в качестве рабочего тела целесообразно выбирать одноатомный газ, обладающий наиболее высоким значением показателя адиабаты  $\gamma$ . Иллюстрация идеального цикла роторно-лопастной машины в диаграмме p-V приведена на рис. 1.



Рис. 1. Диаграмма *p*-*V* идеального термодинамического цикла роторно-

лопастного двигателя.				
Содержит изохоры (линии $2 \rightarrow 3$ ,				
$4 \rightarrow 1$ ) и адиабаты (линии $1 \rightarrow 2$ ,				
$3 \rightarrow 4)$				

Реальный цикл, помимо названных процессов адиабатического сжатия и расширения, изохорного подвода и отвода тепла, включает перемещение рабочего тела в теплообменные аппараты и обратно. Истечение газа из камеры или ее наполнение происходит с конечной скоростью, лимитированной, по меньшей мере, скоростью звука. Так же с конечной скоростью проходят теплообменные процессы рабочего тела с ограничивающими поверхностями в нагревателе и охладителе.

Таким образом, для корректного описания совокупности процессов в роторно-лопастном двигателе необходимо провести математическое моделирование с учетом зависимости термодинамических функций от времени.

Следует указать на ряд работ, в которых проводилось исследование характеристик и режима работы роторно-лопастного двигателя. Общая оценка методов расчета и возможности математического моделирования, применительно к роторно-лопастному двигателю, рассмотрены в работе [3]. В частности, в ней делается вывод о

целесообразности проведения первичного анализа в рамках математического моделирования на базе узлового анализа. В статье [4] рассмотрены газодинамические процессы в емкостях переменного объема на фазах сжатия или расширения с учетом теплообмена на ограничивающих поверхностях. Оценка влияния протечек в уплотнениях на показатели работы двигателя проведена в работе [5]. В докладах [6, 7] получены расчетные формулы для постановки задачи на основе законов сохранения массы и энергии. Рассмотрен частный случай, когда происходит заполнение газом емкости переменного объема.

Подводя итог упомянутым исследованиям, важно указать на два момента. Во-первых, из математического моделирования исключены теплообменные аппараты. И во-вторых (это следует из первого пункта), отсутствуют расчеты полного цикла рабочего тела, позволяющего добиться согласования всех тепло- и массообменных процессов в роторнолопастном двигателе. На основе проведенного анализа современного состояния проблемы, цель настоящей работы — провести математическое моделирование первого уровня в рамках метода узлового анализа.

Для этого необходимо в роторно-лопастном двигателе выделить конструктивные элементы, имеющие определенное функциональное назначение.



Рис. 2. Схема роторно-лопастного двигателя: 1 - 4 — рабочие камеры; 5 — нагреватель; 6 — охладитель; 7 — 10 — лопасти двигателя;  $\Psi_{II}$  — размер лопасти по угловой координате;  $\Psi_{min}$  — минимальное расстояние по угловой координате между серединами соседних лопастей;  $\beta_{11}$ ,  $\beta_{12}$  — положения окна входа в нагреватель в значениях угловой координаты

Рассмотрим конструкцию четырехлопастной машины (рис. 2). Диаметрально противоположные лопасти 7, 9 и 8, 10 попарно соединены между собой. При вращении вала, одна пара лопастей совершает колебательные перемещения относительно другой пары при помощи рычажно-кулачкового механизма. Такая конструкция, помещенная в барабан, образует четыре камеры переменного объема. Закономерность изменения объема каждой из камер одинакова, но при циклическом процессе сдвинута по фазе в соседних камерах на угол  $\pi/2$ . На рис. 2 представлен вариант, когда камеры 1 и 3 имеют максимальный объем, а камеры 2 и 4 – минимальный (нумерация объектов ведется против часовой стрелки, в направлении вращения вала двигателя). Помимо камер 1 - 4, следует выделить камеру горячего (5) и холодного (6) теплообменников. Объем этих двух камер не зависит от времени. В результате такого деления конструкцию роторно-лопастного двигателя можно представить шестью элементами.

Газообмен рассматриваемой В конструкции между камерами 1 - 4 и теплоаппаратами происходит обменными через коммутации. При вращении окна вала происходит позиционирование камеры со входом или выходом в теплообменную камеру нагревателя или охладителя. Размер площади взаимного перекрытия окна и камеры, как и объем камер l - 4, зависит от угла поворота и, в конечном счете, от времени. На

рис. 2 положение окна входа в нагреватель представлено значениями угловой координаты  $\beta_{11}$  и  $\beta_{12}$ .

Рассмотрим параметры задачи, которые определяют режим работы роторно-лопастного двигателя. Для постановки и решения задачи Коши необходимо задать геометрические характеристики, м<sup>3</sup>:

$$V_1(t) - V_4(t), V_5, V_6;$$

круговую частоту вращения  $\omega$  (рад/с); состав рабочего тела, который определяет термодинамические свойства и показатель адиабаты  $\gamma$ ; массу M (кг), рабочего тела во всех шести камерах. Помимо этого, необходимы значения температуры поверхностей  $T_{heat}^{w}$  и  $T_{cool}^{w}$  (K) в нагревателе и охладителе, а также коэффициента объемной теплопередачи h (BT/M<sup>3</sup>).

Назначения этих параметров при постановке задачи достаточно, чтобы определить такие важные характеристики, как количество подведенного ( $Q^{heat}$ ) и отведенного ( $Q^{cool}$ ) тепла (в Дж), а, следовательно, и величину работы, совершенную двигателем на валу.

Для описания поведения термодинамических функций в каждом из элементов рассматриваемой системы использовали два обыкновенных дифференциальных уравнения, выражающих баланс массы и энергии. Замыкание системы уравнений провели при помощи уравнения состояния газа, выраженного в форме Менделеева — Клапейрона:

$$\frac{d}{dt} \left( V_{j} \rho_{j} \right) = \sum_{i=1}^{N} \dot{m}_{ji},$$

$$\frac{d}{dt} \left( c_{V} V_{j} \rho_{j} T_{j} \right) = \sum_{i=1}^{N} \dot{m}_{ji} c_{P} T_{ji} - p_{j} \frac{dV_{j}}{dt} + h \left( T_{j}^{w} - T_{j} \right) V_{j},$$

$$p_{j} = R_{gas} \rho_{j} T_{j},$$
(4)

где j — номер рассматриваемого элемента в роторно-лопастном двигателе; N — количество элементов;  $\dot{m}_{ji}$  — расход газа меду объектами с индексами j и i;  $p_j$ ,  $\rho_j$ ,  $T_j$  — давление, плотность и температура;  $c_p$ ,  $R_{gas}$  — удельная теплоемкость при постоянном давлении и газовая постоянная соответственно.

Изменения массы и энергии описываются нестационарными слагаемыми, обменные процессы между элементами двигателя фигурируют в правых частях системы уравнений (4). Формально каждый элемент *j* может быть связан с другим элементом *i*, что выражается суммированием по всем объектам *N*. Конкретная коммуникация элементов в текущий момент времени определяется матрицей связей, которая выступает как маска, исключающая ненужные массообменные потоки. В зависимости от угла поворота вала, одновременно с этим происходит вычисление фактических значений площади перекрытия  $S_{ji}$  при коммутации камер и окон теплообменных аппаратов. Массообмен между элементами происходит с выбором направления потока. Принято, что поступление массы в текущий элемент *j* описывается положительным значением расхода ( $\dot{m}_{ji} > 0$ ), а величина  $T_{ji}$ , выражающая температуру поступающего газа в *j*-ый элемент, имеет значение  $T_{ji} = T_i$ . Если  $\dot{m}_{ji} < 0$ , то  $T_{ji} = T_j$ . Второе слагаемое во втором уравнении системы учитывает влияние скорости изменения объема на изменение температуры, а третье слагаемое – теплообменные процессы с элементами подвода или отвода тепла.

Направление и величина массообменных процессов определяется сравнением уровня давлений в объектах. Выбор максимального и минимального значения давления производится по формулам

$$p_{\text{max}} = \max(p_i, p_i)$$
 и  $p_{\min} = \min(p_i, p_i)$ .

Этот прием позволяет идентифицировать элемент с высоким значением давления и промаркировать все остальные функции в этом элементе как максимальные. Значение расхода газа (по модулю) определяется выражением, которое основано на изоэнтропических формулах и имеет вид

$$\begin{cases} \dot{m}_{ji} = \dot{m}_{ji}^{*} = \left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{\frac{(\gamma+1)}{2(\gamma-1)}} S_{ji} \rho_{\max} \sqrt{\gamma R_{gas} T_{\max}} \qquad p_{\min} < \left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} p_{\max}; \\ \dot{m}_{ji} = \dot{m}_{ji}^{*} \left(\frac{2}{\gamma-1} \left(\frac{\gamma+1}{2}\right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}} \left(\frac{p_{\min}}{p_{\max}}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma}} \left(1 - \left(\frac{p_{\min}}{p_{\max}}\right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}\right)^{1/2} \qquad p_{\min} > \left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} p_{\max}. \end{cases}$$
(5)

Первая формула в системе (5) отражает случай сверхзвукового запирания потока при отношении давлений в камерах выше критического значения. Вторая формула описывает режимы дозвукового течения газа.

Интегрирование системы уравнений (4), (5) было выполнено численно по явной двухслойной схеме Эйлера. Проверка правильности написания программы была произведена на серии решений простейших задач. В частности, оценка времени опорожнения емкости постоянного объема приведена в работе [8], решение задачи о наполнении емкости – в [9]. Закономерности поведения температуры газа в замкнутом объеме в результате изменения этого объема или теплообмена отражают простые аналитические формулы.

### Таблица

Параметр, елиница измерения	Обозначение	Значение расчетного параметра в методе	
		ИА	УЗ
Температура, К			
нагревателя	$T_{h}$	603,15	605,183
охладителя	$T_c^{"}$	300,15	276,217
Давление, МПа			
в нагревателе	$p_h$	_	0,408
в охладителе	$p_c$	0,100	0,100
Средняя температура рабочего тела, К			
в нагревателе	$\langle T_{ab} \rangle$	$T_{o} = T_{he}$	603,15
в охладителе	$\langle T_{gc}^{s^n} \rangle$	$T_g^s = T_{ce}^{s}$	300,15
Объем, м <sup>3</sup>			
нагревателя	$V_h$	$V_{he} >> V_{w.ch}$	1,0
холодильника	V <sub>c</sub>	$V_{ce} >> V_{w.ch}$	1,0
	β <sub>11</sub>	—	64,00
	$\beta_{12}$	-	88,90
	$\beta_{21}$	-	91,10
	β <sub>22</sub>	—	116,00
Угловои размер окна, град	$\beta_{31}$	—	216,95
	β <sub>32</sub>	—	268,90
	$\beta_{41}$	-	271,10
	$\beta_{42}$	—	323,05
Угловой размер лопасти, град	Ψ <sub>II</sub>	52,0	
Минимальное расстояние между соседними лопастями, град	$\Psi_{\min}$	54,1	
Ширина лопасти, м	W <sub>b</sub>	0,12	
Радиус роторов, мм	R <sub>2</sub>	50	
Радиус обода корпуса, мм	$R_1$	125	
Суммарный объем камер, м <sup>3</sup>	V <sub>ch</sub>	2.10-3	
Угловая скорость ротора, рад/с	ω	10π	

# Использованные расчетные параметры роторно-лопастной машины и их значения

Обозначения: ИА, УЗ – индикаторный анализ и узловые значения, соответственно;  $T_g$  – температура рабочего тела (газ – воздух);  $T_{he}$ ,  $V_{he}$  – температура и объем горячего теплообменника, соответственно;  $V_{wch}$  – объем рабочей камеры.

Для анализа работы роторно-лопастной машины были взяты данные из работы [2]. Параметры, необходимые для проведения расчета, сведены в таблицу.

Кинематические перемещения лопастей определяются двумя угловыми скоростями:

$$\omega_{7,9} = \omega \left[ 1 - \left( \frac{\pi}{2} - \Psi_{\min} \right) \sin(2\varphi) \right], \quad \omega_{8,10} = \omega \left[ 1 + \left( \frac{\pi}{2} - \Psi_{\min} \right) \sin(2\varphi) \right], \quad (6)$$

а положение их граней можно найти из решения обыкновенного дифференциального уравнения

$$\frac{d\varphi_j}{dt} = \omega_j. \tag{7}$$

Знание угловой координаты позиций начала и конца камеры позволяет определить ее размер по угловой координате как разность соответствующих углов. Помимо этого, сравнение угловых координат начала и конца камеры с углами размещения окон теплообменных аппаратов позволяет определить значения площадей перекрытия.

В качестве начального приближения для термодинамических функций были использованы оценочные значения функций в нагревателе и охладителе, взятые с индикаторной диаграммы. Для получения результатов для установившегося режима необходимо провести расчеты, состоящие из нескольких сотен циклов.

Переходный процесс выхода роторно-лопастного двигателя от заданного начального состояния на рабочий режим проиллюстрируем зависимостью температуры и давления в нагревателе и охладителе (рис. 3).



Рис. 3. Зависимости температуры (*a*) и давления (*b*) от времени в охладителе и нагревателе (кривые синего и красного цветов соответственно)

Установившийся режим работы характеризуется тем, что за время цикла масса газа, которая поступает в нагреватель, совпадает с массой газа, которая поступает в охладитель. Зависимость давления и температуры от времени для двух последовательных циклов на установившемся режиме работы в камере *I* приведена на рис. 4.

Рис. 5 позволяет наглядно сравнить результаты моделирования работы роторно-лопастного двигателя в рамках индикаторного анализа и анализа в узловых значениях. Изображение функций на диаграмме p - V позволяет убедиться, что допущение о бесконечно больших теплообменных аппаратах действительно равносильно рассмотрению изохорного процесса. Конечные размеры теплообменных аппаратов приводят к образованию «петель» на диаграмме p - V. Помимо этого, на этой диаграмме различимы процессы газообмена камеры и теплообменного аппарата, которые выражаются как в конечной скорости изменения давления, так и в отклонении давления в камере от давления в теплообменном аппарате.



Рис. 4. Зависимости температуры (а) и давления (b) от времени в первой камере



Рис. 5. Циклические зависимости давления от текущего значения объема; результаты получены по индикаторным зависимостям и по методу узлового анализа (кривые зеленого и черного цветов соответственно)

#### Заключение

В настоящей работе для определения характеристик работы роторно-лопастного двигателя с внешним подводом тепла применен метод узлового анализа. Учет процессов в теплообменных аппаратах позволил получить представление о поведении термодинамических функций в циклическом процессе. Изменение состояния рабочего тела в полном цикле позволяет корректно определить реальные значения тепловых потоков в теплообменных аппаратах и, как следствие, полезную работу на валу двигателя.

Сформулированная математическая модель учитывает масштабы времени, в том числе и связанные с конечной скоростью протекания тепло- и массообменных процессов. Продемонстрировано, что для варианта вращения вала роторно-лопастного двигателя на низких оборотах индикаторная диаграмма удовлетворительно описывает поведение термодинамических функций.

Малая ресурсоемкость и неоспоримые преимущества метода узловых значений перед методом индикаторного анализа делают расчет по первому методу хорошим предварительным приближением для последующего, более полного математического моделирования в двух- или трехмерной постановке задачи. Использованный в работе подход к описанию характеристик и функционирования конструкции роторно-лопастного двигателя имеет широкие возможности для развития и модификации. Математическое моделирование физических процессов

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Уокер Г. Двигатели Стирлинга: сокр. пер. с англ. Сутугина Б. В. и Сутугина Н. В. М.: Машиностроение, 1985. 408 с.

2. Журавлёв Ю. Н., Плохов И. В., Лукьянов Ю. Н. и др. Расчет и проектирование роторно-лопастной машины с внешним подводом теплоты: Псков: Псковский государственный университет, 2012. 72 с.

3. Семенов С. Н., Перминов А. Л., Лукьянов Ю.Н., Тихонов С. И. Анализ методов расчета параметров рабочих процессов в поршневых двигателях Стирлинга // Вестник Псковского государственного университета. Сер. Технические науки. 2016. № 4. С. 20–27.

4. Журавлев Ю. Н., Семенов С. Н., Иванов А. Н. Расчет температур и давлений в роторно-лопастном двигателе с внешним подводом теплоты // Вестник Псковского государственного университета. Сер. Экономические и технические науки. 2014. № 5. С. 170–176.

5. Довгялло А. И., Коломин И. В. Аналитическое исследование рабочего процесса роторно-лопастного компрессора // Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета. Машиностроение и энергетика. 2009. № 2 (18). С. 52–60.

6. **Перминов А. Л., Ильин А. В., Тихонов С. И., Журавлев Ю. Н., Лукьянов Ю. Н.** Газодинамика впуска рабочего тела в камеру роторной расширительной машины // «Современные инновации в технике и производстве»: материалы международной научно-практической конференции. Псков, 23–24 апреля 2020 г., Псков: Изд-во Псковского государственного университета, 2021. С. 46–50.

7. Perminov A., Ilyin A., Fedorov D., Drozdov S., Tikhonov S. Gas dynamics of working fluid inlet into chamber of rotary expansion machine // Environment. Technology. Resources: Proceedings of the 13-th International Scientific and Practical Conference. Rezekne, Latvia, June 17–18, 2021. Pp. 266–269.

8. **Тарасов В. В.** Расчет времени истечения идеального газа из резервуара постоянного объема в среду с постоянным давлением при адиабатическом процессе // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2016. Т. 2. № 2. С. 84–95.

9. Колесник Е. В., Булович С. В., Григорьев В. В. Расходные характеристики отверстий и длинных трубок при течении сжимаемого газа. СПб.: Политех-Пресс, 2020. 47 с.

#### REFERENCES

1. Walker G., Stirling engines, Clarendon Press, Oxford, 1980.

2. Zhuravlev Yu. N., Plokhov I. V., Lukyanov Yu. N., et al., Raschet i proyektirovaniye rotornolopastnoy mashiny s vneshnim podvodom teploty [Calculation and designing of a rotary-blade machine with external heat supply], The Pskov State University Publishing, Pskov, 2012.

3. Semenov S. N., Perminov A. L., Lukyanov Yu. N., Tikhonov S. I., Analysis methods of calculation workflow parameters in the piston Stirling engine, Vestnik PskovGU. Ser. Tekhnicheskiye nauki [Bulletin of the Pskov State University. Series: Technical Science]. (4) (2016) 20–27 (in Russian).

4. **Zhuravlev Yu. N., Semenov S. N., Ivanov A. N.,** Calculation temperature and pressure of the rotary vane engine with an external supply of heat, Vestnik PskovGU. Ser. Ekonomicheskiye i tekhnicheskiye nauki [Bulletin of the Pskov State University. Series: Economical and Technical Sciences]. (5) (2016) 170–176 (in Russian).

5. Dovgyallo A. I., Kolomin I. V., Rotor blade compressor working process analysis, Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo aerokosmicheskogo universiteta. Mashinostroyeniye i energetika [Bulletin of the Samara State Airospace University, Series: Mechanical and Power Engineering]. (2 (18)) (2009) 52–60.

6. **Perminov A. L., Ilyin A. V., Tikhonov S. I., et al.,** Gazodinamika vpuska rabochego tela v kameru rotornoy rasshiritelnoy mashiny [Gas dynamics of a working medium inflow into a chamber of rotary-expansion mashine], Proc. Int. Sci. & Pract. Conf. "Modern Innovations in Technology and Production", The Pskov State University Publishing, Pskov (2021) 46–50.

7. **Perminov A., Ilyin A., Fedorov D., et al.,** Gas dynamics of working fluid inlet into chamber of rotary expansion machine, Proc. 13-th Int. Sci. & Pract. Conf. "Environment. Technology. Resources", June 17–18, 2021. Rezekne, Latvia (2021) 266–269.

8. Tarasov V. V., Calculation of the ideal gas outflow time from the reservoir of constant volume into the environment with a constant pressure at an adiabatic process, Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy. 2 (2) (2016) 84–95 (in Russian).

9. Kolesnik E. V., Bulovich S. V., Grigoryev V. V., Raskhodnyye kharakteristiki otverstiy i dlinnykh trubok pri techenii szhimayemogo gaza [Gas-flow characteristics of holes and long tubes during the flow of compressible gas], Politekh-Press, St. Petersburg, 2020 (in Russian).

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**КОЁКИН Вадим Юрьевич** — студент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 koiokin@mail.ru ORCID: 0009-0001-2994-3788

БУЛОВИЧ Сергей Валерьевич — кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 bulovic@yandex.ru ORCID: 0000-0001-9624-1228

#### THE AUTHORS

KOYOKIN Vadim Yu. Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia koiokin@mail.ru ORCID: 0009-0001-2994-3788

**BULOVICH Sergey V.** *Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University* 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia bulovic@yandex.ru ORCID: 0000-0001-9624-1228

Статья поступила в редакцию 26.05.2023. Одобрена после рецензирования 30.06.2023. Принята 30.06.2023. Received 26.05.2023. Approved after reviewing 30.06.2023. Accepted 30.06.2023. Научная статья УДК 53.093, 53.096, 57.031, 57.033, 57.038 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16306

# СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ГЛИЦИНА, ТРИПТОФАНА И ДИФЕНИЛАЛАНИНА В ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ ТЕРАГЕРЦОВОГО И ИНФРАКРАСНОГО СПЕКТРАЛЬНЫХ ДИАПАЗОНОВ

# М. А. Баранов 🖾, Э. К. Карсеева, О. Ю. Цыбин

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

#### Санкт-Петербург, Россия

#### <sup>IIII</sup> baranovma1993@gmail.com

Аннотация. В статье реализован метод анализа молекулярных колебаний аминокислот глицина, триптофана и дифенилаланина в электрических полях терагерцового и инфракрасного диапазонов, основанный на вычислении Фурье-спектра частот амплитудно-временных реализаций интегрального дипольного момента, полученных суперкомпьютерным моделированием. Результаты показали новые возможности применения данного метода, дополнили представления о динамических свойствах биомолекул; использованный метод и полученные данные можно рекомендовать при разработке нанобиотехнологий, биоэлектронных и гетерогенных гибридных микроэлектронных приборов с встроенными биомолекулярными компонентами.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, компьютерное моделирование, аминокислота, биомолекулярная электроника, глицин, триптофан, дифенилаланин

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках программы «Суперкомпьютерное моделирование и технология биомолекулярных пленочных структур» (грант № 21-72-20029).

Для цитирования: Баранов М. А., Карсеева Э. К., Цыбин О. Ю. Суперкомпьютерные динамические модели глицина, триптофана и дифенилаланина в электрических полях терагерцового и инфракрасного спектральных диапазонов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 59–72. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16306

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.16306

# SUPERCOMPUTER DYNAMICAL MODELS OF GLYCINE, TRYPTOPHAN AND DIPHENYL-L-ALANINE IN THE ELECTRICAL FIELDS OF TERAHERTZ AND INFRARED SPECTRAL RANGES

# M. A. Baranov <sup>⊠</sup>, E. K. Karseeva, O. Yu. Tsybin

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

#### <sup>™</sup> baranovma1993@gmail.com

Abstract. In the paper, a method for analyzing molecular oscillations of the glycine, tryptophan and difenilalanine amino acids in the electric fields of the THz/IR frequency ranges has

© Баранов М. А., Карсеева Э. К., Цыбин О. Ю., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

been implemented with Fourier-frequency spectrum calculation of the integral dipole moment amplitude-time realizations obtained by supercomputer modeling. The achieved results inhibited new possibilities of applying this method, supplemented the understanding of the dynamic properties of biomolecules. The method and the data obtained can be recommended in the development of nanobiotechnologies, bioelectronics, and hetero hybrid microelectronic devices with embedded biomolecular components.

Keywords: molecular dynamics, simulation, amino acid, biomolecular electronics, glycine, tryptophan, diphenylalanine

**Funding:** The reported study was funded by Russian Science Foundation (grant No. 21-72-20029 "Supercomputer Simulation & Technology of Biomolecular Film Structures").

**For citation:** Baranov M. A., Karseeva E. K., Tsybin O. Yu., Supercomputer dynamical models of glycine, tryptophan and diphenyl-L-alanine in the electrical fields of terahertz and infrared spectral ranges, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 59–72. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16306

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

#### Введение

Внутримолекулярные и межмолекулярные колебания белковых молекул, имеющие фундаментальное значение для выполнения биологических функций, активно реализуются в научных исследованиях и технических приложениях, в том числе в спектроскопии, при разработках биоэлектронных и гетерогенных гибридных микро- и наноэлектронных полупроводниковых приборов с встроенными органическими компонентами и др. [1 – 7].

Биомолекулы, в том числе аминокислоты, обладают свойствами комплекса связанных осцилляторов в уникально широком частотном диапазоне электромагнитного поля, включая такие диапазоны спектра, как гига- и терагерцовый (ГГц и ТГц соответственно), инфракрасный (ИК), видимый и ультрафиолетовый (УФ) [8 – 10]. По сравнению с крупными белковыми молекулами, аминокислоты характеризуются более высокой статистической повторяемостью структуры, устойчивым набором динамических параметров, универсальной функциональностью. На этой основе предполагается возможным создание компонентов гибридных микроэлектронных приборов, управляемых электрическими сигналами. В нулевом внешнем электромагнитном поле в ТГц- и в ИК-спектрах биомолекул проявляются хорошо систематизированные, распределенные и локальные колебания, обусловленные собственными динамическими модами молекул аминокислот [11 – 14]. Локальные собственные внутримолекулярные электрические поля обусловлены мультиполями нормальных мод колебаний, преимущественно диполями. Соответственно, молекула представляет собой многочастотную систему связанных осцилляторов, активность которых в нулевом внешнем поле задается запасенной и поступающей энергией. На частотах внутримолекулярных резонансов при нормальной температуре такие колебания генерируют за счет пространственного перераспределения зарядов внутреннее самосогласованное электрическое поле с наибольшей амплитудой приблизительно до 1 В/нм. Энергия внутренних мультиполей биомолекул в газовой фазе и в растворе может эффективно изменяться внешним электромагнитным полем, постоянным или переменным на селективных частотах, что определяет конформационные переходы, изменения мультипольных моментов и интенсивность вынужденных колебаний.

В теоретической и экспериментальной (ТГц–ИК)-спектроскопии принимается, что поглощение энергии облучающего электромагнитного поля происходит на локальных внутримолекулярных колебаниях, относящихся к первичной структуре, а также на нелокальных колебаниях вторичной и более высоких структур [7, 12, 15, 16]. Основной задачей спектроскопии является регистрация спектрально-селективного поглощения энергии облучения, но происходящей при этом перестройки всего комплекса внутримолекулярных осцилляторов эта методика не раскрывает.

<sup>©</sup> Baranov M. A., Karseeva E. K., Tsybin O. Yu., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

В нашей работе [17] выполнены суперкомпьютерное моделирование методом молекулярной динамики и сравнительное исследование частотного спектра в этом диапазоне амплитудно-временных реализаций интегрального дипольного момента аминокислот глицина, дифенил-L-аланина и триптофана в условиях нулевого внешнего электромагнитного поля. Фурье-спектры собственных локальных колебаний аминокислот были верифицированы в нашей предыдущей работе путем их сопоставления с известными данными компьютерного моделирования и экспериментальной спектроскопии. При этом была обоснована эффективность разработанной методики.

Компьютерная неравновесная молекулярная динамика молекул, находящихся во внешнем электромагнитном поле, позволяет развивать теорию спектроскопии, выявлять динамику конформаций и локальных колебаний аминокислот, пептидов и крупных белков, разрабатывать биотехнологии, прототипы биоэлектронных и гетерогенных гибридных микро- и наноэлектронных полупроводниковых приборов с встроенными органическими компонентами, а также многое другое [18].

Согласно данным моделирования, линейный режим дипольного отклика осцилляторов соответствует напряженности внешнего электрического поля до ~0,5 В/нм, т. е. значительно меньшей, чем собственное внутреннее поле [15, 19, 20].

Несмотря на большой объем данных, относящихся к теоретическим и экспериментальным исследованиям по воздействию внешнего электромагнитного поля на белковые молекулы, сведений о вынужденных локальных колебаниях аминокислот в среднем и ближнем ИК-диапазонах все же недостаточно. Соотношение комплексов собственной динамики и вынужденных колебаний при их возбуждении на селективных частотах также изучено недостаточно. В работе [1] для аминокислоты глицина в водном растворе методом суперкомпьютерного моделирования молекулярной динамики, дополненного учетом внешнего переменного электрического поля ИК-диапазона, впервые выявлены резонансные и переходные эффекты вынужденных асимметричных NH<sub>2</sub>-колебаний (Амид А) и С–N колебаний с волновыми числами, соответственно около 3335,62 и 1042,37 см<sup>-1</sup>.

В данной статье реализована методика [1] для сравнительного анализа динамики аминокислот глицина, триптофана и дифенилаланина в переменном электрическом поле с частотой, перестраиваемой в диапазоне 20 – 6000 см<sup>-1</sup>.

Аминокислоты выбраны для таких сравнительных исследований благодаря особенностям структуры и функциональных свойств молекул, возможности сопоставления полученных результатов с известными данными, а также использования получаемых новых сведений при разработке и поиске прототипов биоэлектронных и гетерогенных гибридных микроэлектронных приборов с встроенными биомолекулярными компонентами.

#### Методика моделирования молекулярной динамики аминокислот в электрическом поле (ТГц – ИК)-диапазонов

С помощью пакета Avogadro были созданы первичные файлы с координатами атомов молекул глицина (GLY), триптофана (TRP) и дифенилаланина (FF). Программа VMD позволяла создавать структурные файлы на основе топологии молекулярных связей, добавлять «молекулы воды» и «ионы солей», визуализировать молекулярные системы, выполнять вычисления энергии и дипольных моментов конформационно-подвижных молекул. Для каждого атома системы решали уравнение динамики Ньютона, по временным шагам определяли координаты атомов, параметры силового поля, температуру системы, давление и т. п. В результате получали мгновенные значения координат и скорости атомов, используя которые вычисляли зависимости от времени значений интегрального электрического дипольного момента (ЭДМ)  $\mu(t)$  путем суммирования парциальных моментов:

$$\boldsymbol{\mu}(t) = \sum_{n=1}^{N} q_n \big[ \mathbf{r}_n(t) - \mathbf{r}_n(0) \big], \tag{1}$$

где  $\mathbf{r}_n(0)$  — радиус-вектор пространственного положения заряда  $q_n$  в момент времени t = 0;  $\mathbf{r}_n(t)$  — его текущее значение.

Последовательность значений амплитудно-временной реализации интегрального ЭДМ  $\mu(t)$  (см. уравнение (1)) представляла суперпозицию локальных колебаний внутримолекулярных атомных осцилляторов.

Для выполнения вычислений был использован кластер «РСК-Торнадо» суперкомпьютерного центра «Политехнический» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (СПбПУ). Этот кластер с пиковой производительностью 10<sup>15</sup> терафлопс содержит 668 двухпроцессорных узлов (Intel Xeon E5 2697 v3), из них 56 узлов имеют два ускорителя вычислений NVIDIA К40 [17]. Это позволило создавать за приемлемое время (не более 100 машинных часов) эффективные базы данных амплитудновременных реализаций интегрального ЭДМ молекул с максимальной длительностью до 2 нс, с наименьшим шагом дискретизации до 1 фс, и обеспечить этим высокое разрешение Фурье-спектров. В состав программно-вычислительного комплекса СПбПУ входили пакеты прикладных программ Avogadro, Visual Molecular Dynamics и NAMD, а также дополнительные оригинальные программы, написанные на языке Python. Дополнительно к методике моделирования, более подробно изложенной в статье [17], введено переменное электрическое поле (ТГц – ИК)-диапазона частот, подобное использованному в работе [21]. Как и в большинстве известных соответствующих работ, мы полагали, что сила, действующая на внутримолекулярные заряды со стороны переменного магнитного поля, мала (значительно меньше электрической), и электромагнитное поле задавали только электрической компонентой. Электрическое поле  $\mathbf{E}(t)$  имело плоскую пространственную поляризацию по координатным осям x, y, z с компонентами [E00], форму периодической волны в виде симметричного прямоугольного меандра и амплитуду относительно нулевой линии от 0 до  $\pm 0.5$  В/нм. Следовательно, приложенное поле было значительно меньше собственного внутреннего электрического поля в молекуле. Известно единственное исследование, в котором задавали подобную электрическую прямоугольную волну, но значительно более низкочастотную, для изучения динамических свойств жидкой воды в диапазоне частот 20 – 500 ГГц с амплитудой размаха (0,05 – 1,00) В/нм [22].

На рис. 1 представлены эпюра внешнего поля и первые три гармоники его Фурьеспектра. Частоту действующего поля можно было изменять в широких пределах, варьируя количество точек дискретизации в периоде меандра и значения частоты дискретизации. Каждая гармоника с помощью формулы Эйлера может быть представлена круговой поляризацией, или суперпозицией двух волн, вращающихся в противоположных направлениях, одна из которых может находиться в синхронизме с вращением вектора дипольного момента.

Фурье-анализ спектра частот амплитудно-временных реализаций интегрального дипольного момента в электрическом поле выполняли при помощи пакета VMD IR Spectral Density Calculator, который позволял также вычислять координаты атомов из файла скоростей.dcd.



Рис. 1. Фрагмент расчетного Фурье-спектра внешнего электрического поля с частотой основной гармоники 100 ТГц.

На вставке: эпюра применяемого переменного электрического поля E(t)

#### Динамические характеристики аминокислот в электрическом поле (ТГц – ИК)-диапазонов

Типичные зависимости мгновенных значений полного интегрального ЭДМ и его проекций на оси координат от времени, показывающие пространственно-угловую архитектуру и динамику молекул глицина, дифенил-аланина и триптофана в нулевом электрическом поле, были представлены в статье [17]. Амплитудно-временная реализация интегрального ЭДМ имела высокочастотное заполнение, характерное для локальных колебаний, и оставалась примерно постоянной в области относительно низких частот. Проекции ЭДМ на оси прямоугольных координат относительно медленно флуктуировали по амплитуде, что свидетельствовало о нелокальных коллективных движениях молекулы при длительном сохранении ее конформационной структуры.

На рис. 2 представлены типичные зависимости интегрального ЭДМ от времени для аминокислот глицина и триптофана в водном растворе при воздействии электрическим полем на частоте 100 ТГц с прямоугольной огибающей импульса. В первые 500 пс электрическое поле отсутствовало (E = 0), затем его включали на периоды 500 или 1000 пс (см. рис. 2). По окончании импульса поле отключали (E = 0). Видно, что амплитуда вынужденных локальных колебаний, происходящих во время действия поля, возрастает особенно сильно на резонансных частотах поля, совпадающих с частотами нормальных мод.



Рис. 2. Амплитудно-временные зависимости интегрального ЭДМ молекул аминокислот глицина (*a*, *b*) и триптофана (*c*, *d*) в импульсном электрическом поле меандра (длительности импульсов – 500 пс (*a*, *c*) и 1000 пс (*b*, *d*)) с амплитудой примерно 0,4 В/нм, на резонансной частоте 100 ТГц (Амид А, 3333 см<sup>-1</sup>). Моменты включения и выключения электрического поля показаны красными пунктирными линиями.

На рис. 2, *d* виден скачкообразный конформационный переход при *t* = 800 пс

Методика обработки данных, приведенная впервые в работе [1], позволила по реализациям (приведены для примера на рис. 2) определять такие параметры локального осциллятора, как полоса частот  $\Delta f$  и добротность Q. С этой целью эпюры (см. рис. 2) сначала преобразовывались в зависимости от момента времени энергии колебаний W, пропорциональной квадрату ЭДМ, а затем для импульсов W(t) определяли постоянные времени τ нарастания и спада. Поскольку фронты импульсов поля имели длительность не более шага дискретизации (1 фс, см. вставку на рис. 1), была возможность определять постоянные времени и переходные динамические характеристики локальных осцилляторов с большой точностью. Установлено, что резонансным режимам локального осциллятора нормальной моды ассиметричных NH,-колебаний триптофана (Амид А), как и глицина, соответствовали значения  $\tau \approx 10^{-10}$  с, полосы частот  $\Delta f \approx 10$  ГГц и добротности  $Q \approx 10^4$ . Указанные значения параметров сохранялись при изменении длительности импульса поля в пределах, представленных на рис. 2. По-видимому, такие локальные осцилляторы можно считать независимыми или слабо связанными с коллективной конформационной динамикой при меньших частотах. Наряду с локальными резонансами, при наличии поля наблюдались редкие скачкообразные изменения среднего значения интегрального ЭДМ, что можно связать со спонтанными конформационными переходами. Подобные переходы выявлены также при VMD-визуализации молекулярной структуры.

Следующим этапом анализа является преобразование Фурье, выполняемое для амплитудно-временных зависимостей интегрального ЭДМ молекул (показаны для примера на рис. 2), и построение спектров частот.

В области гигагерцовых частот и примыкающей к ней части терагерцового диапазона реализуются нелокальные коллективные или конформационные движения. При моделировании амплитудно-временных реализаций интегрального ЭДМ и вычислении спектров частот, в этом диапазоне обнаружены как нерезонансные, так и резонансные сценарии возбуждения молекулярных осцилляторов электрическим полем. На рис. 3 представлены типичные спектры нерезонансных и резонансных сценариев в ТГц-диапазоне частот.

Конформационную динамику биомолекул в этой области частот связывают в большей степени с движениями, определяемыми водородными связями и вторичной структурой. Показано, например, что низкоэнергетические колебания в интервале волновых чисел  $300 - 500 \text{ см}^{-1}$  могут служить диагностикой наличия вторичных структур в линейных и циклических пептидах [12]. В известных литературных источниках показано также, что в интервале  $20 - 200 \text{ см}^{-1}$  спектральные пики коллективных колебаний образуют плотный континуум выделенных частот [12, 20].

В табл. 1 проведено сравнение вычисленных резонансных частот с известными из литературы значениями таких частот для молекул глицина (GLY), триптофана (TRP) и дифенил-*L*-аланина (FF).





Большое количество резонансных сценариев, приведенных в табл. 1, показывает достаточно точное, широкое и полное соответствие результатов моделирования известным данным, образующим континуум с высокой спектральной плотностью в диапазоне частот  $20 - 200 \text{ см}^{-1}$  и относящихся, вероятно, к коллективным колебаниям с участием цепей водородных связей. В спектрах, расположенных выше по частоте в интервалах  $200 - 1800 \text{ см}^{-1}$  и  $2800 - 3700 \text{ см}^{-1}$ , находятся группы локальных собственных мод; их подробное рассмотрение в условиях нулевого внешнего поля приведено, например, в статье [17]. Такие спектры собственных колебаний при  $E_{ampl} = 0$  показаны на рис. 4 - 6 для сравнения со спектрами вынужденных локальных колебаний. Последние в этих высокочастотных группах, полученные Фурье-преобразованием амплитудно-временных реализаций интегрального ЭДМ при наложении плоскополяризованного электрического поля в виде симметричного меандра с амплитудой отклонения от нулевой линии  $E_{ampl} = \pm 0,43$  В/нм, также показаны на рис. 4 - 6. Данные приведены для молекул глицина, триптофана и дифенил-*L*-аланина.

Данные, приведенные на рис. 4 – 6, позволяют построить интерпретацию, соответствующую вынужденным локальным внутримолекулярным колебаниям, возбужденным как основной, так и третьей гармоникой поля.

Таблица 1

Резонансная частота, см <sup>-1</sup>						
	GLY	TRP			FF	
PP	лд	PP	ЛД	PP	лд	
22,00	22,00 [1]	28,03	28,00 [1]	_	_	
37,06	37,00 [8]	31,14	30,33 [8, 23]	_	_	
52,45	52,33 [3]	39,71	39,67 [8]	41,69	41,67 [8]	
58,73	58,67 [3]	46,85	46,83 [24]	_	—	
61,09	61,00 [8]	47,65	47,67 [23,25]	_	—	
68,07	68,00 [3]	60,65	60,67 [23, 26]	_	_	
76,86	76,67 [25]	61,32	61,33 [24]	66,45	66,33 [23]	
77,21	77,00 [3]	75,47	75,33 [8, 23]	67,25	67,33 [8]	
80,18	80,00 [23]	_	—	_	—	
84,23	84,33 [3]	_	_	84,23	84,33 [23]	
86,86	86,67 [27]	85,53	85,67 [23]	90,64	90,67 [23]	
90,15	90,00 [23]	_	—	92,14	92,00 [8]	
133,49	133,33 [3]	121,74	122,00 [3]			
135,59	135,83 [27]	_	_	138,98	138,67 [8]	
166,78	166,67 [3]	158,84	158,67 [3]	_	_	

# Сравнение полученных расчетных результатов (РР) с литературными данными (ЛД) из соответствующих источников [] (ТГц-диапазон частот)

GLY, TRP, FF – сокращенные наименования рассмотренных биомолекул: глицина, триптофана и дифенил-*L*-аланина.

#### Обсуждение результатов

Полученные спектральные зависимости во всех спектральных диапазонах имели квазидискретный характер, стабильную структуру пиков и широкий набор реализаций резонансных и нерезонансных сценариев гармонических вынужденных колебаний. В случаях резонансов энергия всех регистрируемых колебаний в основном была



Рис. 4. Сравнение спектров вынужденных локальных (кривые синего цвета) и собственных (оранжевого цвета) колебаний глицина. Первые получены Фурье-преобразованием амплитудновременных реализаций интегрального ЭДМ при наложении плоско-поляризованного электрического поля в виде симметричного меандра с амплитудой отклонения от нулевой линии  $E_{ampl} = \pm 0,43$  В/нм, для вторых  $E_{ampl} = 0$ .

Значения частот и волновых чисел основной гармоники приложенного поля см. в табл. 2



Рис. 5. То же сравнение, что на рис. 4, но для триптофана (см. также табл. 2)



Рис. 6. То же сравнение, что на рис. 4, 5, но для дифенилаланина (см. также табл. 2)

Таблица 2

Значения частот и волновых чисел основной гармоники приложенного электрического поля с амплитудой отклонения от нулевой линии  $E_{ampl} = \pm 0.43$  В/нм

Номер	Частота,	Волновое число,
рисунка	ТГц	см <sup>-1</sup>
4, <i>a</i> ; 5, <i>a</i> ; 6, <i>a</i>	29,40	980
4, <i>b</i> ; 5, <i>b</i> ; 6, <i>b</i>	31,26	1042
4, <i>c</i> ; 5, <i>c</i> ; 6, <i>c</i>	33,33	1111
4, <i>d</i> ; 5, <i>d</i> ; 6, <i>d</i>	83,34	2778
4, <i>e</i> ; 5, <i>e</i> ; 6, <i>e</i>	100,0	3333
4, <i>f</i> ; 5, <i>f</i> ; 6, <i>f</i>	125,0	4167

сосредоточена в резонансном пике, и при переходе от собственных к вынужденным колебаниям происходило существенное (на порядок и более) возрастание амплитуды выбранного типа колебания. Значения резонансных частот соответствуют нелокальным видам колебаний в ТГц-диапазоне (см. табл. 1, диапазон 20 – 200 см<sup>-1</sup>) и локальным нормальным модам в ИК-диапазоне (см. рис. 4 - 6, диапазон 980 - 6000 см<sup>-1</sup>). Локальным резонансам соответствуют значения частот 100, 33,3 и 31,0 ТГц, нерезонансным сценариям -125, 83,3 и 29,4 ТГц. На частоте основной гармоники 29,4 ТГц, или 980 см<sup>-1</sup> (см. рис. 4, а и табл. 2) выделяется межмодовый перенос энергии вправо на более высокие частоты, преимущественно на моде Амид А, 3335,6 см<sup>-1</sup> (глицин, рис. 4); частичное поглощение на резонансе и перенос энергии на моды Амид А и О-Н 3758,57 см<sup>-1</sup> [1, 17] (триптофан, рис. 5); поглощение на частоте облучения и возбуждение резонанса на моде С-С 980 см<sup>-1</sup> соответствует известной моде 981,08 см<sup>-1</sup> [17, 29] (дифенилаланин, рис. 6). При облучении на частоте основной гармоники 31,26 ТГц, или 1042 см<sup>-1</sup> (см. рис. 4,b; 5,b; 6,b и табл. 2) наблюдались резонансы моды C-N 1042 см<sup>-1</sup> на 3-й гармонике N-H 3127,15 см<sup>-1</sup> [4, 21], а также два резонанса одновременно: C-N и N-H на 1-й и 3-й гармониках [17, 30]. На частоте основной гармоники 33,33 ТГц, или 1111 см<sup>-1</sup> (см. рис. 4,с; 5,с; 6,с и табл. 2) для каждого из трех видов молекул аминокислот получены два резонанса одновременно: первый — на модах С–N на основной гармонике, второй — на Амид А на 3-й гармонике [17, 30]. В случае облучения на частоте 83,34 ТГц, или 2778 см<sup>-1</sup> (см. рис. 4,*d*; 5,*d*; 6,*d* и табл. 2) резонансных сценариев не обнаружено, возбуждались практически все линии спектра свободных локальных колебаний, выражены преимущественно моды растяжения О–H 3758,57 см<sup>-1</sup> и Амид А 3333 см<sup>-1</sup>. Наиболее выраженные резонансные поглощения для всех трех молекул на моде асимметричных N–H (амидные A) [21] колебаний наблюдались при облучении на основной гармонике на частоте 100 ТГц, или 3333 см<sup>-1</sup> (см. рис. 4,*e*; 5,*e*; 6,*e* и табл. 2). В случаях, представленных на рис. 4,*f*; 5,*f*; 6,*f*, на частоте 125 ТГц, или 4167 см<sup>-1</sup> (см. табл. 2) наблюдались нерезонансные возбуждения, распределенные по всему спектру мод, причем повышения энергии колебаний на частоте облучения не происходило, но появлялись пики колебаний на соседних частотах, где свободные колебания не были представлены.

#### Заключение

На основе суперкомпьютерной молекулярной динамики построены амплитудновременные реализации интегрального ЭДМ при наложении электрического поля ТГци ИК-диапазонов спектра. Путем Фурье-преобразования этих реализаций вычислены частотные спектры вынужденных локальных колебаний глицина, триптофана и дифенилаланина в вакууме и в водно-солевом окружении, а также параметры переходных динамических процессов во внешнем высокочастотном электромагнитном поле. Выявлен режим вынужденных колебаний, близких к резонансным, установлены пороговые значения поля, в котором происходит переход в нелинейный режим. С помощью теории вынужденных колебаний в линейном резонансном режиме вычислены значения добротности осцилляторов и полосы частот колебаний на различных нормальных модах. Резонансные и полосовые по частоте эффекты молекулярных распределенных и локальных осцилляторов в электрическом поле, выявленные при компьютерном моделировании, расширяют представления о динамике атомных групп в структурах аминокислот. В результате получен широкий набор сценариев вынужденных колебаний, демонстрирующий в деталях многообразную динамику молекул аминокислот и дополняющий известные данные, в том числе ТГц- и ИК-спектроскопии.

Разработанная методика и полученные результаты будут полезны при создании нанобиотехнологий, биоэлектронных и гетерогенных гибридных микроэлектронных приборов с встроенными биомолекулярными компонентами.

Апробированный программный комплекс представляется возможным использовать для суперкомпьютерного вычисления более сложных и представительных молекулярных сценариев, например внутренних колебаний в молекулярных кластерах и кристаллах.

Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (www.scc.spbstu.ru).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mohamed M. E., Mohammed A. M. A. Experimental and computational vibration study of amino acids // International Letters of Chemistry, Physics and Astronomy. 2013. Vol. 15. No. 1. Pp. 1–17.

2. **Barth A.** The infrared absorption of amino acid side chains // Progress in Biophysics and Molecular Biology. 2000. Vol. 74. No. 3–5. Pp. 141–173.

3. Matei A., Drichko N., Compf B., Dressel M. Far-infrared spectra of amino acids // Chemical Physics. 2005. Vol. 316. No. 1–3. Pp. 61–71.

4. Barth A., Zscherp C. What vibrations tell us about proteins // Quarterly Reviews of Biophysics. 2002. Vol. 35. No. 4. Pp. 369–430.

5. Bostick C. D., Mukhopadhyay S., Pecht I., Sheves M., Cahen D., Lederman D. Protein bioelectronics: A review of what we do and do not know // Reports on Progress in Physics. 2018. Vol. 81. No. 2. P. 026601.

6. Amdursky N., Głowacki E.D., Meredith P. Macroscale biomolecular electronics and ionics // Advanced Materials. 2019. Vol. 31. No. 3. P. 1802221.

7. Zhang Q., Shao D., Xu P., Jiang Zh. Effects of an electric field on the conformational transition of the protein: Pulsed and oscillating electric fields with different frequencies // Polymers (Basel). 2022. Vol. 14. No. 1. P. 123.

8. Yi W., Yu J., Xu Y., Wang F., Yu Q., Sun H., Xu L., Liu Y., Jiang L. Broadband terahertz spectroscopy of amino acids // Instrumentation Science & Technology. 2017. Vol. 45. No. 4. Pp. 423–439.

9. Mancini T., Mosetti R., Marcelli A., Petrarka M., Lupi S., D'Arco A. Terahertz spectroscopic analysis in protein dynamics: Current status // Radiation. 2022. Vol. 2. No. 1. Pp. 100–123.

10. Seo M., Park H. R. Terahertz biochemical molecule-specific sensors // Advanced Optical Materials. 2020. Vol. 8. No. 3. P. 1900662.

11. Wu B., Yang Y., Ying Ch., Liu H., Zhang P., Wang H. Application of terahertz spectroscopy in THDCPD isomers detection // Journal of Applied Optics. 2020. Vol. 41. No. 4. Pp. 786–790.

12. Wang H., Schütte Ch., Ciccotti G., Delle Site L. Exploring the conformational dynamics of alanine dipeptide in solution subjected to an external electric field: A nonequilibrium molecular dynamics simulation // Journal of Chemical Theory and Computation. 2014. Vol. 10. No. 4. Pp. 1376–1386.

13. Zhang F., Tominaga K., Hayashi M., Wang H-W. Low-frequency vibration study of amino acids using terahertz spectroscopy and solid-state density functional theory // Zhang F., Zhang Xi-Ch., Tani M. (Eds.). Infrared, Millimeter-Wave, and Terahertz Technologies III. Proceedings of SPIE. Vol. 9275. 11 November, 2014. P. 92750D. Washington, USA, 2014.

14. Wang B., Qin X., Meng K., Zhu L., Li Z. Classification of amino acids using hybrid terahertz spectrum and an efficient channel attention convolutional neural network // Nanomaterials. 2022. Vol. 12. No. 12. P. 2114.

15. Solomentsev G. Y., English N. J., Mooney D. A. Effects of external electromagnetic fields on the conformational sampling of a short alanine peptide // Journal of Computational Chemistry. 2012. Vol. 33. No. 9. Pp. 917–923.

16. **Moon J. H., Oh J. Y., Kim M. S.** A systematic and efficient method to estimate the vibrational frequencies of linear peptide and protein ions with any amino acid sequence for the calculation of Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus rate constant // Journal of the American Society for Mass Spectrometry. 2006. Vol. 17. No. 12. Pp. 1749–1757.

17. Баранов М. А., Непомнящая Э. К., Цыбин О. Ю. Фурье-спектр интегрального дипольного момента суперкомпьютерных моделей ряда аминокислот // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 4. С. 55–68.

18. Jeong S.-Y., Cheon H., Lee D., Son J.-H. Determining terahertz resonant peaks of biomolecules in aqueous environment // Optics Express. 2020. Vol. 28. No. 3. Pp. 3854–3863.

19. English N. J. Molecular simulation of external electric fields on the crystal state: A perspective // Crystals. 2021. Vol. 11. No. 11. P. 1405.

20. English N. J., Waldron C. J. Perspectives on external electric fields in molecular simulation: Progress, prospects and challenges // Physical Chemistry, Chemical Physics. 2015. Vol. 17. No. 19. Pp. 12407–12440.

21. Непомнящая Э. К., Баранов М. А., Цыбин О. Ю. Компьютерная резонансная динамика молекулы глицина в электрическом поле инфракрасного диапазона // Письма в Журнал технической физики. 2023. Т. 49. № 7. С. 8–11.

22. Reale R., English N. J., Marracino P., Liberty M., Apollonio F. Dipolar response and hydrogenbond kinetics in liquid water in square-wave time-varying electric fields // Molecular Physics. 2014. Vol. 112. No. 14. Pp. 1870–1878.

23. Wang W.-N., Li H.-Q., Zhang Y., Zhang C.-L. Correlations between terahertz spectra and molecular structures of 20 standard  $\alpha$ -amino acids // Acta Physico-Chimica Sinica. 2009. Vol. 25. No. 10. Pp. 2074–2079.

24. **Ma X.-J., Zhao H.-W., Dai B., Ge M.** Progress in application of THz-TDS to protein study // Guang Pu Xue Yu, Guang Pu Fen Xi [Spectroscopy and Spectral Analysis]. 2008. Vol. 28. No. 10. Pp. 2237–2242 (in Chinese).

25. Miyamaru F., Yamaguchi M., Tani M., Hangyo M., Yamamoto K., Tominaga K. THz-timedomain spectroscopy of amino acids in solid phase // OSA Trends in Optics and Photonics Series. 2003. Vol. 88. Pp. 96–97. 26. Özer Z., Gök S., Altan H., Severcan F. Concentration-based measurement studies of L-tryptophan using terahertz time-domain spectroscopy (THz-TDS) // Applied Spectroscopy. 2014. Vol. 68. No. 1. Pp. 95–100.

27. Shi Y., Wang L. Collective vibrational spectra of  $\alpha$ - and  $\gamma$ -glycine studied by terahertz and Raman spectroscopy // Journal of Physics. D. Applied Physics. 2005. Vol. 38. No. 19. Pp. 3741–3745.

28. Yi W., Yu J., Xu Y., Wang F., Yu Q., Sun H., Xu L., Liu Y., Jiang L. Broadband terahertz spectroscopy of amino acids // Instrumentation Science and Technology. 2017. Vol. 45. No. 4. Pp. 423–439.

29. Wolpert M., Hellwig P. Infrared spectra and molar absorption coefficients of the 20 alpha amino acids in aqueous solutions in the spectral range from 1800 to 500 cm<sup>-1</sup> // Spectrochimica Acta. Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. 2006. Vol. 64. No. 4. Pp. 987–1001.

30. Itoh K., Ikeda A., Iwamoto T., Nishizawa S. DFT calculation analysis of terahertz time-domain spectra of polyalanines // Journal of Molecular Structure. 2011. Vol. 1006. No. 1–3. Pp. 52–58.

#### REFERENCES

1. Mohamed M. E., Mohammed A. M. A., Experimental and computational vibration study of amino acids, Int. Lett. Chem. Phys. Astron. 15 (1) (2013) 1–17.

2. Barth A., The infrared absorption of amino acid side chains, Prog. Biophys. Mol. Biol. 74 (3-5) (2000) 141–173.

3. Matei A., Drichko N., Compf B., Dressel M., Far-infrared spectra of amino acids, Chem. Phys. 316 (1-3) (2005) 61-71.

4. Barth A., Zscherp C., What vibrations tell us about proteins, Q. Rev. Biophys. 35 (4) (2002) 369–430.

5. Bostick C. D., Mukhopadhyay S., Pecht I., et al., Protein bioelectronics: A review of what we do and do not know, Rep. Prog. Phys. 81 (2) (2018) 026601.

6. Amdursky N., Glowacki E.D., Meredith P., Macroscale biomolecular electronics and ionics, Adv. Mater. 31 (3) (2019) 1802221.

7. Zhang Q., Shao D., Xu P., Jiang Zh., Effects of an electric field on the conformational transition of the protein: Pulsed and oscillating electric fields with different frequencies, Polymers (Basel). 14 (1) (2022) 123.

8. Yi W., Yu J., Xu Y., et al., Broadband terahertz spectroscopy of amino acids, Instrum. Sci. Technol. 45 (4) (2017) 423-439.

9. Mancini T., Mosetti R., Marcelli A., et al., Terahertz spectroscopic analysis in protein dynamics: Current status, Radiation. 2 (1) (2022) 100–123.

10. Seo M., Park H. R., Terahertz biochemical molecule-specific sensors, Adv. Opt. Mater. 8 (3) (2020) 1900662.

11. Wu B., Yang Y., Ying Ch., et al., Application of terahertz spectroscopy in THDCPD isomers detection, J. Appl. Opt. 41 (4) (2020) 786–790.

12. Wang H., Schütte Ch., Ciccotti G., Delle Site L., Exploring the conformational dynamics of alanine dipeptide in solution subjected to an external electric field: A nonequilibrium molecular dynamics simulation, J. Chem. Theory Comp. 10 (4) (2014) 1376–1386.

13. Zhang F., Tominaga K., Hayashi M., Wang H-W., Low-frequency vibration study of amino acids using terahertz spectroscopy and solid-state density functional theory, In book: Zhang F., Zhang Xi-Ch., Tani M. (Eds.). Infrared, Millimeter-Wave, and Terahertz Technologies III, Proc. SPIE. Vol. 9275. 11 Nov. 2014. P. 92750D. Washington, USA, 2014.

14. Wang B., Qin X., Meng K., et al., Classification of amino acids using hybrid terahertz spectrum and an efficient channel attention convolutional neural network, Nanomater. 12 (12) (2022) 2114.

15. Solomentsev G. Y., English N. J., Mooney D. A., Effects of external electromagnetic fields on the conformational sampling of a short alanine peptide, J. Comput. Chem. 33 (9) (2012) 917–923.

16. Moon J. H., Oh J. Y., Kim M. S., A systematic and efficient method to estimate the vibrational frequencies of linear peptide and protein ions with any amino acid sequence for the calculation of Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus rate constant, J. Am. Soc. Mass Spectrom. 17 (12) (2006) 1749–1757.

17. Baranov M. A., Nepomnyashchaya E. K., Tsybin O. Yu., Fourier spectrum of the integral dipole moment of a number of amino acids supercomputer models, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (4) (2022) 55–68. (in Russian)

18. Jeong S.-Y., Cheon H., Lee D., Son J.-H., Determining terahertz resonant peaks of biomolecules in aqueous environment, Opt. Express. 28 (3) (2020) 3854–3863.

19. English N. J., Molecular simulation of external electric fields on the crystal state: A perspective, Crystals. 11 (11) (2021) 1405.

20. English N. J., Waldron C. J., Perspectives on external electric fields in molecular simulation: Progress, prospects and challenges, Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (19) (2015) 12407–12440.

21. Nepomnyashchaya E. K., Baranov M. A., Tsybin O. Yu., Computer resonance dynamics of a glycine molecule in an infrared electric field, Pisma v ZhTF. 49 (7) (2023) 8–11 (in Russian).

22. Reale R., English N. J., Marracino P., et al., Dipolar response and hydrogen-bond kinetics in liquid water in square-wave time-varying electric fields, Mol. Phys. 112 (14) (2014) 1870–1878.

23. Wang W.-N., Li H.-Q., Zhang Y., Zhang C.-L., Correlations between terahertz spectra and molecular structures of 20 standard  $\alpha$ -amino acids, Acta Phys.-Chim. Sin. 25 (10) (2009) 2074–2079.

24. Ma X.-J., Zhao H.-W., Dai B., Ge M., Progress in application of THz-TDS to protein study, Guang Pu Xue Yu, Guang Pu Fen Xi [Spectrosc. Spectr. Anal]. 28 (10) (2008) 2237–2242 (in Chinese).

25. Miyamaru F., Yamaguchi M., Tani M., et al., THz-time-domain spectroscopy of amino acids in solid phase, OSA Trends Opt. Photon. Series. 88 (2003) 96–97.

26. Özer Z., Gök S., Altan H., Severcan F., Concentration-based measurement studies of L-tryptophan using terahertz time-domain spectroscopy (THz-TDS), Appl. Spectrosc. 68 (1) (2014) 95–100.

27. Shi Y., Wang L., Collective vibrational spectra of  $\alpha$ - and  $\gamma$ -glycine studied by terahertz and Raman spectroscopy, J. Phys. D. Appl. Phys. 38 (19) (2005) 3741–3745.

28. Yi W., Yu J., Xu Y., et al., Broadband terahertz spectroscopy of amino acids, Instrum. Sci. Technol. 45 (4) (2017) 423–439.

29. Wolpert M., Hellwig P., Infrared spectra and molar absorption coefficients of the 20 alpha amino acids in aqueous solutions in the spectral range from 1800 to 500 cm<sup>-1</sup>, Spectrochim. Acta. Part A. Mol. Biomol. Spectrosc. 64 (4) (2006) 987–1001.

30. Itoh K., Ikeda A., Iwamoto T., Nishizawa S., DFT calculation analysis of terahertz time-domain spectra of polyalanines, J. Mol. Struct. 1006 (1–3) (2011) 52–58.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БАРАНОВ Максим Александрович — ассистент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 baranovma1993@gmail.com ORCID: 0000-0003-4555-0009

**КАРСЕЕВА Элина Константиновна** — кандидат технических наук, ассистент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 elina.nep@gmail.com ORCID: 0000-0002-4416-9380

ЦЫБИН Олег Юрьевич — 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 oleg.tsybin@gmail.com ORCID: 0000-0002-8308-059X

#### THE AUTHORS

# BARANOV Maksim A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia baranovma1993@gmail.com ORCID: 0000-0003-4555-0009

#### KARSEEVA Elina K.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia elina.nep@gmail.com ORCID: 0000-0002-4416-9380

#### **TSYBIN Oleg Yu.**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia oleg.tsybin@gmail.com ORCID: 0000-0002-8308-059X

Статья поступила в редакцию 20.03.2023. Одобрена после рецензирования 07.06.2023. Принята 07.06.2023. Received 20.03.2023. Approved after reviewing 07.06.2023. Accepted 07.06.2023.
# Физическое материаловедение

Научная статья УДК 539.3, 678.01 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16307

# ОПТИМИЗАЦИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ С УЧЕТОМ ОГРАНИЧЕНИЙ НА ИХ СВОЙСТВА

### А.И.Грищенко<sup>1,2</sup>, И.А.Игнатович<sup>1</sup>, О.Л. Петросян<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия;

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

#### Санкт-Петербург, Россия

<sup>⊠</sup> gai-gr@yandex.ru

Аннотация. Предложен подход к оптимизации микроструктуры композиционных материалов с учетом накладываемых ограничений на их свойства. Подход основан на применении методов условной оптимизации. Определение эффективных упругих свойств осуществлялось с помощью метода конечно-элементной гомогенизации. Методами искусственного интеллекта выполнена оптимизация дисперсно-армированного композита с шарообразными включениями с ограничениями на коэффициент теплопроводности и модуль упругости материала на макроуровне.

**Ключевые слова:** композиционный материал, гомогенизация, метод конечных элементов, условная оптимизация, метод искусственного интеллекта

Финансирование. Исследование выполнено в рамках проекта ID 94062114 Санкт-Петербургского государственного университета.

Для цитирования: Грищенко А. И., Игнатович И. А., Петросян О. Л. Оптимизация микроструктуры композиционных материалов с учетом ограничений на их свойства // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 73–86. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16307

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.16307

### OPTIMIZATION OF THE MICROSTRUCTURE OF COMPOSITE MATERIALS TAKING INTO ACCOUNT THE CONSTRAINTS ON THEIR PROPERTIES

#### A. I. Grishchenko<sup>1, 2</sup>, I. A. Ignatovich<sup>1</sup>, O. L. Petrosian<sup>1</sup>

<sup>1</sup> St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia;

<sup>2</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

#### <sup>⊠</sup> gai-gr@yandex.ru

**Abstract.** In the paper, an approach to optimizing the microstructure of composite materials under given restrictions on its properties has been put forward. The approach is based on the application of conditional optimization methods. The effective elastic properties were determined using the finite element homogenization procedure. As an example, the fiber-reinforced composite with ball-shaped inclusions was optimized taking into account the limitations on its thermal conductivity and elastic modulus at macro level using artificial intellect methods.

© Грищенко А. И., Игнатович И. А., Петросян О. Л., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

**Keywords:** composite material, homogenization, finite element method, conditional optimization, artificial intellect method

**Funding:** The reported study was carried out within the framework of the project ID 94062114 of St. Petersburg State University.

**For citation:** Grishchenko A. I., Ignatovich I. A., Petrosian O. L., Optimization of the microstructure of composite materials taking into account the constraints on their properties, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 73–86. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16307

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

#### Введение

Композиционные материалы находят применение практически во всех областях деятельности человека. Многообразие материалов, представляющих собой отдельные компоненты современных композитов, применяемых в производстве, а также огромное число их возможных комбинаций в совокупности с широкими технологическими возможностями по созданию различных вариантов топологии структуры, позволяют создавать материалы с уникальными свойствами, зачастую превосходящими таковые у традиционных материалов. Широкие возможности по выбору компонентов, их объемного соотношения и вариантов структуры композиционных материалов делают актуальной задачу разработки и создания композитов с оптимальными свойствами.

Примером таких задач может служить разработка новых материалов для тепловой защиты аэрокосмических аппаратов, которые одновременно должны иметь высокие теплопрочностные свойства, низкую теплопроводность и плотность. Другой яркий пример — это композиционные электроизолирующие материалы. Диэлектрические материалы для систем электрической изоляции современных высоковольтных электрических машин должны обладать практически взаимоисключающими свойствами: высокой электроизоляционной способностью и одновременно высокой теплопроводностью.

В современной промышленности широкое применение нашло введение в полимерное связующее вещество дисперсных частиц с высокой теплопроводностью, например оксида алюминия Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> или нитрида бора BN. Таким образом, можно поставить задачу условной оптимизации: подобрать концентрацию дисперсных включений, которая бы обеспечивала максимальную теплопроводность композита при ограничениях на его электроизоляционные свойства.

Целью настоящего исследования является разработка методов проектирования оптимальной микроструктуры композиционных материалов с учетом накладываемых ограничений на их свойства.

#### Определение эффективных свойств композиционных материалов

Наиболее достоверные данные о механических, теплофизических, диффузионных свойствах, электропроводности и других характеристиках композиционных материалов дают лабораторные исследования. Однако практически неограниченное число возможных комбинаций компонентов в совокупности с дороговизной испытаний приводят к необходимости использования аналитических или численных оценок эффективных свойств композитов.

Аналитическую оценку упругих свойств можно получить, основываясь на простейшие оценки А. Ройсса [4] или В. Фойгта [5]; некоторые подходы базируются на решениях задачи Эшелби [6 – 8] об эллиптическом включении в бесконечную однородную упругую среду. Вариационные оценки упругих свойств были получены Цви Хашином и С. Штрикманом [9 – 11], нельзя также не отметить широкое развитие методов асимптотического осреднения [1, 11 – 13].

Теплопроводность и диффузионные свойства материалов можно оценить на основе

© Grishchenko A. I., Ignatovich I. A., Petrosian O. L., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

подходов, предложенных Дж. Максвеллом [14], лордом Дж. Рэлеем [15], Д. Бруггерманом [16], Т. Мори и К. Тонакой [7], а также другими исследователями [16 – 23]. Основным недостатком аналитических оценок следует считать их низкую точность для композитов со сложной топологией.

Одним из наиболее распространенных методов определения эффективных свойств является конечно-элементная (КЭ) гомогенизация [8, 24, 25]. В основе данного метода лежит концепция существования элементарного представительного объема (ЭПО, англ. ERV), содержащего всю статистическую информацию относительно распределения и морфологии неоднородностей материала. ЭПО материала можно вводить при условиях статически однородного распределения характеристик материала и сепарабельности масштабов неоднородностей. На рис. 1. представлены примеры ЭПО для различных типов полимерных композиционных материалов.



Рис. 1. Примеры ЭПО для различных типов полимерных композиционных материалов: дисперсно-армированный (a - c), однонаправленный волокнистый (d) и тканный (e)

Конечно-элементное (КЭ) моделирование процессов деформирования, теплопередачи, диффузии и других процессов применительно к ЭПО позволяет решать две основные залачи:

определять эффективные свойства ЭПО композиционного материала (задача гомогенизации);

получать экстремальные значения полей напряжений гетерогенного ЭПО в целях последующего анализа прочности (задача гетерогенизации).

В основе применяемого в расчетах КЭ-программного комплекса PANTOCRATOR [26] для решения краевых задач теории упругости используется уравнение виртуальных работ:

$$\int_{V} \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{\varepsilon} dV = \int_{V} \mathbf{f}_{V} \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_{S_{\boldsymbol{\sigma}}} \mathbf{f}_{S} \cdot \delta \mathbf{u} dS, \qquad (1)$$

где  $\delta \boldsymbol{\varepsilon} = (\nabla \delta \mathbf{u})^s$ ;  $\mathbf{f}_v$ ,  $\mathbf{f}_s$  – заданные объемные и поверхностные силы. С помощью уравнения (1) можно получить уравнения равновесия  $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_v = 0$  в объеме и статические (силовые) граничные условия  $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}|_{S_{\sigma}} = \mathbf{f}_s$ .

Для решения стационарных задач теплопроводности используется следующая вариационная формулировка:

$$\int_{V} \left[ \nabla \cdot (\mathbf{K} \cdot \nabla T) + q_{v} \right] \delta T dV =$$

$$= \int_{S_{\Pi}} \left[ n \cdot (\mathbf{K} \cdot \nabla T) + q_{s} \right] \delta T dS + \int_{S_{\Pi}} \left[ n \cdot (\mathbf{K} \cdot \nabla T) + a_{s} \left( T - T_{\infty} \right) \right] \delta T dS,$$
(2)

где  $q_v$ ,  $q_s$  — объемная и поверхностная плотности теплового потока, соответственно; К — тензор коэффициентов теплопроводности;  $S_{II}$ ,  $S_{III}$  — площади поверхностей, на которых заданы граничные условия второго (условие Неймана) и третьего (условие Коши) рода, соответственно.

Использование уравнения (2) позволяет получить уравнение теплопроводности

$$n \cdot (\mathbf{K} \cdot \nabla T) + q_s = 0$$

и естественные граничные условия Неймана и Коши:

$$-n\cdot (\mathbf{K}\cdot\nabla T) = q_{S}, \ -n\cdot (\mathbf{K}\cdot\nabla T) = a_{S}(T-T_{\infty}).$$

Для определения напряженно-деформированного состояния, соответствующего гомогенизированному материалу, использовались осредненные по представительному объему значения тензоров деформаций и напряжений, полученных в КЭ решении:

$$\overline{\mathbf{\varepsilon}} = \frac{1}{V_{\text{EVR}}} \int_{V_{\text{EVR}}} \mathbf{\varepsilon} \, dV, \tag{3}$$

$$\overline{\mathbf{\sigma}} = \frac{1}{V_{\text{EVR}}} \int_{V_{\text{EVR}}} \mathbf{\sigma} \, dV. \tag{4}$$

Эффективные свойства гомогенизированного материала принимались соответствующими ортотропному упругому материалу, для которого закон Гука можно записать в следующем виде:

$$\overline{\mathbf{\varepsilon}} = {}^{4}\overline{\mathbf{C}} \cdot \cdot \overline{\mathbf{\sigma}},\tag{5}$$

где  ${}^{4}\overline{C}$  — тензор упругих податливостей 4-го ранга, имеющий для ортотропного материала следующий вид (в собственных осях ортотропии):

$$\begin{bmatrix} \overline{\mathbf{C}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\overline{E}_{1}} & -\frac{\overline{\mathbf{v}}_{21}}{\overline{E}_{2}} & -\frac{\overline{\mathbf{v}}_{31}}{\overline{E}_{3}} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\overline{\mathbf{v}}_{12}}{\overline{E}_{1}} & \frac{1}{\overline{E}_{2}} & -\frac{\overline{\mathbf{v}}_{32}}{\overline{E}_{3}} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\overline{\mathbf{v}}_{13}}{\overline{E}_{1}} & -\frac{\overline{\mathbf{v}}_{23}}{\overline{E}_{2}} & \frac{1}{\overline{E}_{3}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\overline{G}_{12}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\overline{G}_{23}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\overline{G}_{31}} \end{bmatrix},$$

$$(6)$$

причем  $\frac{\overline{v}_{12}}{\overline{E}_1} = \frac{\overline{v}_{21}}{\overline{E}_2}, \quad \frac{\overline{v}_{13}}{\overline{E}_1} = \frac{\overline{v}_{31}}{\overline{E}_3}, \quad \frac{\overline{v}_{23}}{\overline{E}_2} = \frac{\overline{v}_{32}}{\overline{E}_3}.$ 

Эффективные коэффициенты теплопроводности определяются на основе закона Фурье, который для гомогенизированного материала записывается как

где  $\overline{\mathbf{q}} = -\frac{1}{V_{\text{ERV}}} \int_{V_{\text{ERV}}} \mathbf{K} \cdot \nabla T dV$  — вектор теплового потока, осредненный по объему;

 $\overline{\nabla T} = \frac{1}{V_{\text{ERV}}} \int_{V_{\text{ERV}}} \nabla T dV = \frac{1}{V_{\text{ERV}}} \int_{S_{\text{ERV}}} \mathbf{n} T dS$  – осредненный градиент температуры. Тензор коэффициентов теплопроводности  $\overline{\mathbf{K}}$  для ортотропного материала имеет вид

$$\overline{\mathbf{K}} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0\\ 0 & \overline{\lambda}_2 & 0\\ 0 & 0 & \overline{\lambda}_3 \end{bmatrix}.$$
(8)

Для определения эффективных упругих свойств гетерогенного материала можно использовать три вида граничных условий:

кинематические -

$$\mathbf{u}\big|_{S_u} = \overline{\mathbf{\epsilon}}^* \cdot \mathbf{r},\tag{9}$$

статические -

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \Big|_{S_{-}} = \mathbf{n} \cdot \overline{\boldsymbol{\sigma}}^* = \mathbf{f}_{S} \tag{10}$$

и условия периодичности -

$$\mathbf{u}\big|_{S_{u_1}} = \mathbf{u}\big|_{S_{u_2}} + \overline{\mathbf{\varepsilon}}^* \cdot \big(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\big), \tag{11}$$

где **u** – вектор перемещений; **r** – радиус-вектор;  $\overline{\epsilon}^*, \overline{\sigma}^*$  – заданные постоянные симметричные тензоры, соответствующие различным деформируемым состояниям (осевые растяжения/сжатия и сдвиги) и различным напряженным состояниям (осевые растяжения/сжатия и сдвиги), соответственно.

В работах [8, 27, 28] установлено, что при использовании условий периодичности (11) удовлетворительная точность достигается при использовании ЭПО, которые включают меньшее количество (в 2 - 4 раза) ячеек периодичности, чем при использовании граничных условий (9), (10).

Для определения эффективных коэффициентов теплопроводности использовались граничные условия первого рода (условие Дирихле):

$$T|_{S_1} = T_1^*, T|_{S_2} = T_2^*,$$
 (12)

где  $S_1, S_2$  — поверхности ЭПО, на которых заданы значения температуры  $T_1^*$  и  $T_2^*$ , причем  $T_1^* \neq T_2^*$ .

Предполагается, что на границе раздела отдельных компонентов композиционного материала выполняется условие идеального механического и теплового контакта:

$$\mathbf{u}^{(i)} = \mathbf{u}^{(j)}; \, \mathbf{n}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(i)} = \mathbf{n}^{(j)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(j)}, \tag{13}$$

$$T^{(i)} = T^{(j)}; \mathbf{n}^{(i)} \cdot \left( \mathbf{K} \cdot \nabla T^{(i)} \right) = -\mathbf{n}^{(j)} \cdot \left( \mathbf{K} \cdot \nabla T^{(j)} \right),$$
(14)

где верхним индексом (i) отмечены величины, относящиеся к одному компоненту, а индексом (j) – к другому.

#### Постановка задачи оптимизации

В общем случае рассматривается композиционный материал, состоящий из матрицы и включений, содержащий N различных материалов. В линейной постановке каждый из материалов характеризуется <u>упруг</u>ими свойствами  ${}^{4}C_{i}$ , плотностью  $\rho_{i}$ , теплопроводностью  $\mathbf{K}_i$ и имеет объем  $V_i$ , где i = 1, N + 1. Аналогично можно рассматривать и другие характеристики, такие как прочностные, коэффициент диффузии, диэлектрическую проницаемость, удельное сопротивление и т. п. Каждую из перечисленных характеристик можно рассматривать как в качестве целевой функции оптимизируемого материала, так и в качестве накладываемых ограничений.

Для определенности рассмотрим задачу минимизации массы композиционного материала с заданной топологией микроструктуры, при ограничениях на значения модуля Юнга и коэффициента теплопроводности вдоль одной из осей ортотропии:

$$M = \sum_{i=1}^{N+1} \rho_i V_i \to \min,$$
(15)

$$\overline{E}_1(c_i) \ge E, \ \overline{K}_1(c_i) \le K, \tag{16}$$

где  $c_i = V_i / V$  – объемные доли *i*-й фазы.

Такая задача может возникнуть, например, при проектировании консоли заданной геометрии с ограничением на максимальный прогиб или на частоту собственных колебаний, на которую планируется установка чувствительного к температуре датчика. Другие задачи оптимизации ставятся аналогичным образом.

Сведение задачи безусловной минимизации функционала (15) к задаче об условной минимизации с учетом ограничений (16) можно осуществить одним из методов искусственного интеллекта [29, 30]. Приведем их идеи.

Метод множителей Лагранжа:

$$L = \sum_{i=1}^{N+1} \rho_i c_i V + \lambda_1 \left[ E - \overline{E}_1(c_i) \right] + \lambda_2 \left[ \overline{K}_1(c_i) - K \right] \rightarrow \min,$$
(17)

где  $\lambda_1, \lambda_2$  — множители Лагранжа.

Метод штрафных функций:

$$Q_{k}(c_{i}) = \sum_{i=1}^{N+1} \rho_{i} c_{i} V + r_{1}^{k} g_{1} \left( E - \overline{E}_{1}(c_{i}) \right) + r_{2}^{k} g_{2} \left( \overline{K}_{1}(c_{i}) - K \right) \to \min,$$
(18)

где  $r_1^k$ ,  $r_2^k$  – коэффициенты метода штрафных функций;  $g_1(E - \overline{E}_1(c_i))$ ,  $g_2(\overline{K}_1(c_i) - K) -$  штрафные функции.

Отдельно упоминания требует семейство генетических алгоритмов оптимизации, позволяющих получать оптимальное решение без априорной информации о поведении целевой функции [31].

Выбор метода оптимизации является нетривиальной задачей. Так, при известных зависимостях целевой функции и ограничений от параметров системы, в отдельных случаях метод множителей Лагранжа позволяет получать аналитическое решение задачи условной оптимизации. Что касается широко распространенного класса методов штрафных функций, то его применение может приводить к «овражистости» рельефа минимизируемого функционала. Широкий класс задач позволяет решать метод Недлера — Мида [32, 33], не требующий взятия производных. Наиболее же универсальными можно считать генетические алгоритмы. Однако, несмотря на многообразие методов оптимизации, в произвольном случае ни один из алгоритмов не гарантирует нахождение глобального экстремума.

# Оптимизация дисперсно-армированного композита с шарообразными включениями

Рассмотрим задачу минимизации массы дисперсно-армированного композита с шарообразными включениями (рис. 1, a - c). В силу симметрии и стохастического расположения включений в матрице, результирующие макросвойства материала можно считать изотропными с высокой степенью достоверности.

Важной задачей является выбор ЭПО, адекватно отражающего структуру и свойства рассматриваемого композиционного материала. В случае материалов с хаотично распложенными включениями можно рассматривать регуляризованные модели ЭПО. В противном случае, а именно — для материалов с непериодической структурой, следует рассматривать стохастическую задачу с последующей статической обработкой результатов, что существенно повышает трудоемкость и времязатратность определения эффективных свойств. В работе [34] показано, что для случая однонаправленных волокнистых композиционных материалов максимальные различия между упругими свойствами регуляризованной модели и модели со случайным расположением армирующих волокон не превышают 10 %.

Если исходить из условия эквивалентности свойств регуляризованной модели и реального дисперсно-армированного композита, то соответствующий ему ЭПО должен обладать следующими свойствами:

объемная доля включений в ЭПО должна совпадать с их концентраций в реальном материале;

структура ЭПО должна иметь свойства центральной симметрии.

В случае с дисперсно-армированным композиционным материалом можно рассмотреть три приближения для ЭПО: с единичным включением (см. рис. 1,*a*), объемно-центрированный кубический (см. рис. 1,*b*) и гранецентрированный кубический (см. рис. 1,*c*) В данном случае, с точки зрении изотропии эффективных свойств, наиболее адекватной моделью будет гранецентрированный кубический ЭПО, однако его использование приведет к существенно большим вычислительным затратам, по сравнению с ЭПО с единичным включением, поэтому для решения задачи оптимизации микроструктуры рассматривался ЭПО с единичным включением.

На рис. 2 представлены варианты КЭ моделей ЭПО с различной объемной долей включения. В расчетах использовали трехмерные 20-узловые изопараметрические конечные элементы.



Рис. 2. Варианты конечно-элементных моделей ЭПО с различной объемной долей включения *c* (показана 1/8 часть ЭПО); *c*, %: 5 (*a*), 25 (*b*), 50 (*c*)

Для двухфазных материалов задачу о минимизации массы удобно свести к задаче о минимизации объемной доли наиболее плотной фазы, в данном случае — к минимизации объемной доли включений. Тогда функционал метода Лагранжа (17) запишется в виде

$$L = c + \lambda_1 \left[ E - \overline{E}(c) \right] + \lambda_2 \left[ \overline{\lambda}(c) - \lambda \right] \rightarrow \min.$$
<sup>(19)</sup>

Минимизацию данного функционала можно выполнить различными способами, такими как метод градиентного спуска, метод секущих (конечно-разностная аппроксимация метода Ньютона), алгоритм Левенберга — Марквардта, и многими другими. В данном случае, ввиду гладкости и монотонности зависимости эффективных свойств от объемной доли включений, мы применяли метод последовательной аппроксимации, который заключается в аппроксимации функций-ограничений дифференцируемой функцией. Для нахождения стационарных точек функционала (19) можно организовать итерационную процедуру последовательного вычисления производных, с последующим уточнением коэффициентов аппроксимирующих функций. Такой подход удобен также для поиска начального приближения при использовании других методов. Ввиду линейности постановки, аппроксимационные зависимости модуля Юнга и коэффициента теплопроводности можно найти для широкого класса материалов матрицы и включения путем введения безразмерных параметров

$$e = \frac{E_m}{E_p}, \overline{e} = \frac{\overline{E}}{E_p}$$
  $H \quad l = \frac{\lambda_m}{\lambda_p}, \ \overline{l} = \frac{\overline{\lambda}}{\lambda_p},$ 

где индекс *m* соответствует параметрам материала матрицы, *p* – материалу включения.

На рассматриваемые соотношения налагали требования монотонности во всем диапазоне изменения параметров. Рассмотрены следующие параметры, описывающие исследуемые зависимости:

$$\overline{e}(e,c) = A_E \left[ \exp\left(-B_E e^{C_E}\right) + D_E \right] \left(E_E c^2 + F_E c + 1\right), \tag{20}$$

$$\overline{l}(l,c) = A_{\lambda} \Big[ \exp(-B_{\lambda}l^{C_{\lambda}}) + D_{\lambda} \Big] \Big[ E_{\lambda} (1+G_{\lambda}l)c^{2} + F_{\lambda}c + 1 \Big].$$
<sup>(21)</sup>

Таблица 1

# Значения параметров аппроксимирующих функций в двух уравнениях

Параметр уравнений	Значение параметра в уравнении		
	(20)	(21)	
A	32,40	9,85	
В	0,13	0,23	
С	4,36	2,66	
D	2.10-5	3.10-6	
E	6,69	0,05	
F	0,66	1,17	
G	_	9.00	
Коэффициент корреляции <i>R</i> <sup>2</sup>	0,997	0,998	

Путем многовариантных вычислительных экспериментов была создана база расчетных вариантов значений эффективного модуля Юнга и коэффициента теплопроводности. Параметры моделей (20), (21) были определены при помощи метода наименьших квадратов с применением алгоритма Левенберга — Марквардта. Значения параметров обеих моделей и коэффициентов корреляции  $R^2$  представлены в табл. 1. Видно, что для обеих моделей коэффициент корреляции близок к единице, что свидетельствует об их адекватности. Результаты сравнения исходных данных и их аппроксимации показаны на рис. 3.

Таким образом, в случае заданных параметров материалов матрицы и включения функционал (19), с учетом уравнений (20), (21), запишется в следующем виде:



Рис. 3. Зависимости эффективных модуля Юнга (*a*) и коэффициента теплопроводности (*b*) композиционного материала от отношений  $\bar{e}$  и *l* (см. формулы (20) и (21)), а также от объемной доли включений *c*. Точками представлены данные базы расчетных вариантов

$$L = c + \lambda_1 \left[ E - \overline{A}_E \left( E_E c^2 + F_E c + 1 \right) \right] + \lambda_2 \left[ \overline{A}_\lambda \left( \overline{E}_\lambda c^2 + F_\lambda c + 1 \right) - \lambda \right] \rightarrow \min, \qquad (22)$$

где  $\overline{A}_E, \overline{A}_\lambda$  и  $\overline{E}_\lambda$  – параметры, зависящие от свойств материалов матрицы и включения:

$$\overline{A}_{E} = A_{E} \Big[ \exp \Big( -B_{E} e^{C_{E}} \Big) + D_{E} \Big] E_{p},$$

$$\overline{A}_{\lambda} = A_{\lambda} \Big[ \exp \Big( -B_{\lambda} l^{C_{\lambda}} \Big) + D_{\lambda} \Big] \lambda_{p},$$

$$\overline{E}_{\lambda} = E_{\lambda} \Big( 1 + G_{\lambda} l \Big).$$
(23)

Стационарные точки функционала (22) можно найти из следующих условий:

$$\frac{\partial L}{\partial c} = 1 + \lambda_1 \overline{A}_E \left( 2E_E c + F_E \right) + \lambda_2 \overline{A}_\lambda \left( 2\overline{E}_\lambda c + F_\lambda \right) = 0, 
\frac{\partial L}{\partial \lambda_1} = E - \overline{A}_E \left( E_E c^2 + F_E c + 1 \right) = 0, 
\frac{\partial L}{\partial \lambda_2} = \overline{A}_\lambda \left( \overline{E}_\lambda c^2 + F_\lambda c + 1 \right) - \lambda = 0.$$
(24)

Таблица 2

# Характеристики рассмотренных материалов

Попомотр	Значение параметра		
Параметр	Матрица	Включение	
ρ, кг/м <sup>3</sup>	1100	2600	
<i>Е</i> , ГПа	2,0	70	
ν	0,20	0,35	
λ, Вт/(м·К)	0,7	0,2	

Обозначения:  $\rho$  — плотность, *E* — модуль Юнга,  $\nu$ ,  $\lambda$  — коэффициенты Пуассона и теплопроводности.

Для определенности в качестве материала матрицы рассмотрим кремнийорганическое связующее с материалом включений — стеклом. Характеристики обоих материалов представлены в табл. 2 [29]. В качестве ограничений взяты ограничения на коэффициент теплопроводности  $\lambda$  и модуль Юнга  $E: \lambda \leq 0,3$  Вт / (м · K),  $E \geq 3$  ГПа.

В силу простоты функционала, который следует минимизировать, поиск оптимального соотношения между матрицей и включениями можно проиллюстрировать графически, путем нанесения на один график зависимостей от концентрации включений эффективных значений параметров материала, на которые накладываются ограничения (рис. 4).



Рис. 4. Зависимости эффективных значений коэффициента теплопроводности (кривая синего цвета) и модуля Юнга (кривая красного цвета) от концентрации включений

На основе вышеизложенной оптимизационной процедуры получено оптимальное значение концентрации стеклянных включений в кремнийорганической матрице композита, которое обеспечивает минимальную массу композита при заданных ограничениях; оно составляет 21,3 %.

Важно отметить, что в общем случае нельзя гарантировать существование решения, удовлетворяющего всем накладываемым ограничениям. В таком случае решение можно найти через замену материалов, изменение структуры композита или смягчение накладываемых ограничений.

#### Заключение

В работе представлен и использован подход, позволяющий определять оптимальные параметры композиционных материалов при заданных ограничениях на его свойства. Подход основан на методе конечно-элементной гомогенизации, который позволяет находить эффективные характеристики гетерогенных материалов, а также на методах условной оптимизации. В качестве примера решена задача о минимизации плотности композита, дисперсно-армированного шаровыми включениями, с ограничениями на модуль упругости и коэффициент теплопроводности матрицы и включений. Задача условной оптимизации решалась с использованием метода множителей Лагранжа и метода последовательной аппроксимации. Предложены аппроксимирующие зависимости, адекватно описывающие изменение эффективного коэффициента теплопроводности и модуля Юнга (коэффициент корреляции  $R^2 \ge 0.99$ ).

Разработанный алгоритм можно использовать для многокритериальной оптимизации композиционных материалов с различной топологией армирования и послужить основой для создания базы данных, чтобы обучать нейронные сети. Этот подход и алгоритм позволят ускорить поиск начального приближения задачи оптимизации.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Димитриенко Ю. И., Соколов А. П. Разработка автоматизированной технологии вычисления эффективных упругих характеристик композитов методом асимптотического осреднения // Вестник Московского государственного технического университета им. Н. Э. Баумана. Серия «Естественные науки». 2008. № 2. С. 56–67.

2. Маннанов Э. Р. О диэлектрических материалах с высокой теплопроводностью для систем электрической изоляции высоковольтных электрических машин: обзор отечественной и зарубежной литературы // Материаловедение. Энергетика. 2021. Т. 27. № 4. С. 42–67.

3. **Ngo I. L., Byon C.** Thermal conductivity of particle-filled polymers // Polymer Science Book Series. No. 1: Research advances, practical applications and thermal conductivity of particle-filled polymers. Edited by A. Méndez-Vilas, A. Solano. Badajoz (Spain): Formatex Research Center, 2016. Pp. 554–565.

4. **Reuss A.** Berechnung der Fliessgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle // ZAMM – Journal of Applied Mathematics and Mechanics /Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik. 1929. Vol. 9. No. 1. Pp. 49–58.

5. Voigt W. Über die Beziehung zwischen den beiden Elasticitätsconstanten isotroper Körper // Annalen der Physik. 1889. Vol. 274. No. 12. Pp. 573–587.

6. Эшелби Дж. Определение поля упругих напряжений, создаваемого эллипсоидальным включением, и задачи, связанные с этой проблемой // Сборник переводов статей 1956 – 62 гг. М.: Изд-во иностранной литературы, 1963. 248 с.

7. Mori T., Tanaka K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions // Acta Metallurgica. 1973. Vol. 21. No. 5. Pp. 571–574.

8. Grishchenko A. I., Semenov A. S., Semenov S. G., Melnikov B. E. Influence of structural parameters of the masonry on effective elastic properties and strength // Инженерно-строительный журнал. 2014. № 5 (49). С. 95–106.

9. Hashin Z., Shtrikman S. A variational approach to the theory of elastic behavior of multiphase materials // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1963. Vol. 11. No. 2. Pp. 127–140.

10. Светашков А. А., Куприянов Н. А., Манабаев К. К. Модификации эффективных модулей типа Хашина – Штрикмана для двухкомпонентного изотропного композита // Физическая мезомеханика. 2015. Т. 18. № 6. С. 57–65.

11. Победря Б. Е. Механика композиционных материалов. М.: Изд-во МГУ, 1984. 336 с.

12. Горбачёв В. И. Метод осреднения Бахвалова – Победри в механике композитов // Вестник Московского университета. Серия 1: Математика. Механика. 2016. № 6. С. 41–46.

13. Бахвалов Н. С., Панасенко Г. П. Осреднение процессов в периодических средах. М.: Наука, 1984. 352 с.

14. **Maxwell J. C.** A treatise on electricity and magnetism. Oxford: Oxford University Press, 1904. 435 p.

15. Lord Rayleigh J. S. On the influence of obstacles arranged in rectangular order upon the properties of a medium // The Philosophical Magazine. 1892. Vol. 34. 5-th Series. Pp. 481–502.

16. **Bruggeman D. A. G.** Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen // Annalen der Physik. 1935. Vol. 416. No. 7. Pp. 636–664.

17. Пашковский Д. М., Фролова К. П., Вильчевская Е. Н. Эффективные диффузионные свойства поликристалла // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 154–168.

18. **Barrer R. M.** Diffusion and permeation in heterogeneous media // Diffusion in polymers, Ed. by J. Crank and G. S. Park, Academic Press, London, 1968. 452 p.

19. Bell G. E., Crank J. Influence of imbedded particles on steady-state diffusion // Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions. 1974. Vol. 70. No. 2. Pp. 1259–2732.

20. Meredith R. E., Tobias C. W. Conductivities of emulsions // Journal of the Electrochemical Society. 1961. Vol. 108. No. 3. P. 286.

21. Fricke H. A mathematical treatment of the electric conductivity and capacity of disperse systems. I. The electric conductivity of a suspension of homogeneous spheroids // Physical Review. 1924. Vol. 24. No. 5. Pp. 575–587.

22. Эпов М. И., Терехов М. И., Низовцев М. И., Шурина Э. Л., Иткина Н. Б., Уколов Е. С. Эффективная теплопроводность дисперсных материалов с контрастными включениями // Теплофизика высоких температур. 2015. Т. 53. № 1. С. 48–53.

23. Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н., Савельева И. Ю. Эффективная теплопроводность композита в случае отклонений формы включений от шаровой // Математическое моделирование и численные методы. 2014. № 4. С. 3–17.

24. **Borovkov A. I., Sabadash V. O.** Finite element multiscale homogenization and equential heterogenization of composite structures // Proceedings of 10th International ANSYS'2002 Conference, Pittsburgh, USA, 2002. 15 p.

25. Borovkov A. I., Klich A. E. Computational micromechanics of composites. Finite element homogenization methods. // Appl. Math. Mech. (Z. Angew. Math. Mech. – ZAMM). 1998. Vol. 78. Pp. 295–296.

26. Семенов А. С. PANTOCRATOR — конечно-элементный программный комплекс, ориентированный на решение нелинейных задач механики // Труды V-ой Международной конференции «Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности конструкций». СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2003. С. 466–480.

27. Семенов А. С., Грищенко А. И., Мельников Б. Е. Конечно-элементное моделирование деформирования костной ткани на субмикроскопическом уровне // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2014. № 3 (201) С. 20–34.

28. **Грищенко А. И., Семенов А. С.** Моделирование процессов упругопластического деформирования монокристаллических сплавов // Вестник Пермского политехнического университета. Механика. 2022. № 2. С. 58–72.

29. **Maalawi K.** Introductory chapter: An introduction to the optimization of composite structures // Optimum Composite Structures. Edited by K. Maalawi. IntechOpen. Published November 5-th, 2018.

30. Димитриенко Ю. И., Дроголюб А. Н., Соколов А. П., Шпакова Ю. В. Метод решения задачи оптимизации структуры дисперсно-армированных композитов при ограничениях на тепловые и прочностные свойства // Наука и образование (МГТУ им. Н. Э. Баумана). 2013. № 11. С. 415-430.

31. Hamdia K. M., Zhuang, X., Rabczuk T. An efficient optimization approach for designing machine learning models based on genetic algorithm // Neural Computing and Applications. 2021. Vol. 33. No. 6. Pp. 1923–1933.

32. Nelder J. A., Mead R. A simplex method for function minimization // The Computer Journal. 1965. Vol. 7. No. 4. Pp. 308–313.

33. Гецов Л. Б., Семенов А. С., Голубовский Е. Р., Грищенко А. И., Семенов С. Г. Особенности и единое описание I, II и III стадий ползучести монокристаллических жаропрочных сплавов // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2020. Т. 86. № 3. С. 44–54.

34. Боровков А. И., Алеман Меза Д. Гомогенизация однонаправленных волокнистых и гранулированных упругих композитов // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 2009. № 3 (84) С. 135–153.

#### REFERENCES

1. **Dimitrienko Yu. I., Sokolov A. P.,** Development of automated technology of calculation of effective elastic characteristics of composites by method of asymptotic averaging, Herald of the Bauman Moscow State Techn. Univ. Natur. Sci. (2) (2008) 56–67 (in Russian).

2. Mannanov E. R., About dielectric materials with high thermal conductivity for electrical insulation systems of high-voltage electric machines: a review of domestic and foreign literature, Mater. Sci. Power Eng. 27 (4) (2021) 42–67 (in Russian).

3. Ngo I. L., Byon C., Thermal conductivity of particle-filled polymers, Polymer Science Book Series. No. 1: Research advances, practical applications and educational aspects, Edit. by A. Méndez-Vilas, A. Solano, Formatex Research Center, Badajoz (Spain) (2016) 554–565.

4. Reuss A., Berechnung der Fliessgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle, ZAMM – J. Appl. Math. Mech. /Z. Angew. Math. Mech. 9 (1) (1929) 49–58.

5. **Voigt W.,** Über die Beziehung zwischen den beiden Elasticitgtsconstanten isotroper Körper, Ann. Phys. 274 (12) (1889) 573–587.

6. Eshelby J. D., The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems, Proc. R. Soc. London, Ser. A. 241 (1226) (1957) 376–396.

7. Mori T., Tanaka K., Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions, Acta Metallurg. 21 (5) (1973) 571–574.

8. Grishchenko A. I., Semenov A. S., Semenov S. G., Melnikov B. E., Influence of structural parameters of the masonry on effective elastic properties and strength, Mag. Civ. Eng. 49 (5) (2014) 95–106.

9. Hashin Z., Shtrikman S., A variational approach to the theory of elastic behavior of multiphase materials, J. Mech. Phys. Solids. 11 (2) (1963) 127–140.

10. Svetashkov A. A., Kupriyanov N. A., Manabaev K. K., Modifications of effective moduli Hashin – Strickmann type for two-component isotropic composite, Physical Mesomechanics. 18 (6) (2015) 57–65 (in Russian).

11. **Pobedrya B. E.,** Mechanics of composite materials, Publishing House of Moscow State University, Moscow, 1984 (in Russian).

12. Gorbachev V. I., The homogenization method of Bakhvalov – Pobedrya in the composite mechanics, Moscow Univ. Mech. Bull. 71 (2016) 137–141.

13. **Bakhvalov N. S., Panasenko G. P.,** Homogenization: Averaging processes in periodic media: Mathematical problems in the mechanics of composite materials (Mathematics and its Applications, Vol. 36) Springer, New York, 1989.

14. Maxwell J. C., A treatise on electricity and magnetism, Oxford University Press, Oxford, 1904.

15. Lord Rayleigh J. S., On the influence of obstacles arranged in rectangular order upon the properties of a medium, Philos. Mag. 34 (5) (1892) 481–502.

16. **Bruggeman D. A. G.,** Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen, Ann. Phys. 416 (7) (1935) 636–664.

17. Pashkovsky D. M., Frolova K. P., Vilchevskaya E. N., Effective diffusion properties of a polycrystal, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 154–168 (in Russian).

18. **Barrer R. M.,** Diffusion and permeation in heterogeneous media, In book: Diffusion in polymers, Ed. by J. Crank and G. S. Park, Academic Press, London, 1968.

19. Bell G. E., Crank J., Influence of imbedded particles on steady-state diffusion, J. Chem. Soc. Farad. Trans. 70 (2) (1974) 1259–2732.

20. Meredith R. E., Tobias C. W., Conductivities of emulsions, J. Electrochem. Soc. 108 (3) (1961) 286.

21. Fricke H., A mathematical treatment of the electric conductivity and capacity of disperse systems. I. The electric conductivity of a suspension of homogeneous spheroids, Phys. Rev. 24 (5) (1924) 575–587.

22. Epov M. I., Terekhov V. I., Nizovtsev M. I., et al., Effective thermal conductivity of dispersed materials with contrast inclusions, High Temperature. 53 (1) (2015) 45–50.

23. Zarubin V. S., Kuvyrkin G. N., Savelyeva I. Yu., Effective thermal conductivity of a composite in case of inclusions shape deviations from spherical ones, Mat. Mod. Chisl. Met. (4) (2014) 3–17 (in Russian).

24. Borovkov A. I., Sabadash V. O., Finite element multiscale homogenization and equential heterogenization of composite structures, Proc. 10th Int. ANSYS'2002 Conf., Pittsburgh, USA, 2002.

25. Borovkov A. I., Klich A. E., Computational micromechanics of composites. Finite element homogenization methods, Appl. Math. Mech. (Z. Angew. Math. Mech. – ZAMM). 78 (Suppl. 1) (1998) S295–S296.

26. Semenov A. S., PANTOCRATOR – konechno-elementnyy programmnyy kompleks, oriyentirovannyy na resheniye nelineynykh zadach mekhaniki [PANTOCRATOR – finite-element program specialized on the solution of non-linear problems of solid body mechanics], In: Proc. The V-th Int. Conf. "Scientific and engineering problems of reliability and service life of structures and methods of their decision", St. Petersburg Polytechnical University Publishing, St. Petersburg (2003) 466–480 (in Russian).

27. Semenov A. S., Grishchenko A. I., Melnikov B. E., Finite-element modeling of bone tissue deformation at the submicroscopic level, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (3 (201)) (2014). 20–34 (in Russian).

28. Grishchenko A. I., Semenov A. S., Modeling of the elastoplastic deformation process of single crystal superalloys, PNRPU Mechanics Bulletin. (2) (2022) 58–72 (in Russian).

29. Maalawi K., Introductory chapter: An introduction to the optimization of composite structures, In book: Optimum Composite Structures. Edit. by K. Maalawi. IntechOpen. Publ. Nov. 5-th, 2018.

30. Dimitrienko Yu. I., Drogolyub A. N., Sokolov A.P., Shpakova Yu. V., Metod resheniya zadachi optimizatsii struktury dispersno-armirovannykh kompozitov pri ogranicheniyakh na teplovye i prochnostnye svoistva [Method for solving an optimization problem of the structure of fiber reinforced composites under restrictions on thermal and strength properties], Science and Education (Bauman State Technical University) (11) (2013) 415–430 (in Russian).

31. Hamdia K. M., Zhuang, X., Rabczuk T., An efficient optimization approach for designing machine learning models based on genetic algorithm, Neural Comput. Applic. 33 (6) (2021) 19231933.

32. Nelder J. A., Mead R., A simplex method for function minimization, Comput. J. 7 (4) (1965) 308–313.

33. Getsov L. B., Semenov A. S., Golubovsky E. R., et al., Features and uniform description of I, II, and III stages of the creep in single-crystal superalloys, Industrial Laboratory. Diagnostics of materials. 86 (3) (2020) 44–54 (in Russian).

34. **Borovkov A. I., Aleman Mesa D.,** Homogenization of unidirectional fiber and granular elastic composites, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. (3 (84)) (2009) 135–153 (in Russian).

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ГРИЩЕНКО Алексей Иванович** – научный сотрудник кафедры математического моделирования энергетических систем Санкт-Петербургского государственного университета, инженер лаборатории «Механика материалов» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9 gai-gr@yandex.ru

ORCID: 0000-0001-6029-5670

**ИГНАТОВИЧ Игорь Антонович** — научный сотрудник кафедры математического моделирования энергетических систем Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Россия.

199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9 i.ignatovich@spbu.ru ORCID: 0009-0009-5660-2207

**ПЕТРОСЯН Ованес Леонович** — доктор физико-математических. наук, доцент кафедры математического моделирования энергетических систем Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Россия.

199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9 о.petrosyan@spbu.ru ORCID: 0000-0001-7908-2261

### THE AUTHORS

#### **GRISHCHENKO** Alexey I.

St. Petersburg State University; Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 7-9, Universitetskaya Emb., St. Petersburg, 199034, Russia gai-gr@yandex.ru ORCID: 0000-0001-6029-5670

IGNATOVICH Igor A. St. Petersburg State University 7-9, Universitetskaya Emb., St. Petersburg, 199034, Russia i.ignatovich@spbu.ru ORCID: 0009-0009-5660-2207

#### **PETROSIAN Ovanes L.**

St. Petersburg State University 7-9, Universitetskaya Emb., St. Petersburg, 199034, Russia o.petrosyan@spbu.ru ORCID: 0000-0001-7908-2261

Статья поступила в редакцию 18.01.2023. Одобрена после рецензирования 26.06.2023. Принята 26.06.2023. Received 18.01.2023. Approved after reviewing 26.06.2023. Accepted 26.06.2023.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2023

# Физика молекул

Научная статья УДК 536.12 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16308

# ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗИМОДЕЙСТВИЙ МАКРОМОЛЕКУЛЫ С КВАЗИСВОБОДНЫМ И ЭПИТАКСИАЛЬНЫМ ГРАФЕНОМ, СФОРМИРОВАННОМ НА ПОЛИТИПАХ КАРБИДА КРЕМНИЯ

### А. А. Лебедев 🖾, С. Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

#### <sup>III</sup> shura.lebe@mail.ioffe.ru

Аннотация. С целью теоретического анализа взаимодействия оборванных молекулярных орбиталей органической макромолекулы с однослойным квазисвободным и эпитаксиальным графенаом предложена двухуровневая модель органической макромолекулы, изначально содержащая полностью заполненный (HOMO) и вакантный (LOMO) уровни. В рамках стандартного адсорбционного подхода рассмотрено взаимодействие этих уровней с электронными состояниями квазисвободного и эпитаксиального графена. В качестве подложки рассмотрены политипы карбида кремния. Оценки показали, что максимальный переход электронов с оборванных связей на эпитаксиальный графен имеет место для подложки 3*C*-SiC.

**Ключевые слова:** двухуровневая модель макромолекулы, однослойный графен, полупроводниковая подложка

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-12-00134 (С.Ю.Д)) и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект 075-15-2021-1349).

Для цитирования: Лебедев А. А., Давыдов С. Ю. Теоретическое исследование взаимодействия макромолекулы с квазисвободным и эпитаксиальным графеном, сформированном на политипах карбида кремния // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 87–94. DOI: https://doi. org/10.18721/ JPM.16308

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.16308

# A THEORETICAL STUDY OF MACROMOLECULE INTERACTION WITH THE QUASI-FREE-STANDING AND EPITAXIAL GRAPHENE FORMED ON THE SILICON CARBIDE POLITYPES

### A. A. Lebedev <sup>⊠</sup>, S. Yu. Davydov

Ioffe Institute of RAS, St. Petersburg, Russia

<sup>™</sup> shura.lebe@mail.ioffe.ru

Abstract. A two-level model of an organic macromolecule has been put forward in order to analyze theoretically the interaction of dangling molecular orbitals of the organic macromole-

© Лебедев А. А., Давыдов С. Ю., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

cule with quasi-free-standing and epitaxial graphene. The model initially contains a completely filled (HOMO) and empty (LOMO) levels. Within the framework of the standard adsorption approach, the interaction of these levels with quasi-free and epitaxial graphene was considered. Silicon carbide polytypes were considered as substrates. Our estimates showed that the maximum transition of electrons from dangling bonds to epitaxial graphene took place for the 3C-SiC substrate.

Keywords: two-level macromolecule model, single-layer graphene, semiconductor substrate

**Funding.** The research was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 22-12-00134) and the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Project No. 075-15-2021-1349).

**For citation:** Lebedev A. A., Davydov S. Yu., A theoretical study of macromolecule interaction with the quasi-free-standing and epitaxial graphene formed on the silicon carbide polytypes, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 87–94. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16308

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

#### Введение

Уникальная способность графена детектировать адсорбцию одиночной молекулы (выявлена в работе [1]) сделала его одним из самых привлекательных материалов для резистивных газовых сенсоров [2 - 5], а в последнее время – и для биосенсоров [6 - 10]. Характерные объекты исследования в последнем случае – макромолекулы (MM) – представляют собой системы (бляшки, *англ.* plaques) с большим количеством атомов и линейными размерами порядка сотен ангстрем. При этом ни геометрия такой бляшки, ни площадь ее контакта с подложкой не только неизвестны, но и не являются строго фиксированными. Ясно, что прямое применение методов DFT (Density Functional Theory) в данном случае затруднительно. Поэтому в работе [11] для описания связи (адгезии) MM с однолистным графеном (*англ.* Single-Layer Graphene, SLG) была предложена модель оборванных связей (*англ.* Dangling Bonds Model, DBM), которые как раз и считались ответственными за сшивку (stitching) MM с SLG. В рамках DBM, благодаря упрощенной схеме рассмотрения задачи, удалось получить аналитические выражения для перехода заряда с макромолекулы на графен и энергии адгезии макромолекулы на графене.

Введем терминологию, которая используется для молекул. В основном состоянии молекулы ее электроны заполняют все орбитали с наименьшими энергиями. Орбиталь, которая среди заполненных в основном состоянии имеет наибольшую энергию, обычно обозначается аббревиатурой B3MO (высшая занятая молекулярная орбиталь), или, чаще, английской аббревиатурой HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital). Следующая по энергии орбиталь называется HBMO (низшая вакантная молекулярная орбиталь), или LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital – низшая незаполненная молекулярная орбиталь).

В настоящей работе для описания связи макромолекулы с однолистным графеном предлагается двухуровневая модель макромолекулы, нижний уровень которой HOMO, а вакантный верхний уровень – LUMO [12 – 15]. Такую модель далее будем называть HLM (HOMO-LUMO Model).

#### Описание предлагаемой модели

Рассмотрим в рамках HLM адсорбцию макромолекулы на SLG. Обозначим энергии HOMO и LUMO свободной макромолекулы соответственно как  $\varepsilon_{-}^{0}$  и  $\varepsilon_{+}^{0}$ . Числа заполнения HOMO и LUMO при нулевой температуре (0 K) по определению равны  $n_{-}^{0} = 2$  и  $n_{+}^{0} = 0$ . Для макромолекулы, адсорбированной на SLG с работой выхода  $\varphi_{SLG}$ , энергии HOMO и LUMO положим равными

$$\varepsilon_{\mp} = \varepsilon_{\mp}^0 + \phi_{\text{SLG}}.$$

<sup>©</sup> Lebedev A. A., Davydov S. Yu., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Энергетический зазор между LUMO и HOMO есть  $\Delta_{LH} = \varepsilon_{+} - \varepsilon_{-}$ . В соответствии с описанием в статье [11], на взаимодействующих с графеном орбиталях HOMO и LUMO плотности состояний (DOSs) на одну проекцию спина выражаются как

$$\rho_{\pm}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{\pm}(\omega)}{(\omega - \varepsilon_{\pm} - \Lambda_{\pm}(\omega))^2 + \Gamma_{\pm}^2(\omega)},\tag{1}$$

где  $\omega$  – энергетическая переменная;  $\Gamma_{\mp}(\omega)$ ,  $\Lambda_{\mp}(\omega)$  – функции уширения и сдвига соответственно;

$$\Gamma_{\pm}(\omega) = \pi V_{\pm}^2 \rho_{\rm SLG}(\omega),$$

а функция сдвига  $\Lambda_{\pm}(\omega)$  является гильберт-трансформатой  $\Gamma_{\pm}(\omega)$  ( $V_{\pm}$  – матричный элемент связи НОМО и LUMO с электронным спектром SLG,  $\rho_{\text{SLG}}(\omega)$  – DOS свободного однослойного графена).

В низкоэнергетическом приближении DOS свободного графена выражается как

$$\rho_{\text{SLG}}(\omega) = \begin{cases} |\omega|/\zeta, & |\omega| < \zeta, \\ 0, & |\omega| \ge \zeta, \end{cases}$$

где  $\zeta$  – энергия обрезания,  $\zeta = \sqrt{\pi\sqrt{3}} / 4t$  (t – энергия перехода электрона между ближайшими соседями в графене,  $t \approx 3$  эВ).

Тогда функции уширения и сдвига произвольного уровня, взаимодействующего с графеном, имеют вид

$$\Gamma(\omega) = \pi V^2 \rho_{\rm SLG}(\omega), \ \Lambda(\omega) = (V^2 \omega / \zeta^2) \ln \left[ \omega^2 / (\zeta^2 - \omega^2) \right].$$

Как и в статье [11], представим DOSs (1) в виде

$$\rho_{\pm}(\omega) \approx \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{\mp}}{(\omega - \overline{\epsilon}_{\mp})^2 + \Gamma_{\mp}^2},\tag{2}$$

где  $\overline{\varepsilon}_{\mp} = \varepsilon_{\mp} + \Lambda_{\mp}, \ \Lambda_{\mp} = \overline{\varepsilon}_{\mp} (V_{\mp} / \zeta)^2 \ln \left[ \overline{\varepsilon}_{\mp}^2 / (\zeta^2 - \overline{\varepsilon}_{\mp}^2) \right], \ \Gamma_{\mp} = \pi V_{\mp}^2 \rho_{\text{SLG}}(\overline{\varepsilon}_{\mp}).$ 

Уравнение  $\omega - \varepsilon_{\mp} - \Lambda(\omega) = 0$  определяет значения  $\overline{\varepsilon}_{\mp}$ . Если положить  $V_{-} = V_{+} = V$ , то можно показать, что достаточным условием замены выражения (1) выражением (2) является выполнение неравенства  $|\varepsilon_{\pm}| < \zeta / e$ .

При нулевой температуре и уровне Фермии є<sub>г</sub> числа заполнения НОМО и LUMO определяются выражением

$$n_{\mp} = \frac{2}{\pi} \operatorname{arccot} \frac{\operatorname{sgn}(\overline{\varepsilon}_{\mp}) - \varepsilon_F / |\overline{\varepsilon}_{\mp}|}{\pi \{V_{\pm} / \zeta\}^2}.$$
(3)

При  $\varepsilon \equiv \overline{\varepsilon}_{+} = -\overline{\varepsilon}_{-}$  имеем

$$Z_{\pm} = \pm [1 - (2 / \pi) \arctan(\zeta^2 / \pi V^2)]$$
.

Суммарный заряд, переходящий с макромолекулы на SLG, равен  $Z_{\text{SLG}} = -(Z_+ Z_+)$ , т. е. переход заряда между ними отсутствует. При  $\varphi_{\text{SLG}} > 0$  величина  $Z_-$  возрастает, а  $|Z_+|$  убывает, в результате чего SLG обогащается электронами и обретает *n*-тип проводимости. При  $\varphi_{\text{SLG}} < 0$  – картина обратная и SLG имеет *p*-тип проводимости. Ширина щели при  $e\varepsilon / \zeta < 1$  выражается как

$$\overline{\Delta}_{\rm LH} = \Delta_{\rm LH} [1 + (V/\zeta)^2 \ln(\varepsilon/\zeta)] < \Delta_{\rm LH} = 2\varepsilon.$$

В работе [11] в качестве источников оборванных связей рассматривались молекулярные фрагменты O<sub>2</sub>, NO, NH, CH<sub>2</sub>, NH<sub>2</sub> и CH<sub>3</sub>. Если для оценки значений  $\epsilon_{-}^{0}$  и  $\epsilon_{+}^{0}$  положить

$$\epsilon_{-}^{0} = \min\{I_{mol}\}, \ \epsilon_{+}^{0} = \max\{A_{mol}\},\$$

где  $I_{mol}$ ,  $A_{mol}$  – энергия ионизации и сродство к электрону (для перечисленных молекул

значения этих энергий приведены в статье [16]), и учесть, что для свободного однослойного графена [11]

$$\phi_{\rm SLG} = 4,5 \, {\rm эB} \, {\rm и} \, V / \zeta \sim 1,$$

то для молекул NO и NH получим, что

$$\varepsilon_{_{+}}/|\varepsilon_{_{-}}|\sim\overline{\varepsilon}_{_{+}}/|\overline{\varepsilon}_{_{-}}|\sim 1,$$

так что использованное для оценок равенство  $\varepsilon = \varepsilon_{+} = -\varepsilon_{-}$  по порядку величины справедливо. Для остальных молекул, рассмотренных в статье [11],  $\varepsilon_{\perp} / |\varepsilon_{\perp}| \approx 0, 6$ .

#### Адсорбция макромолекулы на эпиграфене

Для описания адсорбции макромолекулы на эпиграфене, воспользуемся тем же подходом, который применялся в предыдущем разделе, и используем режим слабой связи графена с подложкой, когда  $\Gamma'_{\pm}(\omega)/t <<1$ , т. е. рассмотрим квазисвободный графен (quasi-free-standing graphene). Такой режим реализуется технологически и гарантирует, что уникальные свойства свободного графена в значительной степени сохраняются.

Тогда, прибегая к тем же упрощениям, что и в предыдущем разделе, получим числа заполнения LUMO и HOMO вида

$$\tilde{n}_{\mp} \approx \frac{2}{\pi} \operatorname{arccot} \frac{\tilde{\varepsilon}_{\mp} - \varepsilon_{\mathrm{F}}}{\tilde{\Gamma}_{\mp}},\tag{4}$$

где  $\tilde{\varepsilon}_{\mp} = \overline{\varepsilon}_{\mp} + \Lambda'_{\mp}(\tilde{\varepsilon}_{\mp}), \quad \tilde{\Gamma}_{\mp} = \pi V_{\mp}^2 \rho_{\text{SLG}}(\tilde{\varepsilon}_{\mp}).$ В случае полупроводниковой подложки, DOS с шириной запрещенной зоны  $E_g$  можно представить в виде

$$\rho_{sc}(\omega) = \begin{cases} \overline{\rho}_{sc}, & |\Omega_{sc}| \ge E_g / 2, \\ 0, & |\Omega_{sc}| \le E_g / 2, \end{cases}$$

где  $\overline{\rho}_{sc} = \text{const}, \ \Omega_{sc} = \omega - \omega_{sc} (\omega_{sc} - \text{центр запрещенной зоны [17]}).$ Тогла

$$\overline{\Gamma}_{sc} = \pi V_{sc}^2 \overline{\rho}_{sc}, \ \Lambda_{sc}(\omega) = (\overline{\Gamma}_{sc} / \pi) \ln \left[ (\Omega_{sc} - E_g / 2) / (\Omega_{sc} + E_g / 2) \right],$$

где  $V_{sc}$  – матричный элемент взаимодействия полупроводника с SLG. Числа заполнения LUMO и HOMO определяются уравнением (4). Случай  $\varepsilon_{\rm F} = \varepsilon_D = 0$ отвечает допированному политипу SiC и недопированному SLG, случай  $\varepsilon_{\rm F} = \omega_{sc}$  – недопированному политипу и допированному SLG.

В качестве примера рассмотрим адсорбцию макромолекулы на SLG, сформированном на политипах карбида кремния SiC. Энергетические параметры этих политипов и степень их гексагональности D взяты из работы [18] (табл. 1).

В случае недопированных политипов ( $\varepsilon_{\rm F} = \omega_{sc}$ ) значения  $\tilde{n}_{\pm}$  в ряду  $3C \rightarrow 4H$  возрастают, а суммарный заряд  $\tilde{Z} = 2 - \tilde{n}_{-} - \tilde{n}_{+}$  на макромолекуле убывает. При этом электроны переходят в SLG, который приобретает заряд -Z. Таким образом, наибольший заряд получает SLG, сформированный на 3C-SiC. Следует добавить, что на переход заряда между макромолекулой и структурой SLG/политип SiC влияет выбор грани политипа.

Например, для структуры SLG/6H-SiC работы выхода электрона для Si-и C-граней различаются примерно на 1,5 эВ [19]. Более строгий поход к описанию адсорбции атомов и молекул на эпитаксиальном графене представлен в работе [17]. Однако в ситуации, когда экспериментальная информация крайне ограничена, сделанные упрощения представляются вполне приемлемыми для оценок перехода заряда. Например, по данным расчетов из первых принципов [20], энергии НОМО лежат в интервале от -12 до -4 эВ (относительно вакуума). Сравнение данных в табл. 1 и 2 показывает, что значения энергий ионизации I, использованные нами для оценок в этой работе и в статье [11], близки к низшим значениям энергий HOMO. К сожалению, энергии LUMO в работе [20] не приводятся.

#### Таблица 1

		, ,		
Политин	ת	$E_{g}$	χ	$\omega_{sc} - \varepsilon_D$
политин	D	Ŭ	эВ	
3 <i>C</i>	0	2,40	4,00	-0,70
8 <i>H</i>	0,25	2,86	3,58	-0,51
21 <i>R</i>	0,29	2,96	3,52	-0,50
6 <i>H</i>	0,33	3,00	3,45	-0,45
15 <i>R</i>	0,40	3,06	3,33	-0,37
27 <i>R</i>	0,44	3,13	3,27	-0,34
4H	0,50	3,23	3,17	-0,29

#### Значения ключевых параметров структуры макромолекула/SLG/политип SiC

Обозначения:  $E_g$  — ширина запрещенной зоны,  $\chi$  — электронное сродство,  $\omega_{sc}$  — энергия центра запрещенной зоны,  $\varepsilon_D$  — энергия точки Дирака; D — степень гексагональности политипов, которые обозначены буквенными символами, характеризующими сингонию решетки Браве (C — кубическая, H — гексагональная, R — ромбоэдрическая).

Таблица 2

#### Энергии ионизации молекул [16]

Молекула	0 <sub>2</sub>	NO	CH <sub>2</sub>	NH <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>
<i>I</i> , эВ	12,1	9,3	10,4	10,2	11,4

#### Заключение

Сравнение модели HLM, предлагаемой в настоящем исследовании, с моделью DBM, использованной в работе [11], демонстрирует значительное сокращение используемых в теории параметров. Следует, однако, подчеркнуть, что даже в случае HLM для более точного определения значений параметров теории требуются экспериментальные данные. Обычные надежды авторов модельных теорий на появление численных расчетов из первых принципов, позволяющих судить о применимости модели, в данном случае, повидимому, тщетны, так как зачастую детальная информация о геометрии адсорбированной макромолекулы отсутствует.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Schedin F., Geim A. K., Morozov S. V., Hill E. W., Blake P., Katsnelson M. I., Novoselov K. S. Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene // Nature Materials. 2007. Vol. 6. 29 July. Pp. 652–655.

2. Buckley D. J., Black N. C. G., Castanon E. G., Melios C., Hardman M., Kazakova O. Frontiers of graphene and 2D material-based gas sensors for environmental monitoring // 2D Materials. 2020. Vol. 7. No. 3. P. 032002.

3. Demon S. Z. N., Kamisan A. I., Abdullah N., Noor S. A. M., Khim O. K., Kasim N. A. M., Yahya M. Z. A., Manaf N. A. A., Azmi A. F. M., Halim N. A. Graphene-based materials in gas sensor applications: A review // Sensors and Materials. 2020. Vol. 32. No. 2. Pp. 759–777.

4. Yaqoob U., Younis M. I. Chemical gas sensors: Recent developments, challenges, and the potential of machine learning – A review // Sensors. 2021. Vol. 21. No. 8. P. 2877.

5. Dhall S., Mehta B. R., Tyagi A. K., Sood K. A review on environmental gas sensors: Materials and technologies // Sensors International. 2021. Vol. 2. P. 100116.

6. Lebedev A. A., Davydov S. Yu., Eliseyev I. A., Roenkov A. D., Avdeev O., Lebedev S. P., Makarov Y., Puzyk M., Klotchenko S., Usikov A. S. Graphene on SiC substrate as biosensor: Theoretical background, preparation, and characterization // Materials. 2021. Vol. 14. No. 3. P. 590.

7. Naresh V., Lee N. A review on biosensors and recent development of nanostructured materialsenabled biosensors // Sensors. 2021. Vol. 21. No. 4. P. 1109.

8. Shahriari S., Sastry M., Panjikar S., Raman S. R. K. Graphene and graphene oxide as a support for biomolecules in the development of biosensors // Nanotechnology, Science and Applications. 2021. Vol. 14. 16 November. Pp. 197–220.

9. Laxmi, Mahapatra B., Krishna R. V., Patel P. K. A review of recent advancements in graphene based field-effect transistor biosensors // AIP Conference Proceedings. 2021. Vol. 2327. No. 1. P. 020011.

10. Wang S., Qi X., Hao D., Moro R., Ma Y., Ma L. Review – Recent advances in graphenebased field-effect-transistor biosensors: A review on biosensor designing strategy // Journal of the Electrochemical Society. 2022. Vol. 169. No. 2. P. 027509.

11. **Давыдов С. Ю.** К теории адгезии органических макромолекул на однослойном графене: модель оборванных связей // Физика твердого тела. 2022. Т. 64. № 12. С. 2050–2054.

12. Cehovin A., Mera H., Jensen J. H., Stokbro K. Pedersen T. B. Role of the virtual orbitals and HOMO-LUMO gap in mean-field approximations to the conductance of molecular junctions // Physical Review. B. 2008. Vol. 77. No. 19. P. 195432.

13. Huang Y., Rong C., Zhung R., Liu S. Evaluating frontier orbital energy and HOMO/LUMO gap with descriptors from density functional reactivity theory // Journal of Molecular Modeling. 2017. Vol. 23. No. 1. P. 3.

14. De Lile J. R., Kang S. G., Son Y.-A., Lee S. G. Do HOMO–LUMO energy levels and band gaps provide sufficient understanding of dye-sensitizer trends for water purification? // ACS Omega. 2020. Vol. 5. No. 25. Pp. 15052–15062.

15. Shimizu A., Ishizaki Y., Horiuchi S., Hirose T., Matsuda K., Sato H., Yoshida J. HOMO– LUMO energy-gap tuning of  $\pi$ -conjugated zwitterions composed of electron-donating anion and electron-accepting cation // The Journal of Organic Chemistry. 2021. Vol. 86. No. 1. p. 770–781.

16. Физические величины. Справочник /Под ред. И. С. Григорьева и Е. З. Мейлихова/ М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.

17. Давыдов С. Ю. Об особенностях плотности состояний эпитаксиального графена, сформированного на металлической и полупроводниковой подложках // Физика и техника полупроводников. 2013. Т. 47. № 1. С. 97–106.

18. **Ирхин В. Ю., Ирхин Ю. П.** Электронная структура, корреляционные эффекты и физические свойства *d*- и *f*-переходных металлов и их соединений. Екатеринбург: УрО РАН, 2004. 472 с.

19. Давыдов С. Ю. Об оценках электронного сродства политипов карбида кремния и разрывов зон в гетеропереходах на их основе // Физика и техника полупроводников. 2019. Т. 53. № 5. С. 706-709.

20. Stuke A., Kunkel C., Golze D., Todorović M., Margra J. T., Reuter K., Rinke P., Oberhofer H. Atomic structures and orbital energies of 61,489 crystal-forming organic molecules // Scientific Data. 2020. Vol. 7. 18 February. P. 58.

#### REFERENCES

1. Schedin F., Geim A. K., Morozov S. V., et al., Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene, Nat. Mater. 6 (29 July) (2007) 652–655.

2. Buckley D. J., Black N. C. G., Castanon E. G., et al., Frontiers of graphene and 2D materialbased gas sensors for environmental monitoring, 2D Mater. 7 (3) (2020) 032002.

3. Demon S. Z. N., Kamisan A. I., Abdullah N., et al., Graphene-based materials in gas sensor applications: A review, Sens. Mater. 32 (2) (2020) 759–777.

4. Yaqoob U., Younis M. I., Chemical gas sensors: Recent developments, challenges, and the potential of machine learning – A review, Sensors. 21 (8) (2021) 2877.

5. Dhall S., Mehta B. R., Tyagi A. K., Sood K., A review on environmental gas sensors: Materials and technologies, Sens. Int. 2 (2021) 100116.

6. Lebedev A. A., Davydov S. Yu., Eliseyev I. A., et al., Graphene on SiC substrate as biosensor: Theoretical background, preparation, and characterization, Mater. 14 (3) (2021) 590.

7. Naresh V., Lee N., A review on biosensors and recent development of nanostructured materialsenabled biosensors, Sensors. 21 (4) (2021) 1109.

8. Shahriari S., Sastry M., Panjikar S., Raman S. R. K., Graphene and graphene oxide as a support for biomolecules in the development of biosensors, Nanotechnol. Sci. Appl. 14 (16 November) (2021) 197–220.

9. Laxmi, Mahapatra B., Krishna R. V., Patel P. K., A review of recent advancements in graphene based field-effect transistor biosensors // AIP Conf. Proc. Proceedings. 2327 (1) (2021) 020011.

10. Wang S., Qi X., Hao D., et al., Review – Recent advances in graphene-based field-effect-transistor biosensors: A review on biosensor designing strategy, J. Electrochem. Soc. 169 (2) (2022) 027509.

11. **Davydov S. Yu.,** To the theory of organic macromolecules adhesion on the single-layer graphene: Dangling bonds model, Phys. Solid State. 64 (12) (2022) 2018–2020.

12. Cehovin A., Mera H., Jensen J. H., et al., Role of the virtual orbitals and HOMO-LUMO gap in mean-field approximations to the conductance of molecular junctions, Phys. Rev. B. 77 (19) (2008) 195432.

13. Huang Y., Rong C., Zhung R., Liu S., Evaluating frontier orbital energy and HOMO/LUMO gap with descriptors from density functional reactivity theory, J. Mol. Model. 23 (1) (2017) 3.

14. De Lile J. R., Kang S. G., Son Y.-A., Lee S. G., Do HOMO-LUMO energy levels and band gaps provide sufficient understanding of dye-sensitizer trends for water purification? ACS Omega. 5 (25) (2020) 15052–15062.

15. Shimizu A., Ishizaki Y., Horiuchi S., et al., HOMO–LUMO energy-gap tuning of  $\pi$  conjugated zwitterions composed of electron-donating anion and electron-accepting cation, J. Org. Chem. 86 (1) (2021) 770–781.

16. Davydov S. Yu., On the specific features of the density of states of epitaxial graphene formed on metal and semiconductor substrates, Semiconductors. 47 (1) (2013) 95–104.

17. Davydov S. Yu., Troshin S. V., Adsorption on metals and semiconductors: Anderson-Newns and Haldane-Anderson models, Phys. Solid State. 49 (8) (2007) 1583–1588.

18. Irkhin, V. Yu., Irkhin Yu. P., Electronic structure, correlation effects and physical properties of *d*- and *f*-transition metals and their compounds, Cambridge International Science Publishing, Cambridge (UK), 2007.

19. Davydov S. Yu., On estimates of the electron affinity of silicon carbide polytypes and the band offsets in heterojunctions based on these polytypes, Semiconductors. 53 (5) (2019) 699–702.

20. Stuke A., Kunkel C., Golze D., et al., Atomic structures and orbital energies of 61,489 crystalforming organic molecules, Sci. Data. 7 (18 February) (2020) 58.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ЛЕБЕДЕВ Александр Александрович** – руководитель отделения твердотельной электроники Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия. 194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26 shura.lebe@mail.ioffe.ru

ДАВЫДОВ Сергей Юрьевич — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории физики полупроводниковых приборов Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26 Sergei\_Davydov@mail.ru

#### THE AUTHORS

**LEBEDEV** Alexander A.

*Ioffe Institute of RAS* 26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia shura.lebe@mail.ioffe.ru

#### DAVYDOV Sergey Yu. Ioffe Institute of RAS 26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia Sergei\_Davydov@mail.ru

Статья поступила в редакцию 11.05.2023. Одобрена после рецензирования 27.06.2023. Принята 27.06.2023. Received 11.05.2023. Approved after reviewing 27.06.2023. Accepted 27.06.2023.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2023

# Радиофизика

Научная статья УДК 535.5, 535-4, 535.012.2 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16309

## ОПИСАНИЕ ВОЛОКОННЫХ СВЕТОВОДОВ С ЛИНЕЙНЫМ ДВУЛУЧЕПРЕЛОМЛЕНИЕМ ПРИ АНАЛИЗЕ ПРАКТИЧЕСКИХ ОПТОВОЛОКОННЫХ СХЕМ МЕТОДОМ ВЕКТОРОВ И МАТРИЦ ДЖОНСА В. С. Темкина ⊠, Л. Б. Лиокумович, А. Б. Арчелков, И. Р. Бучилко,

### А. В. Медведев, А. В. Петров

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

#### ⊠temkina\_vs@spbstu.ru

Аннотация. В работе получены выражения для матрицы Джонса волоконного световода с линейным двулучепреломлением (ДЛП-волокно), которые учитывают слабое отклонение реального волокна такого типа от его идеального представления моделью линейной фазовой пластинки. Вывод проведен в рамках модели поляризационного элемента с фазовой анизотропией. Рассмотрены особенности использования разных вариантов матриц при моделировании оптоволоконных схем. Результаты могут быть использованы для описания практических оптоволоконных схем с ДЛП-волокнами, моделирования сигнала таких схем и анализа влияния на их работу поляризационных рассогласований. Выполнены эксперименты, которые выявили отклонение параметров поляризационных мод реальных ДЛП-волокон от идеализированной модели и позволили оценить уровень этого отклонения.

**Ключевые слова:** формализм Джонса, двулучепреломляющее оптоволокно, фазовая анизотропия, состояние поляризации света

Финансирование: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00513 (https://rscf.ru/project/22-19-00513/).

Для цитирования: Темкина В. С., Лиокумович Л. Б., Арчелков А. Б., Бучилко И. Р., Медведев А. В., Петров А. В. Описание волоконных световодов с линейным двулучепреломлением при анализе практических оптоволоконных схем методом векторов и матриц Джонса // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 95–114. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16309

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.16309

## DESCRIPTION OF POLARIZATION-MAINTAINING FIBERS IN ANALYZING THE PRACTICAL FIBER-OPTIC CIRCUITS USING THE JONES FORMALISM

### V. S. Temkina <sup>⊠</sup>, L. B. Liokumovich, A. B. Archelkov, I. R. Buchilko, A. V. Medvedev, A. V. Petrov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia ☐ temkina vs@spbstu.ru

© Темкина В. С., Лиокумович Л. Б., Арчелков А. Б., Бучилко И. Р., Медведев А. В., Петров А. В., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

**Abstract.** In this paper, analytical forms of the Jones matrix of a polarization-maintaining (PM) optical fiber have been obtained, taking into account a slight deviation of the real fiber of this type from its ideal representation by the linear phase plate model. The derivation was made within the framework of the polarization element model with phase anisotropy. The features of using different variants of matrices in simulation were considered. The results could be used to describe practical fiber-optic circuits with PM fibers, simulate their signal, and analyze the effect of polarization mismatches in the circuits' work. The experiments revealing deviations of the parameters of the polarization modes of real PM fibers from the idealized model and allowing estimation of the level of this deviation were performed.

Keywords: Jones formalism, polarization-maintaining fiber, phase anisotropy, polarization state of light

**Funding:** The reported study was funded by Russian Science Foundation Grant No. 22-19-00513 (https://rscf.ru/en/project/22-19-00513/).

**For citation:** Temkina V. S., Liokumovich L. B., Archelkov A. B., Buchilko I. R., Medvedev A. V., Petrov A. V., Description of polarization-maintaining fibers in analyzing the practical fiber-optic circuits using the Jones formalism, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 95–114. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16309

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

#### Введение

Представленное в статье рассмотрение содержит описание двулучепреломляющих оптических волокон, в которых за счет специальной поперечной структуры создается значительная линейная анизотропия (далее для краткости используется термин «ДЛП-волокно»). Для таких волокон в зарубежной литературе широко применяется термин Polarization-Maintaining (PM) fiber. Линейная анизотропия проявляется в распространении в оптоволокне двух линейно-поляризованных в ортогональных направлениях мод — поляризационных мод. ДЛП-волокна применяют в оптоволоконных схемах наряду с другими элементами поляризационной оптики для обеспечения определенности в преобразовании состояния поляризации света при его распространении в схеме. Такое обеспечение бывает необходимым для снижения флуктуаций или фединга параметров сигналов, формируемых в оптической схеме.

В других случаях определенная последовательность преобразования состояния поляризации служит основой функционирования создаваемого устройства. Поскольку при этом обычно подразумевается использование поляризованного света, анализ таких схем в отношении поляризации (включая анализ поляризационных рассогласований) проводится на основе формализма векторов и матриц Джонса [1 - 6]. Расчет оптической схемы предполагает рассмотрение матриц Джонса для элементов, входящих в состав схемы [7]. При анализе влияния поляризационных рассогласований элементов оптической схемы первостепенным фактором выступает неточная взаимная ориентация поляризационных осей элементов, что учитывается введением в рассмотрение соответствующих матриц поворота [1 - 8].

Следующей задачей анализа рассогласований является использование в расчетах матриц Джонса элементов, которые учитывают их реальные поляризационные свойства, отличные от идеализированного представления [9]. Несмотря на то, что ДЛП-световод представляет собой один из ключевых элементов волоконных схем поляризационной оптики, вопрос о том, какую матрицу Джонса целесообразно использовать для описания реальных ДЛП-волокон, требует особого подхода и поэтому остается актуальным.

В идеальном случае ДЛП-волокно — это линейная фазовая пластинка, матрица Джонса которой в декартовом базисе векторов Джонса имеет известный вид [1, 2, 10]:

<sup>©</sup> Temkina V. S., Liokumovich L. B., Archelkov A. B., Buchilko I. R., Medvedev A. V., Petrov A. V., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

$$\mathbf{M}_{0} = \begin{bmatrix} e^{j\varphi/2} & 0\\ 0 & e^{-j\varphi/2} \end{bmatrix}.$$
 (1)

Такая форма записи соответствует формату специальной унитарной матрицы, которая не учитывает возможный общий набег фаз и коэффициент поляризационно-независимых потерь. Также полагается, что матрица записана в базисе, где ось *X* сонаправлена с осью быстрой поляризационной моды.

Собственные числа матрицы (1) имеют вид

$$\lambda_1 = e^{j\varphi/2}, \, \lambda_2 = e^{-j\varphi/2},$$

где  $\varphi$  — разность фаз собственных состояний поляризаций (поляризационных мод) при прохождении пластинки.

Величина ф — единственный параметр матрицы Джонса идеального ДЛП-волокна, который обычно оказывается неконтролируемым и при расчетах должен рассматриваться как произвольный. Собственные векторы матрицы (1), очевидно, имеют вид

$$\mathbf{J}_{01} = \begin{bmatrix} 1\\0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{J}_{02} = \begin{bmatrix} 0\\1 \end{bmatrix}. \tag{2}$$

Строго говоря, при домножении любого из векторов (2) на произвольное комплексное число они также будут собственными векторами  $\mathbf{M}_0$ . Но формат (2) считается общепринятым, эти векторы нормированы и имеют одинаковую нулевую фазу. Векторы (2) соответствуют линейно-поляризованным волнам с ортогональной ориентацией, т. е. поляризационным модам идеального ДЛП-волокна.

Реальные ДЛП-волокна отличаются от идеального представления, и матрица Джонса, которая описывает преобразование состояния поляризации в таких волокнах, пусть и слабо, но отличается от вида (1). Неидеальность вызывается как внутренними факторами, возникающими при изготовлении световода, так и слабой наведенной анизотропией, вследствие изгибов и скруток волокна при его фактическом монтаже в схеме. Обычно в обоих случаях возникают сложные нерегулярные вариации анизотропии, которые различаются на разных участках волокна. Поэтому конкретные результирующие свойства матрицы Джонса реального отрезка ДЛП-волокна фактически непредсказуемы и, более того, могут меняться при изменении внешних условий или изменении положения волокна. Следовательно, при анализе влияния неидеальности ДЛП-волокна на работу оптических схем с такими световодами надо рассматривать произвольные варианты слабого искажения матрицы (1).

Следует отметить, что поляризационные свойства неидеальных ДЛП-волокон рассматривались в литературе, особенно для случая протяженных трактов [11 – 13]. В зависимости от предполагаемых механизмов нарушения идеальной структуры световода, такой анализ обычно предполагал модель в виде набора секций идеальных волокон с малыми случайными углами между поляризационными осями секций либо некоторую модель распределенной связи поляризационных мод с анализом уравнений связанных волн. Такие модели либо вообще не предполагают построение результирующей матрицы Джонса, либо такая матрица представляется сложной структурой (например, в виде произведения матриц для отдельных участков рассматриваемого световода) с большим числом случайных параметров. Это оправдано при изучении механизмов нарушения идеального линейного двулучепреломления в реальных световодах, изучения пространственных характеристик связи мод в протяженных световодах и других подобных вопросов.

Однако при анализе поляризационных рассогласований в схемах с относительно короткими ДЛП-волокнами часто оказывается удобной сравнительно простая модель матрицы Джонса реального ДЛП-волокна, адекватно описывающая возможные трансформации состояния поляризации таким волокном при минимальном количестве варьируемых параметров.

В известных нам литературных источниках нет представления и обсуждения такого варианта матрицы Джонса реального ДЛП-волокна.

Таким образом, целью данного исследования является получение выражений для матрицы Джонса, адекватно описывающей реальное ДЛП-волокно, а также анализ ее свойств и особенностей применения.

#### Матрицы Джонса для реального ДЛП-световода

К основным положениям, которые легли в основу дальнейшего рассмотрения, можно отнести следующие.

Если идеальное ДЛП-волокно соответствует линейной фазовой пластинке с заданными направлениями поляризационных осей и матрицей Джонса (1), то реальное ДЛП-волокно будет отличаться от идеального, что следует интерпретировать как возмущение идеальной линейной анизотропии волокна.

Изменение анизотропии в общем случае может иметь разный характер, однако, подразумевая слабое возмущение, будем полагать, что волокно остается элементом с фазовой анизотропией и описывается унитарной матрицей Джонса. Это условие согласуется с пренебрежимо малыми потерями мощности оптического излучения и, соответственно, отсутствием дихроизма в реальных, относительно коротких ДЛП-световодах (их длина существенно меньше 1 км), и полагается, что слабые возмущения не меняют этого обстоятельства. В связи с этим, ДЛП-волокно будет соответствовать уже более общему случаю фазовой анизотропии в виде эллиптической фазовой пластинки, но собственные векторы должны оставаться близкими к векторам (2), т. е. соответствовать состояниям поляризации с эллиптичностью, близкой к нулю, и азимутами, ортогональными друг другу и близкими к ориентации вдоль и поперек оси X, как в случае векторов (2).

С учетом вышеизложенного, построение нужной матрицы можно было бы провести на основе матрицы Джонса эллиптической фазовой пластинки, рассматривая при этом случай близкой к нулю эллиптичности и малого угла отклонения оси пластинки от оси X. Однако в известной нам литературе не приводится явного вида матрицы эллиптической фазовой пластинки в представлении через параметры эллиптичности и угла поворота азимута собственных поляризационных состояний.

Поэтому для получения необходимого результата считаем целесообразным использовать обобщенное представление матрицы 2 × 2 через ее собственные векторы. Такой метод, вообще говоря, позволяет получать любую матрицу Джонса с известными свойствами собственных векторов. Для получения простого явного вида искомой матрицы Джонса мы будем учитывать требуемые свойства собственных векторов для рассматриваемого случая слабовозмущенной линейной фазовой пластинки.

В общем случае при заданных параметрах эллипса поляризации, а именно — азимута  $\Theta$  и угла эллиптичности  $\varepsilon$  — соответствующий вектор с точностью до постоянного комплексного множителя может быть записан в следующем виде [2, 3]:

$$\mathbf{J}(\Theta,\varepsilon) = \begin{bmatrix} \cos\Theta \cdot \cos\varepsilon - j\sin\Theta \cdot \sin\varepsilon\\ \sin\Theta \cdot \cos\varepsilon + j\cos\Theta \cdot \sin\varepsilon \end{bmatrix},\tag{3}$$

причем форма (3) задает нормализованный вектор Джонса, имеющий единичную длину.

В случае идеальной линейной фазовой пластинки (идеального ДЛП-волокна) собственные состояния поляризации имеют векторы Джонса (2) и соответствуют эллипсам поляризации с  $\Theta_1 = 0$ ,  $\Theta_2 = \pi/2$  и с  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ .

При введении возмущения идеальной линейной фазовой пластинки подразумевается, что собственные векторы отклоняются от идеального случая, например  $\Theta_1$  и  $\varepsilon_1$  отличны от нуля. Однако поскольку рассматривается слабое возмущение, будем полагать, что выполняются условия  $\Theta_1$ ,  $\varepsilon_1 \ll 1$ . С учетом малости  $\Theta_1$  и  $\varepsilon_1$ , в общей форме (3) можно применить разложение тригонометрических функций: при  $x \ll 1$  выполняются приближенные равенства sin  $x \approx x$  и cos  $x \approx 1 - x^2/2$ . При сохранении составляющих только первого порядка малости получим следующий вид собственных векторов матрицы слабовозмущенной линейной фазовой пластинки:

$$\mathbf{J}_{1} = \begin{bmatrix} 1 - j\Theta \cdot \varepsilon \\ \Theta + j\varepsilon \end{bmatrix}, \quad \mathbf{J}_{2} = \begin{bmatrix} -(\Theta - j\varepsilon) \\ 1 + j\Theta \cdot \varepsilon \end{bmatrix}.$$
(4)

Для упрощения дальнейших записей, в выражении для вектора  $\mathbf{J}_1$  величины  $\Theta_1$  и  $\varepsilon_1$  записаны без нижнего индекса 1. Вид вектора  $\mathbf{J}_2$  можно получить формально как вектор, ортогональный вектору  $\mathbf{J}_1$ , либо непосредственно подстановкой в форму (3) азимута

 $\Theta + \pi/2$  и угла эллиптичности –  $\varepsilon$ , что соответствует параметрам ортогонального состояния поляризации. Очевидно, что при стремлении значений  $\Theta$  и  $\varepsilon$  к нулю векторы (4) будут трансформироваться к виду (2) для идеальной линейной фазовой пластинки.

В общем случае матрица Джонса имеет следующее представление через собственные числа и собственные векторы [1, 2]:

$$\mathbf{M} = \frac{1}{\mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2y} - \mathbf{j}_{1y}\mathbf{j}_{2x}} \begin{bmatrix} \mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2y}\lambda_1 - \mathbf{j}_{2x}\mathbf{j}_{1y}\lambda_2 & -(\lambda_1 - \lambda_2)\mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2x} \\ (\lambda_1 - \lambda_2)\mathbf{j}_{1y}\mathbf{j}_{2y} & \mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2y}\lambda_2 - \mathbf{j}_{2x}\mathbf{j}_{1y}\lambda_1 \end{bmatrix},$$
(5)

где  $\mathbf{j}_{1x}$ ,  $\mathbf{j}_{1y}$  — компоненты вектора Джонса  $\mathbf{J}_1$ ;  $\mathbf{j}_{2x}$ ,  $\mathbf{j}_{2y}$  — компоненты вектора Джонса  $\mathbf{J}_2$ . В случае специальной унитарной матрицы, описывающей систему без потерь и имеющей собственные числа  $\lambda_1 = e^{j\varphi/2}$  и  $\lambda_2 = e^{-j\varphi/2}$  [4], из общей формы (5) получим:

$$\mathbf{M} = \frac{1}{\mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2y} - \mathbf{j}_{1y}\mathbf{j}_{2x}} \begin{bmatrix} \mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2y}e^{j\varphi/2} - \mathbf{j}_{2x}\mathbf{j}_{1y}e^{-j\varphi/2} & -j2\mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2x}\sin(\varphi/2) \\ j2\mathbf{j}_{1y}\mathbf{j}_{2y}\sin(\varphi/2) & \mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2y}e^{-j\varphi/2} - \mathbf{j}_{2x}\mathbf{j}_{1y}e^{j\varphi/2} \end{bmatrix}.$$
 (6)

Если подставить выражения (4) в формулу (6), то можно найти коэффициенты матрицы для случая слабого возмущения линейной фазовой пластинки. Они имеют вид

$$m_{11} = (1 + \Theta^{2} \varepsilon^{2}) e^{j\varphi/2} + (\Theta^{2} + \varepsilon^{2}) e^{-j\varphi/2},$$

$$m_{22} = (1 + \Theta^{2} \varepsilon^{2}) e^{-j\varphi/2} + (\Theta^{2} + \varepsilon^{2}) e^{j\varphi/2},$$

$$m_{21} = j2(\Theta + j\varepsilon)(1 + j\Theta\varepsilon)\sin(\varphi/2),$$

$$m_{12} = j2(1 - j\Theta\varepsilon)(\Theta - j\varepsilon)\sin(\varphi/2),$$

$$\mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2y} - \mathbf{j}_{1y}\mathbf{j}_{2x} = (1 + \Theta^{2}\varepsilon^{2}) + (\Theta^{2} + \varepsilon^{2}) \approx 1 + \Theta^{2} + \varepsilon^{2}.$$
(7)

Выражения (7) получены на основе векторов (4), учитывающих только первую степень малости по  $\Theta$  и  $\varepsilon$ . Поэтому в предположении строгого выполнения условий  $\Theta$ ,  $\varepsilon << 1$  целесообразно в коэффициентах матриц также опустить составляющие второго порядка малости, поскольку они крайне слабо влияют на количественные результаты в расчетах. Исключением была бы ситуация, когда в формулы для коэффициентов матрицы входили бы только компоненты возмущения высокого порядка, но в выражениях (7) таких коэффициентов нет. При отбрасывании компонент второго порядка малости матрица (7) слабовозмущенной линейной фазовой пластинки преобразуется к виду

$$\mathbf{M}_{\rm PMF}(\Theta,\varepsilon) = \begin{bmatrix} e^{j\varphi/2} & 2(\varepsilon + j\Theta)\sin(\varphi/2) \\ -2(\varepsilon - j\Theta)\sin(\varphi/2) & e^{-j\varphi/2} \end{bmatrix}.$$
(8)

Определитель  $\Delta$  матрицы (8) равен выражению

$$\Delta = 1 + 4(\Theta^2 + \varepsilon^2) \cdot \sin^2(\varphi/2),$$

он вещественный, но отличается от единицы.

Для строгого соответствия нормальной унитарной матрице, в выражение (8) можно ввести множитель  $1/\Delta$ , но на практике представляется целесообразным пренебречь поправкой второго порядка малости по  $\Theta$  и  $\varepsilon$  и использовать выражение (8) без дополнительных множителей.

В контексте представления возмущения идеальной матрицы  $\mathbf{M}_0$  через учет малых значений угла эллиптичности и азимута собственных состояний поляризации, стоит отметить два частных случая матрицы (8).

Если присутствует только слабый поворот азимута собственного линейного состояния поляризации ( $\varepsilon = 0$ ) либо возникает только его слабая эллиптичность ( $\Theta = 0$ ), то матрица Джонса (8) в этих случаях будет трансформироваться к вариантам вида

$$\mathbf{M}_{\mathrm{PMF}_{-}\Theta} = \begin{bmatrix} e^{j\varphi/2} & j2\Theta \cdot \sin(\varphi/2) \\ j2\Theta \cdot \sin(\varphi/2) & e^{-j\varphi/2} \end{bmatrix}, \ \mathbf{M}_{\mathrm{PMF}_{-}\varepsilon} = \begin{bmatrix} e^{j\varphi/2} & 2\varepsilon \cdot \sin(\varphi/2) \\ -2\varepsilon \cdot \sin(\varphi/2) & e^{-j\varphi/2} \end{bmatrix}.$$
(9)

99

Эти частные варианты матриц интересны и тем, что их можно непосредственно сопоставить с выражениями, которые получаются относительно просто из случаев, приведенных в литературе. Это показано в конце статьи в Приложении I при рассмотрении поворота линейной фазовой пластинки и в Приложении II при анализе выражения для эллиптической фазовой пластинки, ориентированной по оси X.

Рассмотрение, приведенное в данное статье, дополнительно проиллюстрировано на рис. 1,*a*, где показана сфера Пуанкаре с пояснением использованных параметров. Точки A и B соответствуют поляризации вектора  $J_1$  для случаев идеальной и реальной матрицы Джонса ДЛП-волокна.



Рис. 1. Смещение точки собственного вектора ДЛП-волокна на сфере Пуанкаре при возмущении волокна:

 Θ, ε – параметры азимута и угла эллиптичности; 2ρ – величина ортодромии; точки *A* и *B* отвечают поляризации вектора J<sub>1</sub> для случаев матриц Джонса идеального и реального ДЛП-волокна, соответственно

Матрицу Джонса (8) для случая слабовозмущенной линейной фазовой пластинки можно применять при моделировании систем с двулучепреломляющими оптическими волокнами.

Неидеальность волокна описывается двумя независимыми параметрами  $\Theta$  и  $\varepsilon$ , однако при этом нет единого параметра, характеризующего степень отклонения реальной матрицы  $\mathbf{M}_{\text{PMF}}$  от идеального варианта  $\mathbf{M}_0$ . При заданных значениях  $\Theta$ ,  $\varepsilon$  и, соответственно, собственных векторах (4) целесообразным количественным параметром, характеризующим возмущение, представляется угловое расстояние между точками на сфере Пуанкаре, соответствующими идеальному случаю с угловыми координатами  $\{0; 0\}$  и неидеальному с координатами  $\{\Theta; \varepsilon\}$ . Действительно, ортодромия или, как ее еще называют, сферическая дистанция (*англ.* spherical distance / great-circle distance), задаваемая двумя точками на сфере Пуанкаре (кратчайшее расстояние, соответствующее дуге большого круга сферы, содержащего эти точки), наилучшим образом характеризует различие состояний поляризации [14]. Поскольку сфера Пуанкаре имеет единичный радиус, то и геометрическая, и угловая (в радианах) величины ортодромии будут одинаковыми. Если одна точка на сфере Пуанкаре соответствует нулевым угловым координатам, то угловая ортодромия до точки с координатами  $\{\Theta; \varepsilon\}$  задается простым выражением:

$$\cos 2\rho = \cos 2\Theta \cdot \cos 2\varepsilon$$
,

где величина ортодромии обозначена 2р (введение коэффициента 2 упрощает дальнейшие выражения).

Это выражение соответствует малому кругу сферы Пуанкаре с центром в нулевых угловых координатах и радиусом  $2\rho$  (рис. 1,*b*). С учетом малости величин  $\Theta$  и  $\varepsilon$  эта связь сводится к более простому выражению:

Радиофизика

$$\rho^2 = \varepsilon^2 + \Theta^2, \tag{10}$$

соответствующему уравнению окружности на плоскости.

Отметим, что принятые условия  $\Theta$ ,  $\epsilon << 1$  предполагают также выполнение условия  $\rho << 1$ .

Для матрицы с выбранными значениями  $\Theta$  и є параметр  $\rho$  дает унифицированную количественную характеристику уровня отклонения ДЛП-волокна от идеального случая. При анализе и расчетах можно задавать предполагаемый уровень  $\rho_{max}$  максимального отклонения реального ДЛП-волокна от идеализированного представления, и тогда параметры є и  $\Theta$ , очевидно, следует рассматривать при ограничении

$$(\varepsilon^2 + \Theta^2) \leq \rho_{\max}^2$$
.

При рассмотрении и моделировании реальных ДЛП-волокон может быть более удобной другая логика задания матрицы волокна, основанная на исходном задании величины  $\rho$ . При этом использовать связь  $\Theta$  и  $\varepsilon$  с параметром  $\rho$  на основе выражения (10) неудобно, тем более что она неоднозначна. Однако это выражение соответствует уравнению окружности с радиусом  $\rho$ , и положение точки на окружности с заданным радиусом удобно определять некоторым углом  $\theta$ . Если отсчитывать его от направления вдоль экватора сферы Пуанкаре, как это показано на рис. 1,*b*, т. е. полагать, что  $\theta = 0$  при  $\Theta = \rho$  и  $\varepsilon = 0$ , то параметры  $\Theta$  и  $\varepsilon$  будут задаваться простыми выражениями:

$$\Theta(\rho, \theta) = \rho \cdot \cos \theta; \ \varepsilon(\rho, \theta) = \rho \cdot \sin \theta. \tag{11}$$

Таким образом, заданное значение  $\rho$  определяет уровень малого отклонения собственного состояния поляризации возмущенной линейной фазовой пластинки, которое при этом дополняется возможностью вариативного выбора конкретного типа возмущения за счет произвольного выбора углового параметра  $\theta$ . Тогда с учетом выражений (8) и (11) матрицу возмущенной линейной фазовой пластинки можно записать в формате с заданным параметром малости возмущения  $\rho$  и аргументом  $\theta$  в виде

$$\mathbf{M}_{PMF}(\rho,\theta) = \begin{bmatrix} e^{j\varphi/2} & j2\rho \cdot e^{-j\theta}\sin(\varphi/2) \\ j2\rho \cdot e^{j\theta}\sin(\varphi/2) & e^{-j\varphi/2} \end{bmatrix}.$$
 (12)

Этот вариант матрицы Джонса реального ДЛП-волокна так же, как и форма (8), имеет два варьируемых параметра, учитывающих неидеальность волокна. Однако использование параметров  $\rho$  и  $\theta$  может быть удобнее и иметь преимущества при организации расчетов с варьированием параметров, что обсуждается ниже.

# Использование полученных матриц Джонса реального ДЛП-световода при анализе и численном моделировании схем

С учетом проведенного анализа следует отметить несколько аспектов, важных для проведения расчетов, исследующих влияние неидеальности ДЛП-волокон и других поляризационных оптоволоконных элементов (далее поляризационные рассогласования элементов) на функционирование содержащих их схем.

На расчет искажений сигналов оптоволоконных схем с поляризационными элементами влияют не только параметры матрицы Джонса, описывающие отклонение от ее идеального вида, которые надо варьировать для исследования всех возможных их значений, непредсказуемых заранее. Разность фаз  $\varphi$  также влияет на искажение сигнала, формируемого в схеме, по сравнению с идеальными и согласованными поляризационными элементами; и при анализе разность  $\varphi$  также должна варьироваться в интервале  $2\pi$ . В результате для изучения влияния поляризационных рассогласований в схеме, имеющей даже небольшое количество оптоволоконных поляризационных элементов и ДЛПволокон, требуется варьировать целый ряд параметров, чтобы выявлять наихудшие возможные варианты искажений в ее работе. Поэтому комплексный анализ поляризационных рассогласований элементов схемы в общем случае требует проведения численных расчетов компьютерными средствами, причем расчеты с перебором значений большого количества параметров могут требовать существенных вычислительных затрат.

С точки зрения реализации компьютерных вычислений матрицы Джонса реального ДЛП-волокна, в предположении тех или иных параметров отклонения собственных векторов, заданных значениями  $\Theta$  и є, можно было бы сразу использовать общую структуру матрицы Джонса (6). При этом можно воспользоваться формой (II-6) (см. Приложение II) для собственных векторов (первый соответствует вектору (3), второй – ортогонален первому) и затем рассчитывать матрицу (6). Также можно использовать и вариант записи общей матрицы эллиптической фазовой пластинки, представленный в Приложении II. Выражения (II-7) получены как раз подстановкой (II-6) в форму (6), но учитывают некоторые упрощения на основе тригонометрических тождеств. Вариант расчета на основе таких общих структур имеет преимущество, так как они будут верны, даже если для  $\Theta$  или  $\varepsilon$ не выполняется в достаточной степени условие малости и введенный уровень искажений р нельзя считать достаточно низким. Однако полученные матрицы (8) и (12) значительно проще и не включают тригонометрических функций от варьируемых параметров. Это не только дает возможность получать в некоторых случаях аналитические результаты для искажений результирующих сигналов в анализируемых схемах, но и существенно снижать вычислительные затраты при компьютерных расчетах.

Другой аспект связан с организацией расчета при варьировании набора параметров. На практике это подразумевает перебор значений всех этих параметров с вычислением некоторого результирующего сигнала схемы для каждой конкретной комбинации значений. При этом необходимо на основе эмпирических данных, либо результатов дополнительных теоретических исследований возмущения конкретного волоконного элемента получить представление о возможном максимальном уровне искажения собственных векторов матрицы Джонса элемента. В случае ДЛП-волокна таким параметром служит упомянутый выше параметр  $\rho_{\rm max}$ . Возможна альтернативная логика, когда расчет и анализ подразумевает поиск максимально допустимого уровня возмущения  $\rho_{\rm max}$ , который должен быть обеспечен для приемлемого уровня искажений сигналов схемы. Так или иначе, для анализа на основе обобщенных структур матрицы Джонса волокна или на основе матрицы (8) необходим перебор двух варьируемых параметров  $\Theta$  и є в диапазонах изменения от  $-\rho_{\rm max}$  до  $\rho_{\rm max}$ , причем так, чтобы выполнялось условие

$$\Theta^2 + \varepsilon^2 \leq \rho_{\max}^2$$
.

Изменение двух независимых параметров в одинаковом общем диапазоне, но с зависимой границей одного параметра при конкретном значении второго, вообще говоря, оказывается не вполне удобным. В организации перебора варьируемых параметров представляется более удобным и целесообразным использовать матрицу (12), когда вместо параметров  $\Theta$  и  $\varepsilon$  используются  $\rho$  и  $\theta$ . При применении формы (12) нужно независимо изменять величину  $\rho$  в диапазоне от  $-\rho_{max}$  до  $\rho_{max}$ , а  $\theta$  – в диапазоне от 0 до  $2\pi$ . Существует еще один аспект, связанный с анализом поляризационных рассогласова-

Существует еще один аспект, связанный с анализом поляризационных рассогласований в оптоволоконных схемах с ДЛП-волокнами и рассмотренными матрицами. Как уже отмечалось, часто такой анализ начинают с того, что учитывают только рассогласование углов между поляризационными осями ДЛП-волокон в сварных или разъемных соединениях волоконных выводов поляризационных элементов при их стыковке друг с другом [7, 8]. С одной стороны, данный подход обусловлен тем, что учет такого рассогласования в рамках формализма матриц Джонса очень прост. Соединение учитывается введением матрицы поворота [2, 3]:

$$\mathbf{R}(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix},\tag{13}$$

где *α* – угол между направлениями поляризационных осей стыкуемых волокон.

Угол  $\alpha$  в расчетах должен варьироваться в диапазоне  $[-\alpha_{max}, \alpha_{max}]$  с учетом предполагаемого уровня возможной угловой расстройки.

С другой стороны, такой подход предполагает, что влияние угловых рассогласований поляризационных осей ДЛП-световодов в соединениях может превалировать над неидеальностью самих ДЛП-волокон.

В современных разъемных соединениях ДЛП-волокон обеспечивается угловое согласование осей не хуже 3 – 5°, что соответствует типовой экстинкции, указываемой для вилок

ДЛП-волокон в диапазоне 20 – 25 дБ [15, 16]. Однако специальные сварочные аппараты обеспечивают согласование поляризационных осей ДЛП-волокон в сварных соединениях уже до 1°. Но и возмущения ДЛП-световодов, даже коротких, также могут иметь значения  $\rho$  порядка 1°, как показывают, например, полученные нами экспериментальные результаты (приведены далее).

Таким образом, на практике уровень угловых рассогласований ДЛП-волокон при стыковке может быть сопоставим с уровнем рассогласования  $\rho_{max}$ , связанным с неидеальностью самих ДЛП-световодов. Собственно, сам учет неидеальности ДЛП-волокна в расчетах имеет смысл только тогда, когда его уровень  $\rho_{max}$  сопоставим или выше уровня рассогласования углов поляризационных осей  $\alpha_{max}$ .

рассогласования углов поляризационных осей  $\alpha_{max}$ . В случаях, когда  $\rho_{max} \approx \alpha_{max}$  либо  $\rho_{max} > \alpha_{max}$ , получается, что матрица Джонса реального ДЛП-волокна уже учитывает возможный сдвиг азимута собственного состояния поляризации, в том числе и сдвиг азимута при нулевом угле эллиптичности, что описывает частный случай только углового рассогласования. Тогда использование описанного выше подхода позволяет исключить из расчетов специальный учет углов  $\alpha$  и соответствующих матриц поворота (см. рис. 2). В случае представления ДЛП-волокон идеальной моделью с матрицей вида  $\mathbf{M}_0$  (это показано на рис. 2,*a*) учет в расчетах двух стыкуемых волокон предполагает их описание матрицей

$$\mathbf{M}_{0(i+1)} \cdot \mathbf{R}(\alpha) \cdot \mathbf{M}_{0i}$$

где *i*, *i* + 1 – номера состыкованных волокон по направлению распространения света.

Однако если одно из ДЛП-волокон или оба описываются моделью с матрицей  $\mathbf{M}_{\text{PMF}}$ , то возможные рассогласования углов уже учитываются в расчетах параметром  $\Theta$ . Тогда в расчетах можно применять матрицы вида

$$\mathbf{M}_{0(i+1)}$$
· $\mathbf{M}_{\mathsf{PME}i}$  либо  $\mathbf{M}_{\mathsf{PME}(i+1)}$ · $\mathbf{M}_{\mathsf{PME}i}$  либо  $\mathbf{M}_{\mathsf{PME}(i+1)}$ · $\mathbf{M}_{0i}$ 

в зависимости от того, какие волокна описываются моделью неидеального волокна.

Таким образом, указанные свойства матрицы **М**<sub>РМF</sub> позволяют исключить из описания оптоволоконных схем с ДЛП-волокнами матрицы поворота для учета угловых рассогласований в стыках волокон, что может существенно упростить расчеты благодаря уменьшению количества варьируемых параметров.

Также этот подход дает определенную унификацию модели схемы, ведь даже в случае превалирования именно угловых рассогласований можно в матрице  $\mathbf{M}_{\text{PMF}}$  формата (8) принять  $\varepsilon = 0$ . Но здесь следует указать, что использование матриц  $\mathbf{M}_{\text{PMF}}$  не всегда позволяет полностью исключить из анализа стыков ДЛП-волокон матрицы поворота. Этот момент иллюстрируется рис. 2,*c*, где реальное ДЛП-волокно с обеих сторон стыкуется с волокнами или другими поляризационными элементами, которые описываются идеальными матрицами со строго определенной ориентацией осей. При этом угол  $\Theta$  в матрице  $\mathbf{M}_{\text{PMF}}$  будет учитывать одинаковый сдвиг ориентации осей на обоих торцах волокна, хотя угловое рассогласование вследствие неточной ориентации волокон в стыках может быть разным на разных концах волокна. Следовательно, для корректного описания нужно ввести матрицу поворота с одной стороны волокна. А значит, исключение матриц поворота из описания соединений нужно делать с осторожностью и так, чтобы не пропустить те случаи углового смещения, которые не будут учитываться в матрицах  $\mathbf{M}_{\text{PMF}}$ .



Рис. 2. Примеры учета рассогласований ориентации поляризационных осей соединяемых световодов (см. пояснения в тексте)

#### Экспериментальная часть

В этом разделе описаны эксперименты, которые направлены на изучение свойств реальных ДЛП-световодов и их отличия от идеализированной линейной фазовой пластинки; при этом сделана примерная оценка введенного ранее параметра ρ для реальных волокон.

Одним из наиболее известных, а также изученных теоретически и экспериментально проявлений неидеальности ДЛП-волокон можно считать связь поляризационных мод [11, 13]. Например, такая неидеальность проявляется при возбуждении на входе одной линейно-поляризованной собственной моды и при регистрации на выходе волокна как данной, так и ортогональной поляризационной моды. Однако факт формирования на выходе волокна паразитной моды и ее относительный уровень трудно однозначно интерпретировать в контексте рассмотренного выше вопроса о матрице Джонса ДЛП-волокна. Это особенно относится к проведению моделирования в рамках формализма матриц Джонса сложных волоконно-оптических схем, в составе которых есть ДЛП-волокна.

Для экспериментального определения параметров неидеальности ДЛП-волокон наиболее приемлемыми можно считать измерения, которые бы позволили найти матрицу Джонса элемента через измерения выходного состояния поляризации при разных состояниях поляризации на входе элемента. Например, можно использовать на входе волокна линейно-поляризованное излучение с ориентациями 0, 45 и 90° относительно произвольно выбранной оси X и затем по измеренным параметрам состояния поляризации на выходе волокна рассчитать матрицу Джонса волокна по формулам, приведенным в работах [6, 17].

Однако в нашей работе речь идет об очень слабых отклонениях параметров матрицы Джонса  $\Theta$  и  $\varepsilon$  от нуля (на уровне 1° или даже меньше). Это требует, чтобы точность установки ориентации линейной поляризации света на входе волокна, а также малость ее эллиптичности были значительно лучше, что трудновыполнимо в обычных лабораторных условиях с типовыми приборами.

С учетом указанных препятствий, для примерной оценки уровня значений  $\rho$  реальных ДЛП-волокон мы выбрали другой вариант измерений (см. схему на рис. 3). При измерениях тестируемое волокно возбуждается лазерным излучением, некоторый участок волокна подвергается нагреву, а поляриметр фиксирует эволюцию состояния поляризации на выходе волокна, вызванную нагревом.

Для пояснения принципа, положенного в основу проведенных экспериментов, можно указать на следующие известные обстоятельства. При прохождении света через элемент с фазовой анизотропией, например сквозь оптическое волокно, состояние поляризации претерпевает вполне определенные изменения. При этом важен прежде всего тот факт, что это преобразование соответствует повороту поверхности сферы Пуанкаре вокруг оси, задаваемой собственными состояниями поляризации элемента, на угол, соответствующий разности фазовых задержек ф этих состояний [1, 6, 13]. Если разность фаз ф монотонно изменяется в интервале более  $2\pi$ , то эволюция выходного состояния поляризации на сфере Пуанкаре будет представлять собой малую окружность сферы, угловой радиус R которой определяется соотношением амплитуд поляризационных мод [1, 6, 18]. При использовании схемы, приведенной на рис. 3, a, изменение  $\phi$  вызывается нагревом секции волокна; поляриметр регистрирует возникающую при этом эволюцию состояния поляризации света. Далее путем аппроксимации окружностью измеренных значений состояния поляризации (точек на сфере Пуанкаре) можно определить ее параметры, а именно радиус R и угловые координаты центра окружности  $2\Theta_0$  и  $2\varepsilon_0$ . Поскольку центр окружности соответствует точке собственного состояния поляризации волокна, координаты центра  $\Theta_0$  и  $\epsilon_0$  представляют собой искомые параметры матрицы  $M_{PMF}$  тестируемого волокна. Это показано на рис. 3, b, где приведена сфера Пуанкаре, а точка В соответствует собственному состоянию поляризации рассматриваемого волокна (как и на рис. 1).

Предварительно мы проводили такие измерения для регистрации уровня паразитной моды на выходе ДЛП-волокон по найденному значению R. Однако аппроксимация измеренных точек на сфере Пуанкаре окружностью позволяет определить не только R, но и центр окружности B, т. е. значения  $\Theta_0$  и  $\varepsilon_0$ . При этом не требуется точной установки каких-либо определенных состояний поляризации на входе волокна.



Рис. 3. Схема эксперимента (*a*) и эволюция состояния поляризации на сфере Пуанкаре, регистрируемая при измерениях (*b*)

Разумеется, при этом необходимо учитывать некоторые особенности, обусловленные основным принципом трансформации состояния поляризации света (указан выше) при его распространении через волокно.

Во-первых, положение центра наблюдаемой окружности на сфере Пуанкаре не зависит от свойств начального участка волокна до секции, подвергаемой нагреву. Если поляризационные свойства этого участка стационарны, то он может определять состояние поляризации света на входе нагреваемой секции и, соответственно, влиять на величину R, но он не будет влиять на положение точки B.

Во-вторых, в реальных волокнах нагрев может изменять собственные состояния поляризации вследствие нерегулярных механизмов формирования искажения свойств ДЛП-волокна. Однако в таком случае круговая эволюция состояния поляризации на выходе будет искажаться, образуя спирали и другие фигуры, отклоняющиеся от окружности.

В-третьих, стоит также отметить, что положение регистрируемой точки B может зависеть не только от собственных мод нагреваемой секции волокна, но и от собственных мод участка волокна между нагревателем и поляриметром. Распространение излучения через этот участок также может повернуть поверхность сферы Пуанкаре (вместе с круговой эволюцией, формируемой на выходе нагреваемой секции) вокруг оси, задаваемой уже модами выходного участка. Однако это обстоятельство влияет на результат, только если собственные моды нагреваемого и выходного участков различаются; но это не мешает фиксировать сам факт отклонения измеренной точки B от точки  $\{0; 0\}$ , соответствующей идеальному ДЛП-волокну.

В измерениях мы использовали высококогерентный лазер RIO-Orion американской компании Redfern Integrated Optics (RIO) с оптоволоконным разъемом типа FC/APC, для того чтобы подключить ДЛП-световод и возбудить преимущественно одну линейную поляризационную моду (согласно паспорту, экстинкция для волоконного вывода лазера превышает 20 дБ).

Созданные условия эксперимента обеспечивали относительно низкие значения R, что увеличивало наглядность смещений центра наблюдаемой окружности на сфере Пуанкаре. Мощность излучения лазера в волокне составляла 10 мВт. Состояние поляризации измеряли поляриметром PAX1000IR2 компании Thorlabs (США). Этот прибор обеспечивает измерение азимута и угла эллиптичности состояния поляризации с точностью  $0,25^{\circ}$ . Для подключения волоконного шнура к поляриметру использовали коллиматор с разъемом типа FC (Ferrule Connector), который устанавливали на входе поляриметра. При этом ориентация положения ключа разъема относительно оси поляриметра выставлялась приближенно и в ходе экспериментов оставалась неизменной.

Первый этап измерений был связан с тестированием трех оптоволоконных ДЛПшнуров длиной 1 м, оконцованных вилками разъемов типа FC/APC. Образцы патчкордов № 1 и № 2 были приобретены у компании AFW Technologies (Австралия, модель PMP-15-R-L-1), а шнур № 3 входил в комплект с лазерным источником. Выходную секцию волоконного шнура (длина — примерно 20 см) нагревали до 70°C в течение 20 мин, чего было достаточно для изменения разности фаз собственных поляризационных мод на величину  $\varphi$  порядка  $2\pi$ .

Результаты проведенных измерений показаны на рис. 4 и в табл. 1. Поскольку поворот коллиматора относительно оси поляриметра выставляли вручную и направление оси волокна соответствовало оси поляриметра не совсем точно, следует признать информативными не сами измеренные значения  $\Theta_0$ , а их разность для разных патчкордов.



Рис. 4. Эволюция состояния поляризации на сфере Пуанкаре (*a*) и на плоскости, в координатах Θ и ε (*b*). No. 1, No. 2, No. 3 – номера патчкордов. Цена деления сетки – 1 град. Аппроксимация экспериментальных точек окружностью на сфере Пуанкаре показана красными линиями

#### Таблица 1

первый этап эксперимента (см. рис. ч)				
	Значение параметра, град,			
Угловой параметр	для патчкорда			
	No. 1	No. 2	No. 3	
Радиус <i>R</i>	9,24	1,99	3,72	
Азимут $\Theta_0$	-2,44	0,92	-0,24	
Эллиптичность є <sub>0</sub>	0,63	-0,51	-1,09	

#### Параметры окружностей, аппроксимирующих измеренные точки эволюции состояния поляризации на сфере Пуанкаре. Первый этап эксперимента (см. рис. 4)

Как показывают представленные результаты, наблюдаемая эволюция состояния поляризации на выходе шнура ДЛП-волокна действительно очень хорошо соответствует окружности. При этом для разных патчкордов есть значительное различие значений *R*, что, наиболее вероятно, связано с рассогласованием ориентации поляризационных осей ДЛП-волокон в разъеме при стыковке с лазером.

Следует отметить, что параметр *R* введен как угловой радиус малого круга на сфере Пуанкаре, когда угловые координаты определяются удвоенными углами  $\Theta$  и  $\varepsilon$ . При построении точек на плоскости в координатах  $\Theta$  и  $\varepsilon$  без удвоения (рис. 4,*b*) получается окружность, имеющая вдвое меньший радиус. Значения азимута  $\Theta_0$  для шнуров различаются примерно на 3,5°, а также присутствует ненулевой угол эллиптичности  $\varepsilon_0$ , который расходится у разных шнуров в интервале, превышающем 1,5° (от -1,09° до 0,63°). При этом разброс значений  $\Theta_0$  может быть обусловлен не внутренними неоднородностями волокна, а поворотом волокна при подключении к коллиматору из-за неточного установ-

ления ключа на вилке. Но разница в значениях угла эллиптичности, превышающая 1,5°, указывает на различие собственных состояний поляризации волоконных шнуров.

На втором этапе экспериментов исследовался отрезок ДЛП-волокна HB1250 компании Fibercore (США) несколько большей длины (200 м), по сравнению с размерами патчкордов. Лазер так же возбуждал в волокне преимущественно одну поляризационную моду. Весь тракт был нагрет до 40°С, и затем регистрировалась эволюция состояния поляризации на его выходе при остывании волокна примерно до 25°С. В данном случае участки волокна до и после нагревателя были относительно короткие, а температура большей части волокна изменялась.

На этом этапе эксперимента изменения поляризационных свойств наглядно проявлялись в изменении уровня паразитной поляризационной моды на выходе, что можно трактовать как интерференцию компонент этой моды, перетекших в нее из основной моды на разных участках световода и имеющих разные фазовые задержки, изменяемые с температурой. Изменение уровня паразитной моды соответствует изменению радиуса Rрегистрируемой круговой траектории на сфере Пуанкаре. С другой стороны, это означает, что при наличии в волокне сложных неоднородностей двулучепреломления изменение температуры столь длинного волокна может менять собственные состояния поляризации. Поэтому изменение радиуса R должно также сопровождаться изменениями центра формируемой окружности на сфере Пуанкаре.

Наблюдаемая в данном эксперименте эволюция состояния поляризации показана на рис. 5. Она представляет собой квазикруговое движение с изменяющимся радиусом, что отражает указанные выше обстоятельства. В контексте основного рассматриваемого в данной работе вопроса более важны изменения не радиуса, а центра круговых участ-ков этой траектории. Действительно, если выбирать относительно небольшие участки эволюции состояния поляризации, то в основном они с достаточно высокой точностью соответствуют окружности (изменение радиуса R происходит медленнее, чем нарастание разности фаз мод на  $2\pi$ ). Это дает основания полагать, что центры таких окружностей характеризуют собственные состояния поляризации в соответствующий момент для данной температуры. На рис. 5 показана измеренная эволюция состояния поляризации, в том числе примеры для четырех фрагментов измеренной траектории, соответствующих значениям температуры примерно 33, 30, 28 и 25 °C. Выбор этих фрагментов из огромного количества экспериментальных данных делался для того, чтобы показать примеры окружностей с разными значениями параметров  $\Theta_0$  и  $\varepsilon_0$ .

Аппроксимация всех измеренных точек малой окружностью на сфере Пуанкаре дает следующие значения параметров, град:

$$R = 7,59, \Theta_0 = 0,98, \varepsilon_0 = 0,37$$

(в координатах  $\Theta$  и є такая окружность показана на рис. 5,*b*). Параметры окружностей, вписанных в точки фрагментов, показанных на рис. 5,*d*, приведены в табл. 2.

Количество точек на окружностях различалось, так как температура изменялась неравномерно, на некоторых участках даже можно было заметить возвратные движения по траектории на сфере Пуанкаре.

Из представленных результатов следует, что можно наблюдать изменения азимута собственных поляризационных мод тестируемого волокна в интервале  $0,20^{\circ}$  и угла эллиптичности в интервале  $0,85^{\circ}$ . Поскольку измерение проводилось с одним волокном, без изменения подключения к источнику и поляриметру, можно уверенно утверждать, что наблюдаемые изменения как значений азимута  $\Theta_0$ , так и угла эллиптичности  $\varepsilon_0$  свидетельствуют об изменении собственных состояний поляризации волокна.

В целом приведенные экспериментальные результаты можно рассматривать только как иллюстративные, которые дают весьма приближенные оценки степени возмущения  $\rho$  матрицы Джонса для тестируемых волокон. Поскольку абсолютные значения параметров  $\Theta_0$ и  $\varepsilon_0$  нельзя считать полностью достоверными (особенно относящиеся к азимуту  $\Theta_0$ ), если принять во внимание погрешности поляриметра и приближенную установку оси разъема коллиматора относительно оси поляриметра, мы не стали пересчитывать пары значений  $\{\Theta_0, \varepsilon_0\}$  в значение  $\rho$ , которое можно было бы найти с помощью выражения (10). Но если все же ориентироваться на изменения  $\{\Theta_0, \varepsilon_0\}$ , то можно приближенно оценить значение  $\rho$  на уровне примерно в 1°.



Рис. 5. Эволюция состояния поляризации на сфере Пуанкаре (*a*,*c*) и на плоскости, в координатах  $\Theta$  и є (*b*,*d*). Представлены случаи полной эволюции (*a*,*b*) и ее фрагментов I, II, III, IV (*c*,*d*). Цена деления сетки – 1 град. Аппроксимация экспериментальных точек окружностями на сфере Пуанкаре показана сплошными линиями

Таблица 2

Параметры окружностей, аппроксимирующих измеренные точки эволюции состояния поляризации на сфере Пуанкаре. Второй этап эксперимента (см. рис. 5)

	Значение параметра, град,			
Угловой параметр	для фрагмента			
	Ι	II	III	IV
Радиус <i>R</i>	8,48	7,07	9,19	6,87
Азимут $\Theta_0$	0,86	0,82	1,03	0,87
Эллиптичность є <sub>0</sub>	-0,18	0,07	0,66	0,28

Кроме паспортной точности показаний поляриметра, составляющей  $0,25^{\circ}$ , на результаты измерений могут влиять и другие факторы погрешности, например наличие отклонения экспериментальных точек от вписанной в них окружности, а также прочие, которые в данной работе не изучаются. Таким образом, наблюдаемые значения  $\rho$  на уровне до 1° следует трактовать как верхнюю предельную оценку. Однако, как уже отмечалось, в со-
временных схемах со сварными соединениями ДЛП-волокон другие ключевые параметры рассогласований, и прежде всего, угловые рассогласования осей волокон при стыковке, могут иметь такой же уровень значений.

Все это подтверждает выполнение на практике условий малости отклонения поляризационных свойств реальных ДЛП-волокон от свойств идеальной линейной фазовой пластинки и, соответственно, обосновывает актуальность применения матриц Джонса, введенных в данной работе, при моделировании поляризационных рассогласований в схемах с ДЛП-волокнами.

#### Заключение

В рамках модели фазовой анизотропии получено выражение для матрицы Джонса реального ДЛП-волокна, которое учитывает слабые значения эллиптичности и отклонения азимута собственных мод. Полученную форму матрицы можно использовать при описании оптических схем с ДЛП-волокнами с использованием формализма Джонса при анализе влияния поляризационных рассогласований на работу схемы. Также приведена альтернативная форма матрицы Джонса ДЛП-волокна, в которой азимут и угол эллиптичности собственного состояния заменены другими угловыми параметрами: уровнем отклонения точки собственного состояния поляризации на сфере Пуанкаре и направлением отклонения этой точки от точки для идеального случая. Второй вариант матрицы может иметь преимущество при моделировании систем с численными расчетами и варьировании параметров неидеальности ДЛП-волокна.

Результаты экспериментов иллюстрируют неидеальность реальных ДЛП-волокон в отношении проявления слабой вариации угла эллиптичности и азимута поляризационных мод. Также эксперименты позволили приближенно оценить уровень этих вариаций диапазоном порядка 1°. Это обосновывает использованное в теоретическом анализе условие малости отклонения угла эллиптичности и азимута поляризационных мод ДЛП-волокна относительно идеальной модели, а также подтверждает актуальность использования полученных матриц при анализе современных оптоволоконных схем.

Следует отметить также полученные полезные выражения (см. далее Приложение II, формулу (II-7)), которые представляют матрицу эллиптической фазовой пластинки в явном виде через произвольные угол эллиптичности и азимут собственных состояний поляризации. В известных нам литературных источниках не обнаружено такого явного вида матрицы произвольной эллиптической фазовой пластинки.

#### Приложение І

#### Линейная фазовая пластинка с поворотом

Случай, когда возмущение линейной фазовой пластинки сводится к повороту направлений собственных состояний поляризации, при том что они остаются линейными, можно описать относительно просто. Если элемент с матрицей (1) будет повернут на угол  $\Theta$ , то его матрица Джонса определяется следующим соотношением [2, 4 – 6, 10]:

$$\mathbf{M}_{\text{LPP}\ \Theta} = \mathbf{R}(-\Theta) \cdot \mathbf{M}_{0} \cdot \mathbf{R}(\Theta) , \qquad (\text{I-1})$$

где матрица **R** соответствует матрице поворота (13). Сделав подстановку выражений (1) и (13) в соотношение (I-1), получим матрицу линейной фазовой пластинки при ориентации быстрой оси под углом  $\Theta$  к оси X, которая будет иметь вид

$$\mathbf{M}_{\text{LPP}_{-}\Theta} = \begin{bmatrix} \cos(\varphi/2) + j\cos 2\Theta \cdot \sin(\varphi/2) & j\sin 2\Theta \cdot \sin(\varphi/2) \\ j\sin 2\Theta \cdot \sin(\varphi/2) & \cos(\varphi/2) - j\cos 2\Theta \cdot \sin(\varphi/2) \end{bmatrix}.$$
(I-2)

Матрица (I-2) верна при любых углах  $\Theta$ .

Если полагать, что угол поворота мал, т. е.  $\Theta \ll 1$ , то из вида матрицы (I-2) получим матрицу вида

$$\mathbf{M}_{\text{LPP}_{-}\Theta} = \begin{bmatrix} e^{j\varphi/2} - j2\Theta^2 \sin(\varphi/2) & j2\Theta\sin(\varphi/2) \\ j2\Theta\sin(\varphi/2) & e^{-j\varphi/2} + j2\Theta^2\sin(\varphi/2) \end{bmatrix}.$$
 (I-3)

Далее, если оставить только компоненты первого порядка по  $\Theta$ , то матрица (I-3) преобразуется к виду

$$\mathbf{M}_{\mathrm{LPP}_{-}\Theta} = \begin{bmatrix} e^{j\phi/2} & j2\Theta\sin(\phi/2) \\ j2\Theta\sin(\phi/2) & e^{-j\phi/2} \end{bmatrix}.$$
 (I-4)

Нетрудно видеть, что вид матрицы (I-4) совпадает с вариантом матрицы Джонса (9).

#### Приложение ІІ

#### Эллиптическая фазовая пластинка

В работах [2, 18] приведена в явном виде матрица эллиптической фазовой пластинки для случая, когда азимут собственного состояния поляризации (быстрой моды) совпадает с осью *X*. Эта матрица имеет вид

$$\mathbf{M}_{\text{EPP}}\Big|_{\Theta=0} = \begin{bmatrix} \cos(\varphi/2) + j\sin(\varphi/2)\cos 2\varepsilon & \sin(\varphi/2)\sin 2\varepsilon \\ -\sin(\varphi/2)\sin 2\varepsilon & \cos(\varphi/2) - j\sin(\varphi/2)\cos 2\varepsilon \end{bmatrix}. \quad \text{(II-1)}$$

Вывод выражения (II-1) нетрудно провести путем синтеза матрицы Джонса на основе структуры (6). Действительно, чтобы получить собственные векторы для матрицы  $\mathbf{M}_{\text{EPP}|\Theta=0}$ , следует положить  $\Theta = 0$  в векторе Джонса (3), что дает выражения

$$\mathbf{J}_{1} = \begin{bmatrix} \cos \varepsilon \\ j \sin \varepsilon \end{bmatrix}, \ \mathbf{J}_{2} = \begin{bmatrix} j \sin \varepsilon \\ \cos \varepsilon \end{bmatrix}.$$
(II-2)

Подстановка этих выражений в структуру (6) дает матрицу вида (II-1).

Если полагать, что эллиптичность собственных состояний поляризации мала и  $\varepsilon \ll 1$ , то при замене тригонометрических функций в выражении (II-1) их приближенными аналогами, т. е.  $\sin(x) \approx x$  и  $\cos(x) \approx 1 - x^2/2$ , получим матрицу вида

$$\mathbf{M}_{\text{EPP}}\Big|_{\Theta=0} = \begin{bmatrix} e^{j\phi/2} - j2\varepsilon^2 \sin(\phi/2) & 2\varepsilon \cdot \sin(\phi/2) \\ -2\varepsilon \cdot \sin(\phi/2) & e^{-j\phi/2} + j2\varepsilon^2 \sin(\phi/2) \end{bmatrix}.$$
 (II-3)

Если же сохранить только компоненты первого порядка малости по ε, то получим следующее выражение:

$$\mathbf{M}_{\mathrm{EPP}}\Big|_{\Theta=0} = \begin{bmatrix} e^{j\varphi/2} & 2\varepsilon \cdot \sin(\varphi/2) \\ -2\varepsilon \cdot \sin(\varphi/2) & e^{-j\varphi/2} \end{bmatrix}.$$
 (II-4)

Нетрудно видеть, что этот результат (II-4) полностью совпадает с вариантом матрицы Джонса (9).

Рассмотрение частного случая матрицы эллиптической фазовой пластинки М<sub>ЕРР|Θ=0</sub> логично дополнить вариантом матрицы Джонса эллиптической пластинки произвольной ориентации.

Общий вид такой матрицы можно получить на основе выражения

$$\mathbf{M}_{\text{EPP}} = \mathbf{R}(-\Theta) \cdot \mathbf{M}_{\text{EPP}} \Big|_{\Theta=0} \cdot \mathbf{R}(\Theta) .$$
 (II-5)

Однако можно использовать более общий принцип получения матрицы эллиптической фазовой пластинки — применить выражения (6). Если взять форму записи нормированного вектора Джонса (3) и ортогональный ему вектор, то получим вид собственных векторов матрицы  $\mathbf{M}_{\text{грр}}$  в общем случае как

$$\mathbf{J}_{1} = \begin{bmatrix} \cos \Theta \cdot \cos \varepsilon - j \sin \Theta \cdot \sin \varepsilon \\ \sin \Theta \cdot \cos \varepsilon + j \cos \Theta \cdot \sin \varepsilon \end{bmatrix}, \ \mathbf{J}_{2} = \begin{bmatrix} -\sin \Theta \cdot \cos \varepsilon + j \cos \Theta \cdot \sin \varepsilon \\ \cos \Theta \cdot \cos \varepsilon + j \sin \Theta \cdot \sin \varepsilon \end{bmatrix}.$$
(II-6)

Если подставить выражения (II-6) в формулу (6) и провести тригонометрические преобразования, то получим следующую общую структуру для матрицы Джонса эллиптической фазовой пластинки:

$$\mathbf{M}_{\text{EPP}} = \begin{bmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} + j\cos2\Theta \cdot \cos2\varepsilon \cdot \sin\frac{\varphi}{2} & (\sin2\varepsilon + j\sin2\Theta \cdot \cos2\varepsilon)\sin\frac{\varphi}{2} \\ -(\sin2\varepsilon - j\sin2\Theta \cdot \cos2\varepsilon)\sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} - j\cos2\Theta \cdot \cos2\varepsilon \cdot \sin\frac{\varphi}{2} \end{bmatrix}. \quad (\text{II-7})$$

Это важное выражение для общего случая эллиптической фазовой пластинки отсутствует в известной нам литературе и может быть полезным при выводе матриц Джонса для разнообразных частных случаев фазовых пластинок и анизотропных световодов.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Huard S. Polarization of light. Chichester, UK: John Wiley & Sons, Inc., 1997. 352 p.

2. Ищенко Е. Ф., Соколов А. Л. Поляризационная оптика. 3-е изд., испр. и доп. М.: Физматлит, 2019. 576 с.

3. Аззам Р., Башара Н. Эллипсометрия и поляризованный свет. Пер. с англ. М.: Мир, 1981. 584 с.

4. Джеррард А., Бёрч Дж. М. Введение в матричную оптику. Пер. с англ. М.: Мир, 1978. 344 с.

5. Ярив А., Юх П. Оптические волны в кристаллах. Пер. с англ. М.: Мир, 1987. 616 с.

6. Collett E. Polarized light in fiber optics. Bellingham, Washington, USA: SPIE Press, 2003. 540 p.

7. Temkina V., Medvedev A., Mayzel A. Research on the methods and algorithms improving the measurements precision and market competitive advantages of fiber optic current sensors // Sensors. 2020. Vol. 20. No. 21. P. 5995.

8. **Крылов Г. М., Фатьянов О. В., Дуплинский А. В.** Влияние стыков двулучепреломляющего волокна на дрейф видности в интерферометре Маха – Цендера // Квантовая электроника. 2020. Т. 50. № 5. С. 447–453.

9. Temkina V., Medvedev A., Mayzel A., Sivolenko E. Quarter wave plate for fiber optic current sensor: Comparison of modeling and experimental study // International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies (Proceedings of the YETI 2021, St. Petersburg, Russia). Edited by E. Velichko, V. Kapralova, P. Karaseov, et al. Book Series "Springer Proceedings in Physics". Vol. 268. Springer Cham, 13 January, 2022. Pp. 437–448.

10. Молчанов В. Я., Скроцкий Г. В. Матричный метод вычисления собственных состояний поляризации анизотропных оптических резонаторов (обзор) // Квантовая электроника. 1971. № 4. С. 3–26.

11. Yang J., Yu Z., Yuan L. Characterization of distributed polarization-mode coupling for fiber coils // Peng G. D. (Ed.). Handbook of Optical Fibers. Singapore: Springer Nature Singapore Pte. Ltd., 16 May 2018. 40 p.

12. Wuilpart M., Megret P., Blondel M., Rogers A. J., Defosse Y. Measurement of the spatial distribution of birefringence in optical fibers // IEEE Photonics Technology Letters. 2001. Vol. 13. No. 8. Pp. 836–838.

13. **Rashleigh S.** Origins and control of polarization effects in single-mode fibers // Journal of Lightwave Technology. 1983. Vol. 1. No. 2. Pp. 312–331.

14. Kells L. M., Kern W. F., Bland J. R. Plane and spherical trigonometry. Warsaw: Andesite Press, 2017. 526 p.

15. Polarization Maintaining (PM) Patch Cord 980, 1030, 1064, 1310, 1550 nm. Режим доступа: https://www.afwtechnologies.com.au/pm\_patchcord.html (Дата обращения: 27. 07. 2023).

16. 1550 nm Polarization Maintaining Patch-cord // Режим доступа: https://www.dkphotonics. com/product/1550nm-polarization-maintaining-patch-cord.html (Дата обращения: 27.07.2023).

17. Fedotov A., Ustimchik V., Rissanen J., Kolosovskii A., Voloshin V., Vorob'ev I., Gumenyuk R., Chamorovskiy Y., Filippov V. Active tapered double-clad fiber with low birefringence: supplement // Optics Express. 2021. Vol. 29. No. 11. Pp. 16506–16519.

18. Tentori D., Garcia-Weidner A., Kuzin E. On the birefringence evaluation of single-mode fibers // Revista Mexicana de Fisica. 2016. Vol. 62. No. 4. Pp. 381–392.

#### REFERENCES

1. Huard S., Polarization of light, John Wiley & Sons, Inc., Chichester, UK, 1997.

2. Ishchenko E. F., Sokolov A. L., Polyarizatsionnaya optika [Polarization optics], Third Ed., Fizmatlit Publishing, Moscow, 2019 (in Russian).

3. Azzam R. M. A., Bashara N. M., Ellipsometry and polarized light, Third ed., North Holland Publishing Company, Amsterdam, Netherlands, 1999.

4. Gerrard A., Burch J. M., Introduction to matrix methods in optics, revised ed., Dover Publications, Inc., Dover, USA, 2012.

5. Yariv A., Yeh P., Optical waves in crystals: propagation and control of laser radiation, John Wiley & Sons, Inc., New York, Chichester, Brislane, Toronto, Singapore, 1984.

6. Collett E., Polarized light in fiber optics, SPIE Press, Bellingham, Washington, USA, 2003.

7. Temkina V., Medvedev A., Mayzel A., Research on the methods and algorithms improving the measurements precision and market competitive advantages of fiber optic current sensors, Sensors. 20 (21) (2020) 5995.

8. Krylov G. M., Fat'yanov O. V., Duplinskii A. V., Influence of birefringent fibre joints on the visibility drift in a Mach – Zehnder interferometer, Quantum Electron. 50 (5) (2020) 447–453.

9. Temkina V., Medvedev A., Mayzel A., Sivolenko E., Quarter wave plate for fiber optic current sensor: Comparison of modeling and experimental study, In book: International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies (Proc. YETI 2021, St. Petersburg, Russia), Ed. by E. Velichko, V. Kapralova, P. Karaseov, et al., Book Series "Springer Proceedings in Physics". Vol. 268. Springer Cham, 13 January (2022) 437–448.

10. Molchanov V. Ya., Skrotskii G. V., Matrix method for the calculation of the polarization eigenstates of anisotropic optical resonators, Sov. J. Quantum Electron. 1 (4) (1972) 315–330.

11. Yang J., Yu Z., Yuan L., Characterization of distributed polarization-mode coupling for fiber coils, In book: Peng G. D. (Ed.). Handbook of Optical Fibers. Springer Nature Singapore Pte. Ltd., Singapore, 16 May 2018.

12. Wuilpart M., Megret P., Blondel M., et al., Measurement of the spatial distribution of birefringence in optical fibers, IEEE Photon. Technol. Lett. 13 (8) (2001) 836-838.

13. Rashleigh S., Origins and control of polarization effects in single-mode fibers, J. Light. Technol.
1 (2) (1983) 312–331.

14. Kells L. M., Kern W. F., Bland J. R., Plane and spherical trigonometry, Andesite Press, Warsaw, 2017.

15. Polarization Maintaining (PM) Patch Cord 980, 1030, 1064, 1310, 1550 nm. https://www. afwtechnologies.com.au/pm\_patchcord.html. (Accessed July 27, 2023).

16. 1550 nm Polarization Maintaining (PM) Patch-cord, https://www.dkphotonics.com/product/1550nm-polarization-maintaining-patch-cord.html (Accessed July 27, 2023).

17. Fedotov A., Ustimchik V., Rissanen J., et al., Active tapered double-clad fiber with low birefringence: supplement, Opt. Express. 29 (11) (2021) 16506–16519.

18. Tentori D., Garcia-Weidner A., Kuzin E., On the birefringence evaluation of single-mode fibers, Rev. Mex. Fis. 62 (4) (2016), 381–392.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ТЕМКИНА Валентина Сергеевна** – аспирантка Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 temkina\_vs@spbstu.ru ORCID: 0000-0003-2083-8989

**ЛИОКУМОВИЧ Леонид Борисович** — доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 leonid@spbstu.ru ORCID: 0000-0001-5988-1429

**АРЧЕЛКОВ Арсений Борисович** — студент Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 arsarch11@gmail.com ORCID: 0009-0007-4713-1293

**БУЧИЛКО Игорь Романович** — аспирант Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 igor.buchilko@gmail.com ORCID: 0000-0001-8179-8648

**МЕДВЕДЕВ Андрей Викторович** — кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 medvedev@rphf.spbstu.ru ORCID: 0000-0001-7083-9184

**ПЕТРОВ Александр Викторович** — кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 alexandr-petroff1994@yandex.ru ORCID: 0000-0001-5216-6588

#### THE AUTHORS

#### **TEMKINA Valentina S.**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia temkina\_vs@spbstu.ru ORCID: 0000-0003-2083-8989

## LIOKUMOVICH Leonid B.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia leonid@spbstu.ru ORCID: 0000-0001-5988-1429

## **ARCHELKOV** Arseniy B.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia arsarch11@gmail.com ORCID: 0009-0007-4713-1293

## BUCHILKO Igor R.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia igor.buchilko@gmail.com ORCID: 0000-0001-8179-8648

### **MEDVEDEV** Andrei V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia medvedev@rphf.spbstu.ru ORCID: 0000-0001-7083-9184

### **PETROV** Aleksandr V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia alexandr-petroff1994@yandex.ru ORCID: 0000-0001-5216-6588

Статья поступила в редакцию 19.06.2023. Одобрена после рецензирования 02.08.2023. Принята 02.08.2023. Received 19.06.2023. Approved after reviewing 02.08.2023. Accepted 02.08.2023.

# Theoretical physics

Original article UDC 510.10 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16310

# DERIVATION OF THE LORENTZ TRANSFORMATION FOR DETERMINATION OF SPACE CONTRACTION

## C. B. Khadka 🖾

Tri-Chandra Multiple College, Tribhuvan University, Kathmandu, Nepal

#### <sup>™</sup> chandrabahadur9988@gmail.com

**Abstract.** The paper demonstrates the incompleteness of the relativistic space contraction formula for space-time coordinates transformation between inertial frames of reference in the existing normally acknowledged version of the theory of special relativity. The reason is the lack of a formula expressing the space contraction in terms of the cosines of the direction of an object's movement. Thus a modified version of the special relativity theory has been presented through a natural extension of the Lorentz transformation to three dimensions of space. The new transformations are based on the same mathematical operation as the Lorentz transformation, and provide mathematical information similar to that of a single-axis movement. An expression for the new transformation between inertial frames, when there was simultaneous relative motion in three directions, was introduced. The presence of relative motion in three directions between a parallelepiped and an observer (were introduced) made it possible to obtain the formulas of the directions of the ends of the parallelepiped. In fact, the Lorentz transformation was interpreted, revealing transformation of space-time coordinates in three dimensions. This offers ample scope for finding the space contraction within moving frame of reference.

Keywords: frame of reference, Lorentz transformation, special relativity, space contraction

**For citation:** Khadka C. B., Derivation of the Lorentz transformation for determination of space contraction, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 115–130. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16310

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 510.10 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16310

# ВЫВОД ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЛОРЕНЦА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СЖАТИЯ ПРОСТРАНСТВА

#### Ч.Б. Хадка 🖾

Многопрофильный колледж Три-Чандра Университета Трибхувана,

г. Катманду, Непал

#### <sup>™</sup> chandrabahadur9988@gmail.com

Аннотация. В статье показано, что формула релятивистского сжатия пространства для преобразования пространственно-временных координат между инерциальными системами отсчета в существующей общепризнанной версии специальной теории относительности является неполной. Причина состоит в отсутствии формулы, выражающей сжатие пространства через косинусы направления движения объекта. Поэтому представлена модифицированная версия специальной теории относительности путем естественного расширения преобразования Лоренца до трех измерений пространства.

© Khadka C. B., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Новые преобразования основаны на той же математической операции, что и преобразование Лоренца, и обеспечивают математическую информацию, аналогичную таковой для движения по одной оси. Вводится выражение для нового преобразования между инерциальными системами отсчета, когда одновременно происходит относительное движение по трем направлениям. Наличие относительного движения по трем направлениям. Наличие относительного движения по трем направлениям между параллелепипедом и наблюдателем (введены) позволяет получить формулы для косинусов направлений концов параллелепипеда. Фактически интерпретировано преобразование Лоренца, позволяющее преобразовывать пространственно-временные координаты в трех измерениях, а это дает возможность определять сжатие пространства в движущейся системе отсчета.

Ключевые слова: система отсчета, преобразование Лоренца, специальная теория относительности, сжатие пространства

Ссылка при цитировании: Хадка Ч. Б., Вывод преобразования Лоренца для определения сжатия пространства // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 115–130. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16310

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

#### Introduction

In present time, the special theory of relativity [1, 2] has produced the most profound effect on the entire field of physics to describe relativistic nature of mass, space and time. But its creators Hendrik Antoon Lorentz and Albert Einstein (both of them are Nobel Prize winners in physics in 1902 and 1921, respectively) [3] could not provide accurate information about space contraction, although there was all necessary information at that time. Before to enter into shortcomings of existing version of special theory of relativity, it would be useful to perceive the logic of its formulation and the process by which it was formulated. The Lorentz transformation [4, 5] plays a crucial role in the formulation of the special theory of relativity.

In order to get Lorentz transformation equations, we consider two coordinate systems: S and S'. The S' system must move in the positive X-direction at a uniform velocity V (Fig. 1). Then the Lorentz transformation equations will be generally formulated as a one-dimensional system whose motion is assumed to be aligned with X-direction [6]. There is a relative motion only in X-axis and not in Y- and Z-directions. The space and time coordinates of S and S' are interrelated by the Lorentz transformation equations, as follows:



Fig. 1. An event at a point P observed from frames S and S'

#### © Хадка Ч. Б., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

$$X' = \frac{X - Vt}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}, \ t' = \frac{t - \frac{VX}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}, \ Y' = Y, \ Z' = Z.$$

Here, the complete mathematical calculations related with the relativistic phenomenon of an object [7, 8] are performed only for X-axis. Moreover, the length contraction [9, 10] or the object length will appear to be shortened only along X-axis in the S' system for the observer. Hence, the moving frame of reference is constrained to one-dimensional motion [11, 12]. That is why it is necessary to set the motion of travelling frame S' in such a way that there would be relative motion in X-, Y- and Z-axes simultaneously. For new transformation, instead of the above equation, we have simply the following one:

$$x' = \frac{X - \frac{VXt}{\sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}}}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}, \ t' = \frac{t - V \frac{\sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}},$$
$$y' = \frac{y - \frac{Vyt}{\sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}}}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}, \ z' = \frac{z - \frac{Vzt}{\sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}}}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}.$$

The behavior of space contraction along each direction is well accounted by this formula. It agrees with the ordinary transformation as the relative motion between inertial frames constrained along single dimension. It manifests the inadequacy of ordinary transformation, namely, the need for expression of space contraction in three dimensions of space to relate with direction cosines.

In this paper, the velocity of the moving frame of reference has different components along each direction that are thoroughly put on mathematical calculation in an effort to reach a rational conclusion regarding space contraction [13, 14]. Pure mathematical methods are used as main tools in achieving the objective of this study. In section "Methods used", we show how the transformation equations between inertial frames can be formulated for extension of the Lorentz transformation to higher dimensions. Following this, we develop the new formulas for space-time coordinate transformation along X-, Y- and Z-directions in three dimensions of space. In subsequent section "Results and discussion", we give a detailed description of our results including association of space contraction with direction cosines of position vectors. In section "Conclusions" the concluding remarks are presented.

#### Methods used

**The light wavefront equation.** Let two frames S and S', such as S' frame of Refs. [15, 16], move with a uniform velocity (see Fig. 2). Let origin O and O' of two coordinate systems coincide at t = t' = 0 and a source of light flashes at the origin O at t = 0, when O and O' coincide. Then, in view of constancy of electromagnetic wave speed c with respect to the motion of two frames of reference, each observer at O and O' claims to be at the center of the spreading spherical wavefront of light pulses [17, 18]. When the light is at the point P, let the space-time coordinate be measured by the observers O and O' (X, Y, Z, t) and (X', Y', Z', t') respectively. Since both the observers are at the center of the same expanding wavefront, the wavefront equation of the frames S and S' should take the form [19, 20]:

$$R^{2} - c^{2}t^{2} = (R')^{2} - c^{2}(t')^{2};$$
(1)

$$X^{2} + Y^{2} + Z^{2} - c^{2}t^{2} = (X')^{2} + (Y')^{2} + (Z')^{2} - c^{2}(t')^{2}.$$

**Transformation equation in three dimensions.** In three dimensions, there is a relative motion along X-, Y- and Z-directions simultaneously. Let R and R' be a position of point P measured from frames of references S and S' respectively. Let  $\psi$  and  $\psi'$  be angles made by the radius-vectors R and R' with Z- and Z'-axes in the S and S' frames of reference, respectively. Since V and c are the velocity of the moving frame and the light wavefront along radius-vectors R and R', just as V·cos $\psi$  and V·cos $\psi'$  are the Z- and Z'-components of velocity, V·sin $\psi$  and V·sin $\psi'$  are the

velocity components along  $r = \sqrt{X^2 + Y^2}$  and  $r' = \sqrt{(X')^2 + (Y')^2}$  in XY- plane.



Fig. 2. The inertial systems S and S' in the three-dimensional space

Let  $\theta$  and  $\phi$  be the angles of radius-vectors **r** and **r'** with X- and X-axes respectively. Thus, V·sin $\psi$ ·cos $\theta$  and V·sin $\psi$ '·cos $\phi$  are the X- and X'-components of velocity **V**. In a similar manner, V·sin $\psi$ ·sin $\theta$  and V·sin $\psi$ '·sin $\phi$  are the Y- and Y'- components (respectively) of the velocity **V**.

Equations for the transformation of the frame S into frame S' are as follows:

$$Y' = Y - V_{y}t, X' = X - V_{x}t, Z' = Z - V_{z}t,$$

where  $V_z = V \cdot \cos \psi$  and  $V \cdot \sin \psi$  are the velocity components in Z-axis and on the XY-plane, respectively.

Therefore, the velocity components in X- and Y-axes must be  $V \cdot \cos\theta \cdot \sin\psi$  and  $V \cdot \sin\theta \cdot \sin\psi$ , respectively.

In this case, the above transformation equations take the form (see Fig. 2)

$$Z' = Z - Vt \cdot \cos \psi$$
,  $Y' = Y - Vt \cdot \sin \theta \cdot \sin \psi$ ,  $X' = X - Vt \cdot \cos \theta \cdot \cos \psi$ ;

now in the triangle OPQ,

$$\cos \psi = \frac{OQ}{OP} = \frac{Z}{\sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}} = \frac{Z}{R}, \ \sin \psi = \frac{PQ}{OP} = \frac{\sqrt{X^2 + Y^2}}{\sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}} = \frac{r}{R};$$

in the triangle OMN,

$$\cos \theta = \frac{OM}{ON} = \frac{X}{\sqrt{X^2 + Y^2}} = \frac{X}{r}, \ \sin \theta = \frac{MN}{ON} = \frac{Y}{\sqrt{X^2 + Y^2}} = \frac{Y}{r}$$

Substituting their values into the above transformation equations (of frame S into S'), we get

$$Z' = Z - \frac{VtZ}{R},\tag{2}$$

$$Y' = Y - \frac{VtrY}{Rr} = Y - \frac{VtY}{R},\tag{3}$$

$$X' = X - \frac{VtrX}{Rr} = X - \frac{VtX}{R}.$$
(4)

Again, transformation equations of S' into S are expressed as

$$Z = Z' + V'_{z} t', Y = Y' + V'_{y} t', X = X' + V'_{x} t',$$

where  $V' = V \cdot \cos \psi'$  and  $V \cdot \sin \psi'$  are the velocity components in Z'-axis and X'Y'-plane, respectively. Therefore, the velocity components along X'- and Y'-axes should be  $V \cdot \cos \phi \cdot \sin \psi'$  and

 $V \cdot \sin \phi \cdot \sin \psi'$  respectively, in which case the above transformation equations take the form

$$Z = Z' + Vt' \cdot \cos\psi', Y = Y' + Vt' \cdot \sin\phi \cdot \sin\psi', X = X' + Vt' \cdot \cos\phi \cdot \sin\psi';$$

now in the triangle O'P'Q',

$$\cos\psi' = \frac{O'Q'}{O'P} = \frac{Z'}{R'} = \frac{Z'}{\sqrt{(X')^2 + (Y')^2 + (Z')^2}}, \quad \sin\psi' = \frac{PQ'}{O'P} = \frac{r'}{R'} = \frac{\sqrt{(X')^2 + (Y')^2}}{\sqrt{(X')^2 + (Y')^2 + (Z')^2}};$$

in the triangle O'M'N',

$$\cos\phi = \frac{O'M'}{O'N'} = \frac{X'}{\sqrt{(X')^2 + (Y')^2}} = \frac{X'}{r'}, \ \sin\phi = \frac{M'N'}{O'N'} = \frac{y'}{\sqrt{(X')^2 + (Y')^2}} = \frac{Y'}{r'}.$$

Substituting these expressions in the above transformation equations of frame S into S' we get

$$Z = Z' + \frac{Vt'Z'}{R'},\tag{5}$$

$$Y = Y' + \frac{Vr'}{R'} \cdot \frac{V't'}{r'} = Y' + \frac{VY't'}{R'},$$
(6)

$$X = X' + \frac{Vr'}{R'} \cdot \frac{Xt'}{r'} = X' + \frac{VXt'}{R'}.$$
(7)

Now radius-vector R' in S' frame of reference when the relative motion along X-, Y- and Z-axes takes place, is

$$(R')^2 = (X')^2 + (Y')^2 + (Z')^2.$$

Substituting expressions from transformation Eqs. (2), (3) and (4) here, we get

$$\left(R'\right)^{2} = \left(X - \frac{VtX}{R}\right)^{2} + \left(Y - \frac{VtY}{R}\right)^{2} + \left(Z - \frac{VtZ}{R}\right)^{2},$$
  
or  $\left(R'\right)^{2} = X^{2} - \frac{2VtX^{2}}{R} + \frac{V^{2}X^{2}t^{2}}{R^{2}} + Y^{2} - \frac{2VtY^{2}}{R} + \frac{V^{2}Y^{2}t^{2}}{R^{2}} + Z^{2} - \frac{2VtZ^{2}}{R} + \frac{V^{2}Z^{2}t^{2}}{R^{2}},$   
or  $\left(R'\right)^{2} = X^{2} + Y^{2} + Z^{2} - 2tV\left(\frac{X^{2} + Y^{2} + Z^{2}}{R}\right) + t^{2}V^{2}\left(\frac{X^{2} + Y^{2} + Z^{2}}{R^{2}}\right).$   
ording to Fig. 2, radius-vector *R* in *S* frame of reference is given by

According to Fig. 2, radius-vector R in S frame of reference is given by  $R^2 = V^2 + V^2 + Z^2$ 

then 
$$(R')^2 = R^2 - \frac{2VtR^2}{R} + \frac{t^2V^2R^2}{R^2}$$
, or  $(R')^2 = R^2 - 2tVR + t^2V^2$ , or  $(R')^2 = (R - tV)^2$ ,  
 $R' = R - tV.$  (8)

119

This is a transformation equation of frame S' into frame S in term of the radius-vector when there is a relative motion along X-, Y- and Z-axes simultaneously.

Again, the radius-vector in S frame of reference is

$$R^2 = X^2 + Y^2 + Z^2.$$

Substituting the expressions from transformation Eqs. (2), (3) and (4), we get

$$R^{2} = \left(X' + \frac{VX't'}{R'}\right)^{2} + \left(Y' + \frac{VY't'}{R'}\right)^{2} + \left(Z' + \frac{VZ't'}{R'}\right)^{2},$$
  
or  $R^{2} = X^{2} + \frac{2Vt'(X')^{2}}{R'} + \frac{V^{2}(X')^{2}t'^{2}}{R'^{2}} + (Y')^{2} + \frac{2Vt'(Y')^{2}}{R'} + \frac{V^{2}(Y')^{2}(t')^{2}}{R'} + (Z')^{2} + \frac{2Vt'(Z')^{2}}{R'} + \frac{V^{2}(Z')^{2}(t')^{2}}{R},$   
or  $R^{2} = (X')^{2} + (Y')^{2} + (Z')^{2} + 2Vt' \left[\frac{(X')^{2} + (Y')^{2} + (Z')^{2}}{R'}\right] + V^{2}(t')^{2} \left[\frac{(X')^{2} + (Y')^{2} + (Z')^{2}}{(R')^{2}}\right].$ 

According to Fig. 2, radius-vector R' in S' frame of reference is given by

$$(R')^{2} = (X')^{2} + (Y')^{2} + (Z')^{2},$$
  
then  $R^{2} = R' + \frac{2Vt'(R')^{2}}{R} + \frac{V^{2}(t')^{2}(R')^{2}}{(R')^{2}}, \text{ or } R^{2} = (R')^{2} + 2Vt'R' + V^{2}t'^{2}, \text{ or } R^{2} = (R' + Vt')^{2},$   
 $R = R' - Vt'.$  (9)

This is a transformation equation of frame S' into S in terms of the radius-vector when there is the relative motion along X- and Y-axes simultaneously.

The Lorentz transformation equation. The transformation equations related to R' and R can be written from Eqs. (8) and (9) as follows:

$$R' = \lambda(R - Vt), R = \lambda' (R' + Vt'),$$

where  $\lambda$  and  $\lambda'$  are independent of *R*, *R'* and *t*.

Furthermore,

$$R = \lambda' (R' + Vt'), R = \lambda' [\lambda (R - Vt) + Vt'],$$
  
or  $R = \lambda' \lambda R - \lambda' \lambda Vt + \lambda' Vt'$ , or  $t' = \frac{R}{\lambda' V} - \frac{\lambda' \lambda R}{\lambda' V} + \frac{\lambda' \lambda Vt}{\lambda' V},$  (10)  
or  $t' = \lambda t + \frac{R}{\lambda' V} - \frac{\lambda R}{V},$  or  $t' = \lambda \left[ t - \frac{R}{V} \left( 1 - \frac{1}{\lambda \lambda'} \right) \right].$ 

Eq. (1) gives the wavefront equation as

$$X^{2} + Y^{2} + \overline{Z}^{2} - c^{2}t^{2} = (X')^{2} + (Y')^{2} + (Z')^{2} - c^{2}(t')^{2}$$

or 
$$R^2 - c^2 t^2 = (R')^2 - (c')^2 (t')^2$$
.

Substituting R' and t' expressions from Eqs. (9) and (10), we get

$$R^{2}-c^{2}t^{2}=\lambda^{2}\left(R-Vt\right)^{2}-c^{2}\lambda^{2}\left[t-\frac{R}{V}\left(1-\frac{1}{\lambda\lambda'}\right)\right]^{2},$$

or 
$$R^2 - c^2 t^2 = \lambda^2 R^2 - 2\lambda^2 R V t + \lambda^2 V^2 t^2 - c^2 \lambda^2 t^2 + 2c^2 \lambda^2 t \frac{R}{V} \left(1 - \frac{1}{\lambda \lambda'}\right) - c^2 \lambda^2 \frac{R^2}{V^2} \left(1 - \frac{1}{\lambda \lambda'}\right)^2$$
,  
or  $R^2 - c^2 t^2 = R^2 \left[\lambda^2 - \frac{c^2 \lambda^2}{V^2} \left(1 - \frac{1}{\lambda \lambda'}\right)^2\right] + Rt \left[-2\lambda^2 V + \frac{2c^2 \lambda^2}{V} \left(1 - \frac{1}{\lambda \lambda'}\right)\right] + t^2 \left(\lambda^2 V^2 - c^2 \lambda^2\right)$ .

Equating the coefficients of  $R^2$ , Rt and  $t^2$  on both sides of the equations, we get

$$\lambda^2 - \frac{c^2 \lambda^2}{V^2} \left( 1 - \frac{1}{\lambda \lambda'} \right)^2 = 1, \tag{11}$$

$$2\lambda^2 V + \frac{2c^2 \lambda^2}{V} \left( 1 - \frac{1}{\lambda \lambda'} \right) = 0, \tag{12}$$

$$\lambda^2 V^2 - \lambda^2 c^2 = -c^2. \tag{13}$$

From Eq. (13) it follows that

\_

$$\lambda^{2}(c^{2} - V^{2}) = -c^{2}, \ \lambda^{2} = \frac{c^{2}}{c^{2} - V^{2}} = \frac{1}{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}},$$

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}}.$$
(14)

Furthermore,

$$\lambda^{2} = \frac{1}{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}, \text{ or } 1 - \frac{V^{2}}{c^{2}} = \frac{1}{\lambda^{2}},$$
  
or  $\frac{V^{2}}{c^{2}} = 1 - \frac{1}{\lambda^{2}}.$  (15)

From Eq. (12), we have an equation

$$-V + \frac{c^2}{V^2} \left( 1 - \frac{1}{\lambda \lambda'} \right) = 0, \quad \text{or } \frac{-V^2 + c^2 \left( 1 - \frac{1}{\lambda \lambda'} \right)}{V} = 0, \text{ or } V^2 = c^2 \left( 1 - \frac{1}{\lambda \lambda'} \right),$$
$$\text{or } \frac{V^2}{c^2} = 1 - \frac{1}{\lambda \lambda'}. \tag{16}$$

1

Comparing Eqs. (15) and (16) we get

$$1 - \frac{1}{\lambda^2} = 1 - \frac{1}{\lambda \lambda'}, \text{ or } \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda'},$$
  
or  $\lambda = \lambda' = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}.$ 

Therefore, the required transformation equations are, as follows:

$$R' = \frac{R - Vt}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}, \text{ or } \sqrt{\left(X'\right)^2 + \left(Y'\right)^2 + \left(Z'\right)^2} = \frac{\sqrt{\left(X'\right)^2 + \left(Y'\right)^2 + \left(Z'\right)^2 - Vt}}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}};$$
$$t' = \lambda \left[ t - \frac{R}{V} \left( 1 - \frac{1}{\lambda \lambda'} \right) \right], t' = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}} \left[ t - \frac{R}{V} \cdot \frac{V^2}{c^2} \right],$$
$$t' = \frac{t - \frac{RV}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}, t' = \frac{t - V \frac{\sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}.$$

The inverse Lorentz transformation equations when the relative motion takes place along X-and Y-directions simultaneously, are

$$R = \frac{R' + Vt'}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}},$$
  
or  $\sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2} = \frac{\sqrt{(X')^2 + (Y')^2 + (Z')^2} + Vt'}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}};$   
$$t = \frac{t' + V \frac{\sqrt{(X')^2 + (Y')^2 + (Z')^2}}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}.$$
 (17)

These equations convert a measurement made in frame S' into those in frame S. Thus, it is quite clear from these equations, that the measurements of space and time in the threedimensional space are included X-, Y- and Z-axes in one equation.

#### **Results and discussion**

The transformation equations relating to radius-vectors R and R' when the relative motion along X-, Y- and Z-axes takes place, can be written using Eqs. (8) and (9), as follows:

$$R' = \lambda \left( R - tV \right) = \frac{R - tV}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}, \quad R = \lambda' \left( R' + t'V \right) = \frac{R' + t'V}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}, \quad R = \lambda' \left( R' + Vt' \right),$$
  
or  $R^2 = (\lambda')^2 (R' + Vt')^2$ , or  $R^2 = (\lambda')^2 \left[ (R')^2 + 2Vt'R' + V^2(t')^2 \right],$   
or  $R^2 = \left( \lambda' \right)^2 \left[ \left( R' \right)^2 + \frac{2Vt'(R')^2}{R'} + \frac{V^2t'^2(R')^2}{\left( R' \right)^2} \right].$ 

Now, substituting the expression

$$(R')^2 = (X')^2 + (Y')^2 + (Z')^2$$

we get, as follows:

$$R^{2} = (\lambda')^{2} \left\{ \left[ (X')^{2} + (Y')^{2} + (Z')^{2} + 2Vt' \right] \left[ \frac{(X')^{2} + (Y')^{2} + (Z')^{2}}{R'} \right] + V^{2} (t')^{2} \left[ \frac{(X')^{2} + (Y')^{2} + (Z')^{2}}{(R')^{2}} \right] \right\},$$

$$R^{2} = (\lambda')^{2} \left[ (X')^{2} + \frac{2Vt'(X')^{2}}{R'} + \frac{V^{2} (X')^{2} t'^{2}}{(R')^{2}} + (Y')^{2} + \frac{2Vt'(Y')^{2}}{R'} + \frac{V^{2} (Y')^{2} (t')^{2}}{(R')^{2}} + (Y')^{2} + \frac{2Vt'(Y')^{2}}{R'} + \frac{V^{2} (Y')^{2} (t')^{2}}{(R')^{2}} + (Z')^{2} + \frac{2Vt'(Z')^{2}}{R'} + \frac{V^{2} (Z')^{2} (t')^{2}}{(R')^{2}} \right],$$
or  $R^{2} = (\lambda')^{2} \left[ \left( X' + \frac{VXt'}{R'} \right)^{2} + \left( Y' + \frac{VYt'}{R'} \right)^{2} + \left( Z' + \frac{VZ't'}{R'} \right)^{2} \right],$ 
or  $R^{2} = (\lambda')^{2} \left[ \left( X' + \frac{VXt'}{R'} \right)^{2} + (\lambda')^{2} \left( Y' + \frac{VYt'}{R'} \right)^{2} + (\lambda')^{2} \left( Z' + \frac{VZ't'}{R'} \right)^{2} \right],$ 

$$R^{2} = X^{2} + Y^{2} + Z^{2},$$

$$R^{2} = X^{2} + Y^{2} + Z^{2},$$

where 
$$X^{2} = (\lambda')^{2} \left( X' + \frac{VX't'}{R'} \right)^{2}, \quad X = \lambda' \left( X' + \frac{VX't'}{R'} \right), \quad X = \frac{X' + \frac{VX't}{R'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}},$$
 (18)

and 
$$Y^{2} = (\lambda')^{2} \left(Y' + \frac{VY't'}{R'}\right)^{2}, \quad Y = \lambda' \left(Y' + \frac{VY't'}{R'}\right), \quad Y = \frac{Y' + \frac{VY't'}{R'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}},$$
 (19)

and 
$$Z^{2} = (\lambda')^{2} \left( Z' + \frac{VZ't'}{R'} \right)^{2}, \ Z = \lambda' \left( Z' + \frac{VZ't'}{R'} \right), \ Z = \frac{Z' + \frac{VZ't'}{R'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}}.$$
 (20)

Consider two frames of reference S and S' coinciding at t = 0. Let the S' frame of reference move at a constant velocity V in space (see Fig. 3). Let  $(X_1, Y_1, Z_1)$  and  $(X'_1, Y'_1, Z'_1)$  be positions of point P in a parallelepiped measured by S and S' frames, respectively, as well as  $(X_2, Y_2, Z_2)$ and  $(X'_2, Y'_2, Z'_2)$  be positions of point Q in the given parallelepiped measured by S and S' frames. The length of the parallelepiped is

or

$$L_0 = X_2 - X_1. (21)$$

This length  $L_0$  in the stationary frame of reference is known as the proper length. The inverse Lorentz transformation of X-coordinates of the parallelepiped is given by Eq. (18), in which case it is 17171 T 7 T 7 I I

$$X_{1} = \frac{X_{1}' + \frac{VX_{1}'t'}{R_{1}'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}}, \quad X_{2} = \frac{X_{2}' + \frac{VX_{2}'t'}{R_{2}'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}},$$
123



Fig. 3. The illustration explaining the formulation of the problem of space contraction

where  $X'_1$  and  $X'_2$  are the coordinates of the parallelepiped length in frame S' moving at constant velocity V, as noted, simultaneously, at the same moment t'.

Substituting the expressions into Eq. (21) we get

$$\begin{split} L_{0} &= \frac{X_{2}' + \frac{VX_{2}'t'}{R_{2}'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}} - \frac{X_{1}' + \frac{VX_{1}'t'}{R_{1}'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}}, \ L_{0} &= \frac{X_{2}' - X_{1}' + Vt' \left(\frac{X_{2}'}{R_{2}'} - \frac{X_{1}'}{R_{1}'}\right)}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}} \\ \text{or} \ L_{0} &= \sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}} = X_{2}' - X_{1}' + Vt' \left(\frac{X_{2}'}{R_{2}'} - \frac{X_{1}'}{R_{1}'}\right), \\ \text{or} \ X_{2}' - X_{1}' = L_{0}\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}} - Vt' \left(\frac{X_{2}'}{R_{2}'} - \frac{X_{1}'}{R_{1}'}\right). \end{split}$$

According to definition of direction cosines,

$$\frac{X_2'}{R_2'} = \frac{X_2'}{\sqrt{(X_2')^2 + (Y_2')^2 + (Z_2')^2}}$$

is the expression for the cosine of the angle between the line joining the point O' to point Q, and X'-axis.

Hence,

$$\frac{X_2'}{\sqrt{\left(X_2'\right)^2 + \left(Y_2'\right)^2 + \left(Z_2'\right)^2}} = l_2'$$

is the direction cosine of the line joining point O' to Q. Similarly,

$$\frac{X_1'}{\sqrt{\left(X_1'\right)^2 + \left(Y_1'\right)^2 + \left(Z_1'\right)^2}} = l_1'$$

is the direction cosine of the line joining point O' to P.

Now, the above equation takes the form

$$X'_{2} - X'_{1} = L_{0}\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}} - Vt'(l'_{2} - l'_{1}), \quad L = L_{0}\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}} - Vt'(l'_{2} - l'_{1}), \quad (22)$$

where L is the parallelepiped length (22) for an observer in frame S' (called improper length). Similarly, the breadth of the parallelepiped is

$$B_0 = Y_2 - Y_1. (23)$$

This breadth  $B_0$  of the parallelepiped in the stationary frame of reference is known as the proper breadth. The inverse Lorentz transformation of Y-coordinates of the parallelepiped is given by Eq. (23) as follows:

$$Y_{1} = \frac{Y_{1}' + \frac{VY_{1}'t'}{R_{1}'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}}, \quad Y_{2} = \frac{Y_{2}' + \frac{VY_{2}'t'}{R_{2}'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}},$$

where  $Y'_1$  and  $Y'_2$  are the coordinates of the parallelepiped breadth in frame S' moving at a constant velocity V (as noted) simultaneously at the same moment t'.

Substituting the expressions into Eq. (23) we get

$$B_{0} = \frac{Y_{2}' + \frac{VY_{2}'t'}{R_{2}'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}} - \frac{Y_{1}' + \frac{VY_{1}'t'}{R_{1}'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}}, \quad B_{0} = \frac{Y_{2}' - Y_{1}' + Vt'\left(\frac{Y_{2}'}{R_{2}'} - \frac{Y_{1}'}{R_{1}'}\right)}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}},$$
  
or  $B_{0}\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}} = Y_{2}' - Y_{1}' + Vt'\left(\frac{Y_{2}'}{R_{2}'} - \frac{Y_{1}'}{R_{1}'}\right), \text{ or } Y_{2}' - Y_{1}' = B_{0}\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}} - Vt'\left(\frac{Y_{2}'}{R_{2}'} - \frac{Y_{1}'}{R_{1}'}\right)$ 

According to definition of direction cosines,

$$\frac{Y_2'}{R_2'} = \frac{Y_2'}{\sqrt{(X_2')^2 + (Y_2')^2 + (Z_2')^2}}$$

is the expression for the cosine of the angle between the line joining point O' to point Q, and Y'-axis.

Hence,

$$\frac{Y_2'}{\sqrt{\left(X_2'\right)^2 + \left(Y_2'\right)^2 + \left(Z_2'\right)^2}} = m_2$$

is the direction cosine of the line joining point O' to Q. Similarly,

$$\frac{Y_1'}{\sqrt{\left(X_1'\right)^2 + \left(Y_1'\right)^2 + \left(Z_1'\right)^2}} = m_1'$$

is the direction cosine of the line joining point O' to point P.

Hence, the above equation takes the form, as follows:

$$Y_{2}' - Y_{1}' = B_{0} \sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}} - Vt' \left( m_{2}' - m_{1}' \right),$$
  
$$B = B_{0} \sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}} - Vt' \left( m_{2}' - m_{1}' \right),$$
 (24)

where B is the parallelepiped breadth for an observer in frame S' (called the improper breadth).

Similarly, the height of the parallelepiped is

$$H_0 = Z_2 - Z_1. (25)$$

This height  $H_0$  of the parallelepiped in the stationary frame of reference is known as the proper height.

The inverse Lorentz transformation of Z-coordinates of the parallelepiped is given by Eq. (22):

$$Z_{1} = \frac{Z_{1}' + \frac{VZ_{1}'t'}{R_{1}'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}}, \quad Z_{2} = \frac{Z_{2}' + \frac{VZ_{2}'t'}{R_{2}'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}},$$

where  $Z'_1$  and  $Z'_2$  are the coordinates of the parallelepiped height in frame S' moving at constant velocity V as noted simultaneously, at the same moment t'.

Substituting the expressions into Eq. (25) we get

$$H_{0} = \frac{Z_{2}' + \frac{VZ_{2}'t'}{R_{2}'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}} - \frac{Z_{1}' + \frac{VZ_{1}'t'}{R_{1}'}}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}}, \quad H_{0} = \frac{Z_{2}' - Z_{1}' + Vt'\left(\frac{Z_{2}'}{R_{2}'} - \frac{Z_{1}'}{R_{1}'}\right)}{\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}}},$$
or  $H_{0}\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}} = Z_{2}' - Z_{1}' + Vt'\left(\frac{Z_{2}'}{R_{2}'} - \frac{Z_{1}'}{R_{1}'}\right),$  or  $Z_{2}' - Z_{1}' = H_{0}\sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}} - Vt'\left(\frac{Z_{2}'}{R_{2}'} - \frac{Z_{1}'}{R_{1}'}\right)$ 

According to definition of direction cosines,

$$\frac{Z_2'}{R_2'} = \frac{Z_2'}{\sqrt{(X_2')^2 + (Y_2')^2 + (Z_2')^2}}$$

is the expression for the cosine of the angle between the line joining point O' to point Q, and Z'-axis.

Hence,

$$\frac{Z'_2}{\sqrt{\left(X'_2\right)^2 + \left(Y'_2\right)^2 + \left(Z'_2\right)^2}} = n'_2$$

is the direction cosine of the line joining point O' to Q. Similarly,

$$\frac{Z'_1}{\sqrt{\left(X'_1\right)^2 + \left(Y'_1\right)^2 + \left(Z'_1\right)^2}} = n'_1$$

is the direction cosine of the line joining point O' to P.

Now, the above equation takes the form, as follows:

$$Z_{2}' - Z_{1}' = H_{0} \sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}} - Vt' \left( n_{2}' - n_{1}' \right),$$
  

$$H = H_{0} \sqrt{1 - \frac{V^{2}}{c^{2}}} - Vt' \left( n_{2}' - n_{1}' \right),$$
(26)

where H is the parallelepiped height for an observer in frame S' (called the improper height).

From Eqs. (22), (24) and (26), one can see that the length, breadth and height contractions of the parallelepiped depend upon the direction cosines of the angles formed between the straight line and the coordinate axes.

Eq. (26) vanishes when there is no relative motion along Z-axis, as follows:

$$n_2' - n_1' = 0$$
, or  $\frac{Z_2'}{\sqrt{(X_2')^2 + (Y_2')^2 + (Z_2')^2}} = \frac{Z_1'}{\sqrt{(X_1')^2 + (Y_1')^2 + (Z_1')^2}} = 0$ , or  $z_2' = z_1' = 0$ 

Thus,

$$H_0 = Z_2' - Z_1' = 0$$

in the absence of relative motion along Z-axis. Similarly,

$$B_0 = Y_2' - Y_1' = 0$$

in the absence of relative motion along Y-axis.

Table

# Equation of space contraction Motion between inertial frames Along X-axis Along Y-axis Along Z-axis along axes (breadth contraction) (height contraction) (length contraction) $L = L_0 \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} B = B_0 \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} H = H_0 \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} -Vt' \left[ \frac{X_2'}{\sqrt{(X_2')^2 + (Y_2')^2 + (Z_2')^2}} - \left| -Vt' \left[ \frac{Y_2'}{\sqrt{(X_2')^2 + (Y_2')^2 + (Z_2')^2}} - \left| -Vt' \left[ \frac{Z_2'}{\sqrt{(X_2')^2 + (Y_2')^2 + (Z_2')^2}} - \frac{X_1'}{\sqrt{(X_1')^2 + (Y_1')^2 + (Z_1')^2}} \right] - \frac{Y_1'}{\sqrt{(X_1')^2 + (Y_1')^2 + (Z_1')^2}} \right] - \frac{Z_1'}{\sqrt{(X_1')^2 + (Y_1')^2 + (Z_1')^2}} = n_1'$ X, Y, Z $L = L_0 \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} - B = B_0 \sqrt{1 -$ $-Vt' \left[ \frac{X_2'}{\sqrt{(X_2')^2 + (Y_2')^2}} - \frac{Vt'}{\sqrt{(X_2')^2 + (Y_2')^2}} - \frac{Vt'}{\sqrt{(Y_2')^2 + (Y$ X, Y only Z = Z' $-\frac{X_1'}{\sqrt{(X_1')^2+(Y_1')^2}}$ $-\frac{Y_1'}{\sqrt{(X_1')^2 + (Y_1')^2}}$ (contraction along X-axis) (contraction along Y-axis) H = 0 $L = L_0 \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} -$ (no contraction along Z-axis) $-Vt'\left[\frac{X_{2}'}{\sqrt{(X_{2}')^{2}}}-\frac{X_{1}'}{\sqrt{(X_{2}')^{2}}}\right],$ $\begin{array}{l} X \text{ only} \\ Y = Y' \end{array}$ B = 0or $L = L_0 \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} - Vt'(1 - 1),$ (no contraction along Y-axis) Z = Z'or $L = L_0 \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}$ (contraction along X-axis only)

#### Main findings of space contraction

The table represents the space contraction along X-, Y- and Z-axes with different special cases of relative motion between the inertial frames.

It should be noted from the third Table row that the length contraction takes place along X-axis only when the motion between inertial frames is constrained by a one-dimensional system. Thus, the modified transformation is a generalization that includes the ordinary transformation as a special case (in the one-dimensional system).

#### Conclusions

In this paper, a new transformation between inertial frames has been thoroughly devised as a continuation of the well-known Lorentz transformation. It is applied to three-dimensional space and encompasses each coordinate axis. The most fundamental success of this paper is the understanding of the details of space contraction along each coordinate axis in a threedimensional form. For one-dimensional case in ordinary transformation (say X-axis), the length contraction takes place only along X-axis, and it is given by formula

$$L = L_0 \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}.$$

If the relative motion between inertial frames is confined to three-dimensional space under modified transformation, then the corresponding proposed modified space contraction along X-, Y- and Z-axes will be given by Eqs. (22), (24) and (26) respectively, namely:

$$L = L_0 \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} - Vt' (l'_2 - l'_1), \quad B = B_0 \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} - Vt' (m_2' - m_1'),$$
$$H = H_0 \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} - Vt' (n_2' - n_1').$$

It is worth noting that the relativistic formula in modified version of the Lorentz transformation comes through the dependence of the space contraction on direction cosines. Therefore, the extension of the Lorentz transformation to three dimensions of space provides a comprehensive understanding of space contraction. The formulas illuminated here will have many applications to perceive the structure of space-time and it will be of interest in many other areas of theoretical physics.

#### Acknowledgements

We are grateful to The Nepal Academy of Science and Technology (NAST), The World Academy of Science (TWAS) and Department of Physics, Tri-Chandra Multiple Campus of Tribhuvan University (Kathmandu, Nepal).

#### REFERENCES

1. Einstein A., Relativity: The special and general theory by Albert Einstein, Henry Holt and Company, New York, 1920.

2. Zhao J., Lorentz transformation derived from relativity of time, J. Mod. Phys. 13 (6) (2022) 851-857.

3. Einstein A., Zur Elektrodynamik bewegter Körper, Ann. Phys. 17 (4) (1905) 891–921.

4. Cohen A. G., Glashow S. L., Very special relativity, Phys. Rev. Lett. 97 (2) (2006) 021601.

5. Mbagwu J. P., Abubakar Z. L., Ozuomba J. O., A review article on Einstein special theory of relativity, Int. J. Theor. 10 (3) (2020) 65–71.

6. Kenny P., Time dilation in special relativity: An alternative derivation, Phys. Ed. 41 (4) (2006) 334–336.

7. Brush S. G., Lorentz H. A., FitzGerald G. F., Note on the history of FitzGerald – Lorentz contraction, Isis (Journal of the History of Science Society). 58 (2) (1967) 230–232.

8. Szostek R., Derivation of numerous dynamics in the special theory of relativity, Open Phys. 17 (1) (2019) 153–166.

9. Recami E., Mignani R., Classical theory of tachyons (special relativity extended to superluminal frames and objects), Riv. del Nuovo Cim. (1971–1977). 4 (April) (1974) 209–290.

10. Szostek K., Szostek R., The derivation of the general form of kinematics with the universal reference system, Result. Phys. 8 (March) (2018) 429–437.

11. Brown H. S., Physical relativity: Space-time structure from a dynamical perspective, Claredon Press, Oxford, 2005.

12. Kassir R. M., On Lorentz transformation and special relativity: Critical mathematical analysis and findings, Phys. Essays. 27 (1) (2014) 16–25.

13. Levy-Leblond J. M., One more derivation of the Lorentz transformation, Am. J. Phys. 44 (3) (1976) 271–277.

14. Freeman J. C., A new investigation into an unresolved mathematical procedure in the 1905 paper on special relativity, Phys. Essays. 31 (3) (2018) 310–322.

15. **Khadka C. B.**, Relative nature of electric permittivity and magnetic permeability of electromagnetic wave, Ind. J. Phys. 2 (1) (2022) 17–25.

16. **Khadka C. B.,** Redifinition of de Broglie wavelength associated with material particle, Ind. J. Phys. 2 (1) (2022) 14–16.

17. Khadka C. B., Biot – Savart law for determination of speed of particle beyond the speed of light, Ind. J. Phys. 3 (1) (2023) 1-5.

18. **Nawrot W.,** The Hafele–Keating paradox – Serious problems of the special theory of relativity? Phys. Essays. 27 (4) (2014) 598–600.

19. Heras R., Lorentz transformations and the wave equation, Eur. J. Phys. 37 (2) (2016) 025603.

20. Szostek K., Szostek R., The explanation of the Michelson – Morley experiment results by means of universal frame of reference, J. Mod. Phys. 2017. 8 (11) (2017) 1868–1883.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Эйнштейн А. О специальной и общей теории относительности (общедоступное изложение). Перевод с 12-го издания. М.: Госиздат, 1922. 80 с.

2. **Zhao J.** Lorentz transformation derived from relativity of time // Journal of Modern Physics. 2022. Vol. 13. No. 6. Pp. 851–857.

3. Einstein A. Zur Elektrodynamik bewegter Körper // Annalen der Physik. 1905. Bd. 17. Nr. 4. S. 891–921.

4. Cohen A. G., Glashow S. L. Very special relativity // Physical Review Letters. 2006. Vol. 97. No. 2. P. 021601.

5. Mbagwu J. P., Abubakar Z. L., Ozuomba J. O. A review article on Einstein special theory of relativity // International Journal of Theoretical Physics. 2020. Vol. 10. No. 3. Pp. 65–71.

6. **Kenny P.** Time dilation in special relativity: An alternative derivation // Physics Education. 2006. Vol. 41. No. 4. Pp. 334–336.

7. Brush S. G., Lorentz H. A., FitzGerald G. F. Note on the history of FitzGerald – Lorentz contraction // Isis (Journal of the History of Science Society). 1967. Vol. 58. No. 2. Pp. 230–232.

8. Szostek R. Derivation of numerous dynamics in the special theory of relativity // Open Physics. 2019. Vol. 17. No. 1. Pp. 153–166.

9. Recami E., Mignani R. Classical theory of tachyons (special relativity extended to superluminal frames and objects) // La Revista del Nuovo Cimento (1971–1977). 1974. Vol. 4. April. Pp. 209–290.

10. Szostek K., Szostek R. The derivation of the general form of kinematics with the universal reference system // Results in Physics. 2018. Vol. 8. March. Pp. 429–437.

11. **Brown H. S.** Physical relativity: Space-time structure from a dynamical perspective. Oxford: Claredon Press, 2005.

12. Kassir R. M. On Lorentz transformation and special relativity: Critical mathematical analysis and findings // Physics Essays. 2014. Vol. 27. No. 1. Pp. 16 –25.

13. Levy-Leblond J. M. One more derivation of the Lorentz transformation // American Journal of Physics. 1976. Vol. 44. No. 3. Pp. 271–277.

14. Freeman J. C. A new investigation into an unresolved mathematical procedure in the 1905 paper on special relativity // Physics Essays. 2018. Vol. 31. No. 3. Pp. 310–322.

15. **Khadka C. B.** Relative nature of electric permittivity and magnetic permeability of electromagnetic wave // Indian Journal of Advanced Physics. 2022. Vol. 2. No. 1. Pp. 17–25.

16. **Khadka C. B.** Redifinition of de Broglie wavelength associated with material particle // Indian Journal of Advanced Physics. 2022. Vol. 2. No. 1. Pp. 14–16.

17. Khadka C. B. Biot – Savart law for determination of speed of particle beyond the speed of light // Indian Journal of Advanced Physics. 2023. Vol. 3. No. 1. Pp. 1–5.

18. Nawrot W. The Hafele-Keating paradox – Serious problems of the special theory of relativity? // Physics Essays. 2014. Vol. 27. No. 4. Pp. 598–600.

19. Heras R. Lorentz transformations and the wave equation // Europian Journal of Physics. 2016. Vol. 37. No. 2. P. 025603.

20. Szostek K., Szostek R. The explanation of the Michelson – Morley experiment results by means universal frame of reference // Journal of Modern Physics. 2017. Vol. 8. No. 11. Pp. 1868–1883.

#### THE AUTHOR

#### KHADKA Chandra Bahadur

Department of Physics, Tri-Chandra Multiple College, Tribhuvan University, Kathmandu, Nepal. Kathmandu, 44600, Nepal chandrabahadur9988@gmail.com

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

**ХАДКА Чандра Бахадур** — сотрудник кафедры физики Многопрофильного колледжа Три-Чандра Университета Трибхувана, г. Катманду, Непал. Катманду, 44600, Непал chandrabahadur9988@gmail.com

Received 04.03.2023. Approved after reviewing 02.05.2023. Ассерted 04.05.2023. Статья поступила в редакцию 04.03.2023. Одобрена после рецензирования 02.05.2023. Принята 04.05.2023.

# Механика

Научная статья УДК 539.3, 539.42 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16311

# РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ РАЗРУШЕНИЯ ДЛЯ ТРЕЩИН В МАТЕРИАЛАХ С КУБИЧЕСКОЙ СИММЕТРИЕЙ ПРИ ПЛОСКОМ ДЕФОРМИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ

# А.В. Савиковский <sup>1, 2</sup> 🖂, А.С. Семенов <sup>1</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

#### Санкт-Петербург, Россия;

#### <sup>2</sup> АО «Силовые машины», Санкт-Петербург, Россия

### <sup>III</sup> savikovskii.artem@yandex.ru

Аннотация. Рассматривается наклонная прямолинейная центральная трещина в одноосно растягиваемой плоскости при смешанной моде разрушения (комбинация мод нормального отрыва и продольного сдвига) в ортотропном материале и материале с кубической симметрией. С помощью выражений, выведенных на основе формализма Лехницкого, а также методов экстраполяции перемещений и напряжений получены значения коэффициентов интенсивности напряжений для различных ориентаций трещины. Представлены результаты верификации использованного подхода на основе сравнения конечно-элементного расчета с аналитическим (отличие менее 0,75 %). Проведен сравнительный анализ коэффициентов интенсивности напряжений и раскрытия трещины для трех видов симметрии упругих свойств: изотропного материала, материала с кубической симметрией и ортотропного материала.

**Ключевые слова:** линейная механика разрушения, анизотропный материал, формализм Лехницкого, коэффициент интенсивности напряжений

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Правительства Российской Федерации (госзадание № 0784-2020-0021).

Для цитирования: Савиковский А. В., Семенов А. С. Расчет параметров разрушения для трещин в материалах с кубической симметрией при плоском деформированном состоянии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 131–149. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16311

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.16311

# COMPUTATION OF FRACTURE PARAMETERS FOR CRACKS IN MATERIALS WITH CUBIC SYMMETRY IN THE PLANE STRAIN STATE

## A. V. Savikovskii<sup>1, 2</sup>, A. S. Semenov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

<sup>2</sup> Joint Stock Company "Power machines – ZTL, LMZ, Electrosila,

Energomachexport" (JSC "Power machines"), St. Petersburg, Russia;

<sup>⊠</sup> savikovskii.artem@yandex.ru

© Савиковский А. В., Семенов А. С., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Abstract. In the paper, an oblique rectilinear central crack opening in an uniaxially tensile plane with a mixed mode of fracture (combination of normal separation and longitudinal shear modes) in two types of anisotropic materials (orthotropic one and one with cubic symmetry) has been studied. Stress intensity coefficient values for different crack orientations were calculated using expressions derived from the Lekhnitskii formalism and extrapolated methods for displacements and stresses. The results of verification of the used approach based on comparison of the finite element calculation with analytical one were presented (the difference was less than 0.75 %). A comparative analysis of the stress intensity and crack opening coefficients for three types of symmetry of elastic properties: isotropic material, material with cubic symmetry and orthotropic material was carried out.

Keywords: linear fracture mechanics, anisotropic material, Lekhnitskii formalism, stress intensity factor

**Funding.** The reported study was supported by The Government of the Russian Federation (State Assignment No. 0784-2020-0021).

For citation: Savikovskii A. V., Semenov A. S., Computation of fracture parameters for cracks in materials with cubic symmetry in the plane strain state, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 131–149. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16311

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

#### Введение

Рабочие и направляющие лопатки современных газотурбинных двигателей (ГТД) – это наиболее нагруженные и ответственные их элементы; нагрузки на них самые разнообразные [1, 2]. Это и центробежные силы от вращения, и неравномерное распределение давления газа, и неоднородные температурные поля, изменяющиеся во времени. В последнее время рабочие лопатки ГТД первых ступеней горячего тракта изготавливают из монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов, которые обладают повышенными характеристиками кратковременной и длительной прочности, а также параметрами сопротивления термической усталости [3 - 5]. Монокристаллические сплавы на никелевой основе представляют собой материалы с кубической симметрией упругих свойств и являются одним из вариантов ортотропных материалов.

В лопатках ГТД в процессе эксплуатации появляются трещины различной природы: усталости, ползучести и термоусталости из-за комбинированного действия различных вышеупомянутых нагрузок, переменных во времени и пространстве [6 – 8].

Явления зарождения и распространения трещин при термоциклическом нагружении в монокристаллических сплавах на никелевой основе исследовались экспериментальным путем, например, на корсетных образцах в Научно-производственном объединении по исследованию и проектированию энергетического оборудования имени И. И. Ползунова (г. Санкт-Петербург) [5]. Результаты моделирования процесса зарождения термоусталостной трещины в корсетном образце с помощью метода конечных элементов представлены в работе [9], где используются методы континуальной механики повреждений.

В качестве основных параметров разрушения в данном исследовании для оценки трещиностойкости конструкции рассматриваются коэффициенты интенсивности напряжений (КИН) [10, 11]. При рассмотрении трещин в конструкциях из ортотропных материалов в общем случае геометрии и нагружения возникает необходимость вычисления КИНов в условиях смешанных мод разрушения (комбинация нормального отрыва, поперечного и продольного сдвига). В работе Г. Си, П. Пэриса и Г. Ирвина [12] были получены асимптотические выражения для перемещений в малой окрестности вершины трещины для анизотропного однородного материала в условиях смешанной моды нагружения. В работе С. Ранджана и Н. К. Аракере [13] приведены формулы для вычисления КИНов для анизотропного материала на основе асимптотических выражений. В статье С. Чо и К. Ли [14] представлены асимптотические выражения для перемещений в окрестности вершины

© Savikovskii A. V., Semenov A. S., 2022. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

трещины и выведены формулы для вычисления КИНов методом экстраполяции перемещений для композитного анизотропного материала. В статьях [15 - 17] были рассмотрены вопросы взаимодействия нескольких трещин в бесконечной анизотропной плоскости путем вычисления КИНов. В процессе развития механики разрушения анизотропных материалов были предложены различные варианты критериев разрушения, основанные на вычислении КИНов (критерий максимального окружного напряжения, энергетический критерий и др.), с которыми можно ознакомиться, например, в работах [18 - 20]. В различных статьях, например [21 - 23], было рассмотрено влияние ориентации осей анизотропии материала на значение КИНов в анизотропной пластине. В работах [24 - 26]были рассмотрены особенности криволинейных трещин в анизотропном упругом материале, в том числе особенности вычисления КИНов для криволинейных трещин. В статьях [27, 28] применяли численный метод, чтобы вычислить КИНы для двух- и трехмерного случаев, при этом находили численно комплексные корни, которые используются в асимптотических разложениях для перемещений.

Стоит отметить, что во всех вышеперечисленных статьях используется вычисление КИНов с помощью метода конечных элементов, на основе асимптотического разложения перемещений или напряжений в анизотропном материале [12]. Однако в рамках указанного подхода необходимо дополнительно находить комплексные параметры анизотропного материала, зависящие от упругих констант анизотропного материала, и решать уравнение 4-й степени [12, 29].

В настоящей статье предлагаются явные формулы для вычисления КИНов через ортотропные упругие константы, перемещения вершины трещины и угол поворота трещины относительно осей анизотропии материала (по аналогии с известными формулами для изотропного материала). Это позволяет вычислять КИНы при проведении конечно-элементных (КЭ) расчетов, когда известны только перемещения в окрестности вершины трещины и упругие модули ортотропного материала; эти формулы полезны при проведении инженерных расчетов и необходимости оценки трещиностойкости конструкции.

Особенно предлагаемые новшества представляются полезными для конечно-элементных пакетов, которые не могут встроенными методами вычислять КИНы по методу экстраполяции перемещений для анизотропных материалов (например, ANSYS). В нашей работе [30] были получены формулы для вычисления КИНов через перемещения берегов трещины и упругие свойства ортотропного материала для случая плоского напряженного состояния. В данном исследовании предлагается обобщение методов, предложенных в статье [30], на случай плоского деформированного состояния.

Цель данной работы — получение соотношений, содержащих явные зависимости КИНов от перемещений берегов в окрестности вершины трещины в ортотропном материале и материале с кубической симметрией для случая плоского деформированного состояния (ПДС).

Предложенные аналитические выражения могут быть использованы при получении численных оценок для ортотропных материалов на основе метода экстраполяции перемещений. Также в работе приводятся результаты вычисления КИНов с помощью метода экстраполяции напряжений, и эти результаты сравниваются с полученными данными для метода экстраполяции перемещений.

При вычислении КИНов методами экстраполяции перемещений и напряжений используется формализм Лехницкого [31]. Предложенные соотношения для метода экстраполяции перемещений, а также формулы для метода экстраполяции напряжений тестируются для случаев материалов с различной симметрией упругих свойств: изотропного, ортотропного, а также для материала, обладающего кубической симметрией.

#### Определяющие уравнения линейно-упругого материала

Напряженно-деформированное состояние упругих тел с трещинами и соответствующие значения параметров разрушения в общем случае чувствительны к виду симметрии материала и значениям упругих констант. В связи с этим в рамках данного раздела будет рассмотрена структура матриц податливости для различных классов материалов.

Обобщенный закон Гука для анизотропного материала записывается в матричной форме следующим образом [32, 33]:

$$\varepsilon_i = S_{ii} \sigma_i, \ \sigma_i = C_{ii} \varepsilon_i. \tag{1}$$

В уравнениях (1) использовано правило суммирования Эйнштейна и введены следующие обозначения для компонент тензоров:  $\varepsilon_i$  – компонента 6-мерного вектора, составленного из компонент тензора деформаций:

$$\left\{\boldsymbol{\varepsilon}\right\} = \left\{\boldsymbol{\varepsilon}_{xx} \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{yy} \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{zz} \quad \boldsymbol{\gamma}_{yz} \quad \boldsymbol{\gamma}_{xz} \quad \boldsymbol{\gamma}_{xy}\right\}^{T};$$

σ<sub>i</sub> – компонента 6-мерного вектора напряжений

$$\{\boldsymbol{\sigma}\} = \left\{ \boldsymbol{\sigma}_{xx} \quad \boldsymbol{\sigma}_{yy} \quad \boldsymbol{\sigma}_{zz} \quad \boldsymbol{\sigma}_{yz} \quad \boldsymbol{\sigma}_{xz} \quad \boldsymbol{\sigma}_{xy} \right\}^{T};$$

 $S_{ij}$  — элемент матрицы податливости (6 × 6);  $C_{ij}$  — элемент матрицы упругих модулей (6 × 6).

Матрица податливости размером 3 × 3 для случая плоского деформированного состояния имеет различный вид (в зависимости от класса симметрии).

Для ортотропного материала:

$$[\mathbf{S}]_{PDS} = \begin{bmatrix} S_{11}^{PDS} & S_{12}^{PDS} & S_{16}^{PDS} \\ S_{21}^{PDS} & S_{22}^{PDS} & S_{26}^{PDS} \\ S_{16}^{PDS} & S_{26}^{PDS} & S_{66}^{PDS} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1 - v_{13}v_{31}}{E_1} & -\frac{v_{12}}{E_1} - \frac{v_{13}v_{32}}{E_1} & 0 \\ -\frac{v_{12}}{E_1} - \frac{v_{13}v_{32}}{E_1} & \frac{1 - v_{23}v_{32}}{E_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} \end{bmatrix};$$
(2)

для материала кубической симметрии:

$$[\mathbf{S}]_{PDS} = \begin{bmatrix} S_{11}^{PDS} & S_{12}^{PDS} & S_{16}^{PDS} \\ S_{21}^{PDS} & S_{22}^{PDS} & S_{26}^{PDS} \\ S_{16}^{PDS} & S_{26}^{PDS} & S_{66}^{PDS} \end{bmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{1-v^2}{E} & -\frac{v(v+1)}{E} & 0 \\ -\frac{v(v+1)}{E} & \frac{1-v^2}{E} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{G} \end{vmatrix};$$
(3)

для изотропного материала:

$$[\mathbf{S}]_{PDS} = \begin{bmatrix} S_{11}^{PDS} & S_{12}^{PDS} & S_{16}^{PDS} \\ S_{21}^{PDS} & S_{22}^{PDS} & S_{26}^{PDS} \\ S_{16}^{PDS} & S_{26}^{PDS} & S_{66}^{PDS} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1-\nu^2}{E} & -\frac{\nu(\nu+1)}{E} & 0 \\ -\frac{\nu(\nu+1)}{E} & \frac{1-\nu^2}{E} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2(\nu+1)}{E} \end{bmatrix},$$
(4)

где  $E_1, E_2, E_3$  — модули Юнга;  $G_{23}, G_{13}, G_{12}, G$  — модули сдвига;  $v_{31}, v_{13}, v_{23}, v_{32}, v_{12}, v$  — коэффициенты Пуассона.

#### Методы расчета КИНов

Рассматривается задача об одноосном растяжении в вертикальном направлении ортотропной пластины (плоскости) с одиночной наклонной прямолинейной центральной трещиной, в предположении о реализации ПДС. Предполагается, что нормаль к пластине совпадает с одной из осей ортотропии. Оси введенной глобальной декартовой системы координат xOy совпадают с осями анизотропии материала x''Oy'' и направлением нагружения Ox. Ориентация трещины Ox' не совпадает с осями анизотропии материала x''Oy'' и направлением нагрузки Ox (рис. 1).



Рис. 1. Схематическое представление постановки задачи: ортотропная пластина (конечная или бесконечная) с наклонной прямолинейной трещиной (выделена красной линией) В условиях плоского деформированного состояния (ПДС) под действием одноосного растяжения:

показаны 3 системы координат, ψ – угол наклона трещины относительно глобальной системы координат, θ – угол между направлением на точку анализа и системой координат трещины Асимптотические выражения для перемещений вблизи трещины в полярной системе координат с началом в вершине трещины, для изотропного материала хорошо известны для случая ПДС [34]; на основе этих выражений вычисляются КИНы методом экстраполяции перемещений [35]:

$$K_{\rm I} = \sqrt{\frac{2\pi}{r}} \cdot \frac{G}{2(1-\nu)} \cdot \dot{u_y}(r,\pi),$$

$$K_{\rm II} = \sqrt{\frac{2\pi}{r}} \cdot \frac{G}{2(1-\nu)} \cdot \dot{u_x}(r,\pi),$$
(5)

где  $G = \frac{E}{2(1+\nu)}$ ,  $\nu$  — модуль сдвига и коэф-

фициент Пуассона изотропного материала; r — расстояние от вершины трещины до рассматриваемой точки;  $K_{\rm I}$ ,  $K_{\rm II}$  — величины КИНа для мод нормального отрыва и продольного сдвига;  $u'_x(r,\pi)$ ,  $u'_y(r,\pi)$  — компоненты вектора перемещения верхнего берега трещины в системе координат трещины.

Основой для получения выражений для КИНов для случая анизотропного материала, аналогичных (5), служат асимптотические выражения для полей перемещений в вершине трещины при условиях  $x_3 = z = 0$ и ПДС. Выражения, выведенные на основе допускают сделующее представление [13]:

использования формализма Лехницкого [31], допускают следующее представление [13]:

$$u'_{x}(r,\theta) = \sqrt{\frac{2r}{\pi}} \cdot \operatorname{Re}\left[\frac{1}{\mu'_{1} - \mu'_{2}} \cdot \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \left(K_{i}M_{ij}p_{j}\sqrt{\cos\theta + \mu'_{j}\sin\theta}\right)\right],$$

$$u'_{y}(r,\theta) = \sqrt{\frac{2r}{\pi}} \cdot \operatorname{Re}\left[\frac{1}{\mu'_{1} - \mu'_{2}} \cdot \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \left(K_{i}M_{ij}q_{j}\sqrt{\cos\theta + \mu'_{j}\sin\theta}\right)\right],$$
(6)

где  $u'_x(r, \theta)$ ,  $u'_y(r, \theta)$  — компоненты вектора перемещения в полярной системе координат трещины; r — расстояние от вершины трещины до рассматриваемой точки;  $\theta$  — угол между направлением на точку анализа и направлением роста трещины;  $K_1, K_2$  — величины

КИНа, соответствующие I и II модам соответственно 
$$(K_1 = K_1, K_2 = K_{II}); M_{ij} = \begin{bmatrix} -\mu_2 & \mu_1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

вспомогательная матрица.

Формулу (6) путем тождественных алгебраических преобразований можно привести к виду, используемому в статьях [13, 30, 36]. Величины  $p_i$  и  $q_i$  зависят от  $\mu'_i$  по соответствующим формулам [13, 30];  $\mu'_1$ ,  $\mu'_2$  – комплексные параметры анизотропного материала – корни уравнения 4-й степени с константами податливости в системе координат трещины [31], выбранные так, чтобы корни имели положительную мнимую часть.

Следует отметить, что выражения (6) верны для ортотропного материала и кубической симметрии при плоском напряженном или плоском деформированном состоянии; для трещины, находящейся в трехмерном напряженном состоянии, выражения (6) усложняются (см. статью [37]).

В результате подстановки значения  $\theta = \pi$  в выражения (6), после их обращения, находятся искомые значения КИНов для случая анизотропного материала [25, 36]:

$$\{\mathbf{K}\} = \sqrt{\frac{\pi}{2r}} \cdot [\mathbf{B}]^{-1} \cdot \{\mathbf{u'}\},\tag{7}$$

где {**K**} = { $K_{I}, K_{I}$ }<sup>T</sup>, {**u**'} = { $u'_{x}(r, \pi), u'_{y}(r, \pi)$ }<sup>T</sup>,

$$[\mathbf{B}]^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\det[\mathbf{B}]} \operatorname{Re}\left(\frac{\mu_{1}p_{2} - \mu_{2}p_{1}}{\mu_{1} - \mu_{2}}i\right) & \frac{1}{\det[\mathbf{B}]} \operatorname{Re}\left(-\frac{p_{2} - p_{1}}{\mu_{1} - \mu_{2}}i\right) \\ \frac{1}{\det[\mathbf{B}]} \operatorname{Re}\left(-\frac{\mu_{1}q_{2} - \mu_{2}q_{1}}{\mu_{1} - \mu_{2}}i\right) & \frac{1}{\det[\mathbf{B}]} \operatorname{Re}\left(\frac{q_{2} - q_{1}}{\mu_{1} - \mu_{2}}i\right) \end{bmatrix}.$$
(8)

Штрихи над обозначениями величин в соотношениях (5) – (8) указывают на принадлежность указанных компонент векторов и тензоров к системе координат, связанной с ориентацией трещины (x'Oy' на рис. 1).

В случае поворота системы координат xOy в систему координат x'Oy' в плоскости на угол  $\psi$  (см. рис. 1), матрица определяется равенством

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\mathcal{Q}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \psi & \sin \psi & 0 \\ -\sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$
(9)

и матрица упругих податливостей преобразуются из глобальной системы координат в систему координат трещины через матрицу перехода, на основе соотношения

$$S'_{ijkl} = Q_{im} \cdot Q_{jn} \cdot Q_{ko} \cdot Q_{lp} \cdot S_{mnop},$$

которое в двумерном случае преобразуются в формулы Лехницкого [31].

Стоит отметить, что компоненты вектора перемещений в выражениях (5) и (8) также должны быть заданы в системе координат, связанной с трещиной:

$$u_i' = Q_{im} u_m. \tag{10}$$

Таким образом, на основе выражений (7) и (8) можно вычислять значения КИНов, если известны величины перемещений на берегах трещины и линейно-упругие константы материала.

КИНы могут быть определены также на основе асимптотических выражений (см. для ПДС работы [13, 32, 38]) для распределения полей напряжений вдоль направления роста трещины ( $\theta = 0$ ):

$$K_{\rm I} = \sigma_{yy}'(r,0) \cdot \sqrt{2\pi r},$$

$$K_{\rm II} = \sigma_{yy}'(r,0) \cdot \sqrt{2\pi r}.$$
(11)

Следует отметить, что выражения (11) справедливы как для изотропного, так и для анизотропного материала.

При использовании соотношений (11) компоненты напряжений также нужно преобразовать из глобальной системы координат xOy в систему координат трещины x'Oy'(см. рис. 1):

$$\sigma'_{ij} = Q_{im}Q_{jn}\sigma_{mn}.$$
 (12)

# Конкретизация выражений КИНов для различных классов симметрии упругих свойств

Согласно формулам (6) – (8), при вычислении КИНов через компоненты вектора перемещения необходимо находить комплексные параметры анизотропного материала  $\mu'_1$ 

и  $\mu'_2$  на основе характеристического уравнения 4-й степени. В случае, когда трещина не повернута по отношению к осям анизотропии материала, характеристическое уравнение для определения  $\mu_1$  и  $\mu_2$  имеет вид:

$$S_{11}\mu^4 - 2S_{16}\mu^3 + (2S_{12} + S_{66})\mu^2 - 2S_{26}\mu + S_{22} = 0.$$
 (13)

Подставляя в уравнение (13) коэффициенты  $S_{ij}$  для ортотропного материала для случая ПДС (2), решая его с использованием формул преобразования корней к системе координат трещины, в результате подстановки вычисленных корней  $\mu_1$  и  $\mu_2$  в выражения для  $[\mathbf{B}]^{-1}$  (8) приходим к явному аналитическому выражению для матрицы влияния  $[\mathbf{B}]^{-1}$  через упругие модули ортотропного материала:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} C \left( 1 - \sqrt{\frac{E_1(1 - \mathbf{v}_{23}\mathbf{v}_{32})}{E_2(1 - \mathbf{v}_{13}\mathbf{v}_{31})}} \right) \sin 2\psi & 2C \left( \sqrt{\frac{E_1(1 - \mathbf{v}_{23}\mathbf{v}_{32})}{E_2(1 - \mathbf{v}_{13}\mathbf{v}_{31})}} \sin^2 \psi + \cos^2 \psi \right) \\ 2C \left( \sqrt{\frac{E_1(1 - \mathbf{v}_{23}\mathbf{v}_{32})}{E_2(1 - \mathbf{v}_{13}\mathbf{v}_{31})}} \cos^2 \psi + \sin^2 \psi \right) & C \left( 1 - \sqrt{\frac{E_1(1 - \mathbf{v}_{23}\mathbf{v}_{32})}{E_2(1 - \mathbf{v}_{13}\mathbf{v}_{31})}} \right) \sin 2\psi \end{bmatrix}, \quad (14)$$

где 
$$C = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E_1 E_2}{\left\{2\sqrt{\frac{E_1}{E_2}}\sqrt{(1-v_{13}v_{31})(1-v_{23}v_{32})} + \left[\frac{E_1}{G_{12}} - 2(v_{12}+v_{13}v_{32})\right]\right\} (1-v_{23}v_{32})}}.$$

Следствием уравнения (7) определяются КИНы для ортотропного материала через компоненты вектора перемещений в малой окрестности вершины трещины при ПДС на основе соотношений:

$$K_{\rm I} = \sqrt{\frac{\pi}{2r}} \left\{ C \left[ 1 - \sqrt{\frac{E_1(1 - \mathbf{v}_{23}\mathbf{v}_{32})}{E_2(1 - \mathbf{v}_{13}\mathbf{v}_{31})}} \right] \sin 2\psi \cdot u'_x + 2C \left[ \sqrt{\frac{E_1(1 - \mathbf{v}_{23}\mathbf{v}_{32})}{E_2(1 - \mathbf{v}_{13}\mathbf{v}_{31})}} \sin^2 \psi + \cos^2 \psi \right] \cdot u'_y \right\},$$
(15)  
$$K_{\rm II} = \sqrt{\frac{\pi}{2r}} \left\{ 2C \left[ \sqrt{\frac{E_1(1 - \mathbf{v}_{23}\mathbf{v}_{32})}{E_2(1 - \mathbf{v}_{13}\mathbf{v}_{31})}} \cos^2 \psi + \sin^2 \psi \right] \cdot u'_x + C \left[ 1 - \sqrt{\frac{E_1(1 - \mathbf{v}_{23}\mathbf{v}_{32})}{E_2(1 - \mathbf{v}_{13}\mathbf{v}_{31})}} \right] \sin 2\psi \cdot u'_y \right\}.$$

Следует отметить, что в формуле (15) каждый КИН ( $K_{I}$  и  $K_{II}$ ) зависит от обеих компонент перемещений  $u'_{x}$  и  $u'_{y}$ .

В случае вычисления КИНов для трещин в материалах с кубической симметрией, выражения (15) упрощаются (с учетом равенств  $E_1 = E_2 = E$ ,  $G_{12} = G_{13} = G_{23} = G$ ,  $v_{12} = v_{13} = v_{31} = v_{23} = v_{32} = v_{32} = v_{21} = v$ ):

$$K_{\rm I} = \sqrt{\frac{\pi}{2r}} \cdot \frac{E}{\sqrt{\left(1 - \nu^2\right) \left(\frac{E}{G} + 2(1 - 2\nu)(1 + \nu)\right)}} \cdot u'_{\nu},$$

$$K_{\rm II} = \sqrt{\frac{\pi}{2r}} \frac{E}{\sqrt{\left(1 - \nu^2\right) \left(\frac{E}{G} + 2(1 - 2\nu)(1 + \nu)\right)}} \cdot u'_{x}.$$
(16)

Матрица  $[B]^{-1}$  в этом случае будет диагональной, т. е. каждая компонента вектора перемещений влияет только на один КИН, а на другой не оказывает влияния. Также отличие соотношений (16) от выражений (15) состоит в том, что на значение КИНов совершенно не влияет угол наклона трещины.

Важно отметить качественное отличие формулы (15), полученной для случая плоского деформированного состояния, от подобной формулы в статье [30] для случая плоского

напряженного состояния. В случае ПДС коэффициенты интенсивности напряжений зависят от коэффициентов Пуассона  $v_{13}, v_{23}, v_{31}, v_{32}$ . Рассмотрим свойства матрицы  $[\mathbf{B}]^{31}$ .

Свойство 1. Определитель матрицы  $[B]^{-1}$  определяется только параметром C:

$$\det \left[\mathbf{B}\right]^{-1} = 4C^2 \cdot \left\{ \left[ 1 + \frac{E_1(1 - v_{23}v_{32})}{E_2(1 - v_{13}v_{31})} - 2\sqrt{\frac{E_1(1 - v_{23}v_{32})}{E_2(1 - v_{13}v_{31})}} \right] \sin^2 \psi \cos^2 \psi - \frac{E_1(1 - v_{23}v_{32})}{E_2(1 - v_{13}v_{31})} \sin^2 \psi \cos^2 \psi - \sin^2 \psi \cos^2 \psi - \sqrt{\frac{E_1(1 - v_{23}v_{32})}{E_2(1 - v_{13}v_{31})}} \cdot (\sin^4 \psi + \cos^4 \psi) \right\} = -4C^2.$$

Из выражения для det[B]<sup>-1</sup> следует, что нельзя однозначно вычислить КИН по перемещениям, если C = 0 или  $C \to \infty$ . Из условий  $E_1 > 0, E_2 > 0$  следует, что  $C \neq 0$ , однако возможна такая ситуация, что  $C \rightarrow \infty$ , которая реализуется при условии

$$2\sqrt{\frac{E_1}{E_2}}\sqrt{(1-v_{13}v_{31})(1-v_{23}v_{32})} + \left[\frac{E_1}{G_{12}} - 2(v_{12}+v_{13}v_{32})\right] = 0, \ \left[\frac{E_1}{G_{12}} - 2(v_{12}+v_{13}v_{32})\right] < 0.$$

Данный вариант соотношения упругих констант соответствует варианту корней уравнения (13), когда они являются вещественными, но уравнение (13) не может иметь вещественных корней [31]. Если соотношение упругих констант достаточно близко к тому, что

$$2\sqrt{\frac{E_1}{E_2}}\sqrt{(1-v_{13}v_{31})(1-v_{23}v_{32})} + \left[\frac{E_1}{G_{12}} - 2(v_{12}+v_{13}v_{32})\right] \approx 0,$$

или Е, достаточно мало, то могут возникнуть проблемы при численном определении матрицы [В]-1 и вычислении КИНов.

Свойство 2. Как следует из выражения (15), в случае

$$E_1(1 - v_{23}v_{32}) = E_2(1 - v_{13}v_{31})$$

элементы матрицы  $[\mathbf{B}]^{-1}$  не зависят от угла поворота трещины  $\psi$  (так же, как и в случае

элементы матрицы [**b**] <sup>\*</sup> не зависят от угла поворога трещина <sub>\*</sub> (..., изотропного материала);  $u'_{y}$  влияет только на  $K_{1}$ ,  $u'_{x}$  влияет только на  $K_{II}$ . *Свойство* 3. Из выражений (15) видно, что чем ближе корень  $\sqrt{\frac{E_{1}(1-v_{23}v_{32})}{E_{2}(1-v_{13}v_{31})}}$  к еди-

нице, тем в большей степени  $u'_{v}$  влияет на значение  $K_{i}$ , а  $u'_{x}$  в большей степени – на значение  $K_{II}$ , и наоборот.

#### Тестирование методов вычисления КИНов с помощью конечно-элементного решения задачи

Рассматривается прямолинейная наклонная сквозная трещина в бесконечной пластине (плоскости), ориентированная под углом у к осям анизотропии (рис. 2), при одноосном растяжении пластины в вертикальном направлении. Предполагается, что в задаче реализуется ПДС, когда в каждом сечении по оси z напряженно-деформированное состояние одинаково и  $\varepsilon_{zz} = \gamma_{xz} = \gamma_{yz} = 0$ . Расчет КИНов производится для различных ориентаций трещины, варьируемых с шагом 30°, с целью тестирования полученных формул на основе методов экстраполяции по перемещениям и по напряжениям. При вычислении полей перемещений и напряжений для расчета КИНов используется метод конечных элементов [39 – 41]. Материал пластины рассматривается линейно-упругим.

Данная задача имеет известное аналитическое решение для коэффициентов интенсивности напряжений [42]:

$$K_{\rm I} = \sigma \sqrt{\pi a} \cdot \cos^2 \psi,$$

$$K_{\rm II} = \sigma \sqrt{\pi a} \cdot \sin \psi \cdot \cos \psi.$$
(17)



Рис. 2. Схематическое представление постановки задачи об одноосном растяжении бесконечной пластины с наклонной сквозной трещиной (выделена красным цветом)

В формулах (17) аналитическое решение для бесконечной плоскости не зависит от вида анизотропии и упругих свойств материала. Это связано с тем, что рассматривается бесконечная плоскость и нагрузки самоуравновешены. Программная реализация методов вычисления КИНов для изотропного и анизотропного материалов с помощью метода перемещений (см. формулы (5), (15) и (16)) и напряжений (см. формулы (12) и (13)) была выполнена в КЭкомплексе PANTOCRATOR [43]. При проведении расчетов использовались плоские квадратичные 8-узловые элементы.

В процессе расчетов было построено несколько КЭ-моделей пластины с трещиной, в которых изменяли значение угла  $\psi$ (угол ориентации трещины по отношению к осям ортотропии материала) и сравнивали численные значения КИНов с аналитическими. На рис. 3 представлена в качестве примера КЭ-модель квадратной пластины с центральной прямолинейной трещиной, с углом наклона  $\psi = 60^\circ$ , включающая

126 тыс. узлов, 20 800 конечных элементов во всей модели и 80 на берегу трещины.



Рис. 3. КЭ-модель пластины с наклонной центральной трещиной (*a*) и ее увеличенный фрагмент в окрестности трещины (*b*)

При моделировании поведения трещины в бесконечной пластине (плоскости), путем рассмотрения пластины конечных размеров отношение длины расчетной области к трещине было выбрано 1:22: длина области для моделирования была равна 22 см, ширина области для моделирования — также 22 см; длина трещины — 1 см. Нагрузкой в задаче являлось постоянное вертикальное напряжение  $\sigma_{yy} = 100$  МПа, заданное на верхней грани. Пластина была закреплена для исключения твердотельных перемещений. При верификации численных методов и сравнении с аналитическим решением рассматривались три варианта упругих свойств:

изотропный материал, материал с кубической симметрией, ортотропный материал.

Значения упругих констант, используемых в расчетах, взяты из статьи [30]. На рис. 4 представлено сравнение значений КИНов, полученных с помощью методов экстраполяции перемещений и напряжений, с аналитическим решением (17) для всех трех вариантов свойств материала.



Рис. 4. Графики сравнения значений КИНов K<sub>1</sub> и K<sub>11</sub>, полученных численно с помощью метода экстраполяции перемещений (символы), с аналитическим решением для КИНов K<sub>1</sub> (пунктир синего цвета) и K<sub>11</sub> (сплошная линия красного цвета). Значения для изотропного материала отмечены символом (▲), ортотропного материала – (◄), для материала с кубической симметрией свойств – (♦)

Аналитические и численные значения  $K_{\rm I}$  и  $K_{\rm II}$  для углов наклона, кратных 30° (маркированы символами на рис. 4), приведены в табл. 1. Отметим, что максимальная погрешность  $\Delta_{\rm max}$  для метода вычисления КИНов по напряжениям (0,40 %) меньше, чем таковая для метода вычисления КИНов по перемещениям (0,75 %). Погрешность для изотропного материала минимальна, для ортотропного максимальна для обоих методов. Однако несмотря на это, указанные методы показывают высокую точность, поскольку во всех рассмотренных случаях погрешность, по сравнению с аналитическим решением, не превосходит 0,75 %.

#### Влияние анизотропии материала на раскрытие трещины

Проведем сравнение раскрытия берегов трещины для трех ранее рассмотренных классов материалов: изотропного, с кубической симметрией и ортотропного. Если рассмотреть выражения (6) для КИНов изотропного материала и преобразовать их путем вычитания перемещения на противоположных берегах трещины, то после подстановки аналитического выражения (17) для КИНов получаем для раскрытия трещины изотропного материала следующие равенства:

$$u'_{x}(r,\pi) - u'_{x}(r,-\pi) = 2\sigma_{0}\sqrt{2ra}\sin\psi \cdot \cos\psi \frac{2(1-\nu^{2})}{E},$$

$$u'_{y}(r,\pi) - u'_{y}(r,-\pi) = 2\sigma_{0}\sqrt{2ra}\cos^{2}\psi \frac{2(1-\nu^{2})}{E}.$$
(18)

Механика

Таблица 1

	Значение КИНа, МПа·м <sup>1/2</sup>						$\Delta_{\max}, \%$			
ψ, град	Аналитическое решение		Метод перемещений		Метод напряжений		МΠ	MH		
	K <sub>I</sub>	K <sub>II</sub>	K <sub>I</sub>	K <sub>II</sub>	K <sub>I</sub>	$K_{_{\rm II}}$				
Изотропный материал										
0	125,33	0,00	125,01	1.10-4	125,31	0,001	0,25	0,01		
30	93,99	54,26	93,74	53,89	93,97	54,23	0,70	0,07		
60	31,33	54,26	31,24	53,88	31,31	54,21	0,72	0,11		
90	0,00	0,00	1.10-4	2.10-4	1.10-4	1.10-4	0,02	0,01		
120	31,33	-54,26	31,23	-53,87	31,29	31,29	0,73	0,14		
150	93,99	-54,26	93,74	-53,89	93,96	93,96	0,70	0.07		
180	123,33	0,00	125,01	1.10-4	125,31	125,31	0,25	0,01		
Материал с кубической симметрией										
0	125,33	0	124,84	0,004	125,13	0,003	0,39	0,16		
30	93,99	54,27	93,73	53,87	93,95	54,20	0,73	0,13		
60	31,33	54,27	31,27	53,92	31,35	54,27	0,64	0,11		
90	0	0	1.10-4	2.10-4	1.10-4	$1.10^{-4}$	0,02	0,01		
120	31,33	-54,27	31,26	-53,91	31,32	-54,20	0,66	0,13		
150	93,99	-54,27	93,73	-53,87	93,95	-54,26	0,73	0,13		
180	125,33	0	124,84	0,004	125,13	0,003	0,39	0,16		
Ортотропный материал										
0	125,33	0	124,54	0,006	124,82	0,007	0,63	0,40		
30	93,99	54,27	93,72	54,36	93,86	54,24	0,29	0,14		
60	31,33	54,27	31,43	53,99	31,42	54,29	0,66	0,28		
90	0	0	1.10-4	2.10-4	1.10-4	1.10-4	0,01	0,01		
120	31,33	-54,27	31,45	-53,98	31,37	-54,29	0,75	0,11		
150	93,99	-54,27	93,72	-54,36	93,86	-54,24	0,29	0,14		
180	125,33	0	124,54	0,006	124,82	0,0068	0,63	0,40		

# Сравнение результатов расчетов с аналитическим решением для трех типов материала

Обозначения:  $\psi$  – угол наклона трещины к оси x;  $\Delta_{\max}$  – максимальная погрешность для КИНов  $K_{\text{I}}$  и  $K_{\text{II}}$ ; МП, МН – методы перемещений и напряжений, соответственно.

Если использовать выражения из нашей статьи [30] для перемещений берегов трещины анизотропного материала и подставить выражения для комплексных корней в выражения для матрицы  $[\mathbf{B}]^{-1}$  с последующей подстановкой выражений (17) для КИНов, то в случае кубической симметрии получим следующие выражения для раскрытия трещины:

$$u'_{x}(r,\pi) - u'_{x}(r,-\pi) = 2\sigma_{0}\sqrt{2ra}\sin\psi \cdot \cos\psi \frac{\sqrt{(1-\nu^{2})\cdot\left[\frac{E}{G} + 2(1-2\nu)(1+\nu)\right]}}{E},$$

$$u'_{y}(r,\pi) - u'_{y}(r,-\pi) = 2\sigma_{0}\sqrt{2ra}\cos^{2}\psi \frac{\sqrt{(1-\nu^{2})\cdot\left[\frac{E}{G} + 2(1-2\nu)(1+\nu)\right]}}{E}.$$
(19)

Аналогично для ортотропного материала можно получить выражения:

$$u'_{x}(r,\pi) - u'_{x}(r,-\pi) = 2\sigma_{0}\sqrt{2ra}\sin\psi \cdot \cos\psi \times \left\{ 2\sqrt{\frac{E_{1}}{E_{2}}}\sqrt{(1-\nu_{13}\nu_{31})(1-\nu_{23}\nu_{32})} + \left[\frac{E_{1}}{G_{12}} - 2(\nu_{12}+\nu_{13}\nu_{32})\right] \right\},$$

$$\times \sqrt{\frac{(1-\nu_{23}\nu_{32}) \cdot \left\{ 2\sqrt{\frac{E_{1}}{E_{2}}}\sqrt{(1-\nu_{13}\nu_{31})(1-\nu_{23}\nu_{32})} + \left[\frac{E_{1}}{G_{12}} - 2(\nu_{12}+\nu_{13}\nu_{32})\right] \right\},}{E_{1}E_{2}},$$

$$\times \sqrt{\frac{(1-\nu_{23}\nu_{32}) \cdot \left\{ 2\sqrt{\frac{E_{1}}{E_{2}}}\sqrt{(1-\nu_{13}\nu_{31})(1-\nu_{23}\nu_{32})} + \left[\frac{E_{1}}{G_{12}} - 2(\nu_{12}+\nu_{13}\nu_{32})\right] \right\},}{E_{1}E_{2}}.$$
(20)

Из сравнения выражений (18) – (20) можно сделать следующие выводы:

Во-первых, если  $\frac{E}{G} > 2(1+v)$ , то раскрытие трещины в случае материала с кубической

симметрией будет больше, чем в случае изотропного материала при одинаковых значениях модуля Юнга *E* и коэффициента Пуассона v, и наоборот.

Во-вторых, если для удобства положить равными коэффициенты Пуассона для ортотропного материала и материала с кубической симметрией, т. е.  $v_{12} = v_{23} = v_{31} = v$ , положить  $E_1 = E_3 = E$  и  $G_{12} = G_{23} = G_{31} = G$ , то при  $E_1 > E_2$  раскрытие трещины в случае ортотропного материала будет больше такового для материала с кубической симметрией, и наоборот.

Для проверки вышеприведенных выводов были выполнены КЭ-расчеты с различными вариантами симметрии материала и значениями упругих констант. Упругие свойства всех трех рассматриваемых типов материала задавали так, чтобы раскрытие трещины в случае ортотропного материала было больше других случаев, для изотропного материала — меньше всех, а для материала с кубической симметрией — промежуточный вариант (табл. 2). Свойства материалов подбирались так, чтобы матрицы податливости и упругих модулей отвечали условиям положительной определенности (см. табл. 2).

Рис. 5 показывает различия в раскрытии трещины, а также в распределении полей вертикальных напряжений  $\sigma_{yy}$  для различных вариантов анизотропии материала для случая угла наклона трещины  $\psi = 30^{\circ}$ . Результаты КЭ-расчетов подтверждают качественно и количественно аналитические выводы. Последние одинаковы для любого угла поворота трещины  $\psi$ .

Таблица 2

	Мод	Коэффициент	
Материал	Юнга	сдвига	Пуассона
Изотропный	<i>E</i> = 20	<i>G</i> = 7,69	v = 0,3
С кубической симметрией свойств	<i>E</i> = 20	<i>G</i> = 1,00	v = 0,3
Ортотропный	$E_1 = 20$ $E_2 = 4$ $E_3 = 20$	$G_{12} = 1,00$ $G_{23} = 1,00$ $G_{31} = 1,00$	$v_{12} = 0,3$ $v_{23} = 0,3$ $v_{31} = 0,3$

#### Упругие свойства для трех типов материалов, использованные в КЭ-расчетах для проверки раскрытий трещины



Рис. 5. Распределение полей вертикальных напряжений σ<sub>yy</sub> [МПа] (угол начального наклона трещины ψ = 30°) для материалов с различной симметрией упругих свойств: изотропного (*a*), с кубической симметрией (*b*) и ортотропного (*c*). Масштаб перемещений увеличен для наглядности в 5 раз

На практике для оценки степени анизотропии свойств в случае материалов с кубической симметрией применяется параметр

$$p = \frac{E}{G} - 2\nu, \tag{21}$$

где *Е* – модуль Юнга, *G* – модуль сдвига, *v* – коэффициент Пуассона.

Для изотропного материала p = 2. В формуле (19) целесообразно выделить этот параметр и построить график зависимости раскрытия около вершины трещины (рис. 6) по асимптотическим формулам (например, при заданном фиксированном удалении от вершины r = a/20). Также на рис. 6 показан график зависимости максимального раскрытия трещины (r = a) для кубической симметрии, полученный на основе КЭ-решения. Выбранные значения модуля Юнга и коэффициента Пуассона приведены в табл. 2, модуль сдвига G варьировали в интервале 1 – 19 ГПа. Значение внешнего растягивающего воздействия и длина трещины соответствуют постановке задачи, представленной на рис. 3. Угол наклона трещины  $\psi = 30^{\circ}$ .



Рис. 6. Зависимость раскрытия трещины от параметра анизотропии *p*. Показаны максимальное раскрытие, когда r = a (сплошная линия) и раскрытие в окрестности вершины трещины, r = a/20 (пунктир)

Как видно из рис. 6, с ростом параметра анизотропии p наблюдается рост величины раскрытия трещины. В соответствии с выражением (19), зависимость раскрытия трещины от p (при фиксированных значениях E, v и варьируемом значении G) имеет корневую зависимость.

#### Выводы

Для случая плоского деформированного состояния получены аналитические выражения для коэффициентов интенсивности напряжений (КИНы) через перемещения берегов прямолинейной трещины смешанной моды разрушения в ортотропном материале и материале с кубической симметрией. Исследованы свойства матрицы влияния  $[B]^{-1}$ , с помощью которой находятся КИНы. Так же, как и в случае плоского напряженного состояния (рассмотрен нами ранее в статье [30]), наблюдается отсутствие смешанности мод для материала с кубической симметрией (аналогично изотропному материалу). В отличие от случая плоского напряженного состояния, коэффициенты матрицы взаимного влияния для ортотропного материала в случае плоского деформированного состояния зависят от  $v_{13}, v_{23}, v_{31}, v_{32}, а через них — от модуля Юнга <math>E_3$ .

Результаты тестирования предложенных методов вычисления КИНов продемонстрировали хорошее соответствие аналитическому решению задачи о плоскости с наклонной трещиной для различных углов наклона трещины относительно осей анизотропии материала и направления внешнего воздействия для всех рассмотренных вариантов анизотропии линейно-упругого материала: изотропного, с кубической симметрией и ортотропного (погрешность во всех случаях не превышала 0,75 %). При этом вычисление КИНов по напряжениям в окрестности вершины трещины дает более точные результаты, чем их вычисление по перемещениям берегов трещины.

Также были получены асимптотические формулы для раскрытия трещины в случаях изотропного, ортотропного и материала с кубической симметрией. Проведено сравнение раскрытий трещины для различных классов материалов в зависимости от их упругих свойств, которое получило подтверждение результатами конечно-элементного моделирования. Получена зависимость раскрытия трещины от параметра анизотропии *p* для практически важного случая материала с кубической симметрией.

Рассмотренные численные методы вычисления КИНов могут быть рекомендованы при моделировании роста трещин и анализе трещиностойкости ответственных деталей газотурбинных двигателей (рабочих и направляющих лопаток), которые изготовляются из монокристаллических сплавов на никелевой основе, обладающих кубической симметрией физико-механических свойств.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Семенов А. С., Грищенко А. И, Колотников М. Е., Гецов Л. Б. Конечно-элементный анализ термоциклической прочности лопаток газовых турбин. Ч. 1. Модели материала, критерии разрушения, идентификация параметров // Вестник УГАТУ (Уфимский государственный авиационный технический университет). 2019. Т. 23. № 1 (83). С. 70–81.

2. Гецов Л. Б., Михайлов В. Е., Семенов А. С., Кривоносова В. В., Ножницкий Ю. А., Блинник Б. С., Магеррамова Л. А. Расчетное определение ресурса рабочих и направляющих лопаток ГТУ. Ч. 1. Поликристаллические материалы // Газотурбинные технологии. 2011. № 7. С. 24–30.

3. Шалин Р. Е., Светлов И. Л., Качалов Е. Б., Толораия В. Н., Гаврилин В. С. Монокристаллы никелевых жаропрочных сплавов. М.: Машиностроение, 1997. 336 с.

4. Wilson B. C., Hickman J. A., Fuchs G. E. The effect of solution heat treatment on a single-crystal Ni-based superalloy // JOM: The Journal of the Minerals, Metals & Materials Society. 2003. Vol. 55. No. 3. Pp. 35–40.

5. Гецов Л. Б. Материалы и прочность деталей газовых турбин. В 2 тт. Т. 1. Рыбинск: ИД «Газотурбинные технологии», 2010. 605 с.

6. Getsov L. B., Semenov A. S., Ignatovich I. A. Thermal fatigue analysis of turbine discs on the base of deformation criterion // International Journal of Fatigue. 2017. Vol. 97. April. Pp. 88–97.
7. Wang R., Zhang B., Hu D., Jiang K., Mao J., Jing F. A critical-plane-based thermomechanical fatigue lifetime prediction model and its application in nickel-based single-crystal turbine blades // Materials at High Temperatures. 2019. Vol. 36. No. 4. Pp. 325–334.

8. Семенов А. С., Семенов С. Г., Гецов Л. Б. Методы расчетного определения скорости роста трещин усталости, ползучести и термоусталости в поли- и монокристаллических лопатках ГТУ // Проблемы прочности. 2015. № 2. С. 61–87.

9. Savikovskii A. V., Semenov A. S., Getsov L. B. Crystallographic orientation, delay time and mechanical constants influence on thermal fatigue strength of single-crystal nickel superalloys // Materials Physics and Mechanics. 2020. Vol. 44. No. 1. Pp. 125–136.

10. Erdogan F. Stress intensity factors // Journal of Applied Mechanics. 1983. Vol. 50. No. 4b. Pp. 992–1002.

11. Irwin G. R. Analysis of stresses and strains near the end of crack traversing a plate // Journal of Applied Mechanics. 1957. Vol. 24. No. 3. Pp. 361–364.

12. Sih G. C., Paris P. C., Irwin G. R. On cracks in rectilinearly anisotropic bodies // International Journal of Fracture Mechanics. 1965. Vol. 1. No. 3. Pp. 189–203.

13. **Ranjan S., Arakere N. K.** A fracture-mechanics-based methodology for fatigue life prediction of single crystal nickel-based superalloys // Journal of Engineering for Gas Turbines and Power. 2008. Vol. 130. No. 3. P. 032501.

14. Cho S. B., Lee K. R. Determination of stress-intensity factors and boundary element analysis for interface cracks in dissimilar anisotropic materials // Engineering Fracture Mechanics. 1992. Vol. 43. No. 4. Pp. 603 - 614.

15. **Mauge C., Kachanov M.** Anisotropic material with interacting arbitrarily oriented cracks stress intensity factors and crack-microcrack interactions // International Journal of Fracture. 1994. Vol. 65. No. 2. Pp. 115–139.

16. **Tu C.-H., Chen C.-S., Yu T.-T.** Fracture mechanics analysis of multiple cracks in anisotropic media // International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics. 2011. Vol. 35. No. 11. Pp. 1226–1242.

17. Wang X.-Q., Schubnel A., Fortin J., David E. C., Gueguen Y., Ge H.-K. High *Vp/Vs* ratio: Saturated cracks or anisotropy effects? // Geophysical Research Letters. 2012. Vol. 39. No. 11. P. L11307.

18. Saouma V. E., Ayari M. L., Leavell D. A. Mixed mode crack propagation in homogeneous anisotropic solids // Engineering Fracture Mechanics. 1987. Vol. 27. No. 2. Pp. 171–184.

19. Hakim V., Karma A. Crack path prediction in anisotropic brittle materials // Physical Review Letters. 2005. Vol. 95. No. 23. P. 235501.

20. Mall S., Murhy J. F., Asce M., Shottafer J. E. Criterion for mixed mode fracture in wood // Journal of Engineering Mechanics. 1983. Vol. 109. No. 3. Pp. 680–690.

21. Ozkan U., Kaya A. C., Loghin A., Ayhan A. O., Nied H. F. Fracture analysis of cracks in anisotropic materials using 3DFAS and ANSYS // Proceedings of ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition. January, 2006. Chicago, USA. Pp. 569–579.

22. Ozkan U., Nied H. F., Kaya A. C. Fracture analysis of anisotropic materials using enriched crack tip elements // Engineering Fracture Mechanics. 2010. Vol. 77. No. 7. Pp. 1191–1202.

23. Song Ch., Tin-Loi F., Gao W. A definition and evaluation procedure of generalized stress intensity factors at cracks and multi-material wedges // Engineering Fracture Mechanics. 2010. Vol. 77. No. 12. Pp. 2316–2336.

24. Gao H., Chiu C. Slightly curved or kinked cracks in anisotropic elastic solids // International Journal of Solids and Structures. 1992. Vol. 29. No. 8. Pp. 947–972.

25. Obata M., Nemat-Nasser S., Goto Y. Branched cracks in anisotropic elastic solids // Journal of Applied Mechanics. 1989. Vol. 56. No. 4. Pp. 858–864.

26. Kardomateas G. A., Li R. Thermo-elastic crack branching in general anisotropic media // International Journal of Solids and Structures. 2005. Vol. 42. No. 3–4. Pp. 1091–1109.

27. **Barsoum R. S.** Cracks in anisotropic materials – an iterative solution of the eigenvalue problem // International Journal of Fracture. 1986. Vol. 32. No. 1. Pp. 59–67.

28. Mazurowski B., O'Hara P., Gupta P., Duarte C. A. A displacement correlation method for stress intensity factor extraction from 3D fractures in anisotropic materials // Engineering Fracture Mechanics. 2021. Vol. 258. December. P. 108040.

29. Hoenig A. Near-tip behavior of a crack in a plane anisotropic elastic body // Engineering Fracture Mechanics. 1982. Vol. 16. No. 3. Pp. 393–403.

30. Савиковский А. В., Семенов А. С. Вычисление коэффициентов интенсивности напряжений в ортотропных материалах при смешанной моде разрушения в плоском напряженном состоянии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 2. С. 102–123.

31. Лехницкий С. Г. Теория упругости анизотропного тела. М.: Наука, 1977. 416 с.

32. Voigt W. Lehrbuch der kristallphysik:(mit ausschluss der kristalloptik). Leipzig, Berlin: BG Teubner, 1910. s.

33. Ляв А. Математическая теория упругости. Пер. с англ. Ленинград: Объединенное научно-техническое издательство (ОНТИ), 1935. 672 с.

34. Качанов Л. М. Основы механики разрушения. М.: Наука, 1974. С. 223-226.

35. **Морозов Е. Н., Никишков Г. П.** Метод конечных элементов в механике разрушения. М.: Наука, 1980. 256 с.

36. Judt P. O., Ricoeur A., Linek G. Crack path prediction in rolled aluminum plates with fracture toughness orthotropy and experimental validation // Engineering Fracture Mechanics. 2015. Vol. 138. April. Pp. 33–48.

37. Banks-Sills L., Hershkovitz I., Wawrzynek P. A., Eliasi R., Ingraffea A. R. Methods for calculating stress intensity factors in anisotropic materials: Part I. z = 0 is a symmetric plane // Engineering Fracture Mechanics. 2005. Vol. 72. No. 15. Pp. 2328–2358.

38. **Khansari N. M., Fakoor M., Berto F.** Probabilistic micromechanical damage model for mixedmode I/II fracture investigation of composite materials // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. 2019. Vol. 99. February. Pp. 177–193.

39. Bathe K. J., Wilson E. L. Numerical methods in finite element analysis. New Jersey, USA: Prentice-Hall: Englewood Cliffs, 1976. 528 p.

40. Gallagher R. H. Finite element analysis: Fundamentals. London: Pearson College Div., 1975. 420 p.

41. Zhao X., Mo Z.-L., Guo Z.-Y., Li J. A modified three-dimensional virtual crack closure technique for calculating stress intensity factors with arbitrarily shaped finite element mesh arrangements across the crack front // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. 2020. Vol. 109. October. P. 102695.

42. Fakoor M., Shavsavar S. The effect of T-stress on mixed mode I/II fracture of composite materials: Reinforcement isotropic solid model in combination with maximum shear stress theory // International Journal of Solids and Structures. 2021. Vol. 229. 15 October. Pp. 111–145.

43. Семенов А. С. PANTOCRATOR – конечно-элементный программный комплекс, ориентированный на решение нелинейных задач механики // Труды V-ой Международной конференции «Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности конструкций». СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2003. С. 466–480.

#### REFERENCES

1. Semenov A. S., Grishchenko A. I, Kolotnikov M. E., Getsov L. B., Finite-element analysis of thermal fatigue of gas turbine blades, Part 1. Material models, fracture criteria, identification, Vestnik UGATU [USATU Bulletin]. 23 (1 (83)) (2019) 70–81 (in Russian).

2. Getsov L. B., Mikhaylov V. E., Semenov A. S., et al., Raschetnoye opredeleniye resursa rabochikh i napravlyayushchikh lopatok GTU. Chast 1. Polikristallicheskiye materialy [Design determination of the work life of operating and guide blades of gas-turbine installations. Part 1. Polycrystalline materials], Gas Turbine Technologies. (7) (2011) 24–30 (in Russian).

3. Shalin R. E., Svetlov I. L., Kachalov E. B., et al., Monokristally nikelevykh zharoprochnykh splavov [Single crystals of nickel heat-resistant alloys], Mashinostroyeniye, Moscow, 1997 (in Russian).

4. Wilson B. C., Hickman J. A., Fuchs G. E., The effect of solution heat treatment on a singlecrystal Ni-based superalloy, JOM: J. Minerals, Metals & Mater. Soc. 55 (3) (2003) 35–40.

5. Getsov L. B., Materialy i prochnost detaley gazovykh turbin [Materials and strength of gas turbine parts], in 2 Vols., Vol. 1, Gas Turbine Technologies Publishing, Rybinsk, 2010 (in Russian).

6. Getsov L. B., Semenov A. S., Ignatovich I. A., Thermal fatigue analysis of turbine discs on the base of deformation criterion. Int. J. Fatig. 97 (April) (2017) 88–97.

7. Wang R., Zhang B., Hu D., et al., A critical-plane-based thermomechanical fatigue lifetime prediction model and its application in nickel-based single-crystal turbine blades, Mater. High Temp. 36 (4) (2019) 325–334.

8. Semenov A. S., Semenov S. G., Getsov L. B., Methods of computational determination of growth rates of fatigue, creep, and thermal fatigue cracks in poli- and monocrystalline blades of gas-turbine units, Strength Mater. 47 (2) (2015) 268–290.

9. Savikovskii A. V., Semenov A. S., Getsov L. B., Crystallographic orientation, delay time and mechanical constants influence on thermal fatigue strength of single-crystal nickel superalloys, Mater. Phys. Mech. 44 (1) (2020) 125–136.

10. Erdogan F., Stress intensity factors, J. Appl. Mech. 50 (4b) (1983) 992-1002.

11. Irwin G. R., Analysis of stresses and strains near the end of crack traversing a plate, J. Appl. Mech. 24 (3) (1957) 361–364.

12. Sih G. C., Paris P. C., Irwin G. R., On cracks in rectilinearly anisotropic bodies, Int. J. Fract. Mech. 1 (3) (1965) 189–203.

13. Ranjan S., Arakere N. K., A fracture-mechanics-based methodology for fatigue life prediction of single crystal nickel-based superalloys, J. Eng. Gas Turbine Power. 130 (3) (2008) 032501.

14. Cho S. B., Lee K. R., Determination of stress-intensity factors and boundary element analysis for interface cracks in dissimilar anisotropic materials // Eng. Fract. Mech. 43 (4) (1992) 603–614.

15. Mauge C., Kachanov M., Anisotropic material with interacting arbitrarily oriented cracks stress intensity factors and crack-microcrack interactions, Int. J. Fract. 65 (2) (1994) 115–139.

16. Tu C.-H., Chen C.-S., Yu T.-T., Fracture mechanics analysis of multiple cracks in anisotropic media, Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech. 35 (11) (2011) 1226–1242.

17. Wang X.-Q., Schubnel A., Fortin J., et al., High Vp/Vs ratio: Saturated cracks or anisotropy effects? Geophys. Res. Lett. 39 (11) (2012) L11307.

18. Saouma V. E., Ayari M. L., Leavell D. A., Mixed mode crack propagation in homogeneous anisotropic solids, Eng. Fract. Mech. 27 (2) (1987) 171–184.

19. Hakim V., Karma A., Crack path prediction in anisotropic brittle materials, Phys. Rev. Lett. 95 (23) (2005) 235501.

20. Mall S., Murhy J. F., Asce M., Shottafer J. E., Criterion for mixed mode fracture in wood, J. Eng. Mech. 109 (3) (1983) 680–690.

21. Ozkan U., Kaya A. C., Loghin A., et al., Fracture analysis of cracks in anisotropic materials using 3DFAS and ANSYS, Proc. ASME Int. Mech. Eng. Congress & Exposition. Jan., 2006. Chicago, USA (2006) 569–579.

22. Ozkan U., Nied H. F., Kaya A. C., Fracture analysis of anisotropic materials using enriched crack tip elements, Eng. Fract. Mech. 77 (7) (2010) 1191–1202.

23. Song Ch., Tin-Loi F., Gao W., A definition and evaluation procedure of generalized stress intensity factors at cracks and multi-material wedges, Eng. Fract. Mech. 77 (12) (2010) 2316–2336.

24. Gao H., Chiu C., Slightly curved or kinked cracks in anisotropic elastic solids, Int. J. Solids Struct. 29 (8) (1992) 947–972.

25. Obata M., Nemat-Nasser S., Goto Y., Branched cracks in anisotropic elastic solids, J. Appl. Mech. 56 (4) (1989) 858-864.

26. **Kardomateas G. A., Li R.,** Thermo-elastic crack branching in general anisotropic media, Int. J. Solids Struct. 42 (3–4) (2005) 1091–1109.

27. **Barsoum R. S.,** Cracks in anisotropic materials – an iterative solution of the eigenvalue problem, Int. J. Fract. 32 (1) (1986) 59–67.

28. Mazurowski B., O'Hara P., Gupta P., Duarte C. A., A displacement correlation method for stress intensity factor extraction from 3D fractures in anisotropic materials, Eng. Fract. Mech. 258 (December) (2021) 108040.

29. Hoenig A., Near-tip behavior of a crack in a plane anisotropic elastic body, Eng. Fract. Mech. 16 (3) (1982) 393–403.

30. Savikovskii A. V., Semenov A. S., Calculation of mixed-mode stress intensity factors for orthotropic materials in the plane stress state, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (2) (2022) 102–123 (in Russian).

31. Lekhnitsky S. G., Teoriya uprugosti anizotropnogo tela [Theory of elastisity of an anisotropic elastic body], Nauka, Moscow, 1977 (in Russian).

32. Voigt W., Lehrbuch der kristallphysik:(mit ausschluss der kristalloptik). BG Teubner, Leipzig, Berlin, 1910.

33. Love A. E. H., Mathematical theory of elasticity, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1927.

34. **Kachanov M. L.,** Osnovy mekhaniki razrusheniya [Fundamentals of fracture mechanics]. Nauka, Moscow, 1974, Pp. 223–226 (in Russian).

35. Morozov E. N., Nikishkov G. P., Metod konechnykh elementov v mekhanike razrusheniya [Finite element method in fracture mechanics], Nauka Publishing, Moscow, 1980 (in Russian).

36. Judt P. O., Ricoeur A., Linek G., Crack path prediction in rolled aluminum plates with fracture toughness orthotropy and experimental validation, Eng. Fract. Mech. 138 (April) (2015) 33–48.

37. Banks-Sills L., Hershkovitz I., Wawrzynek P. A., et al., Methods for calculating stress intensity factors in anisotropic materials: Part I. z = 0 is a symmetric plane, Eng. Fract. Mech. 72 (15) (2005) 2328–2358.

38. **Khansari N. M., Fakoor M., Berto F.,** Probabilistic micromechanical damage model for mixedmode I/II fracture investigation of composite materials, Theor. Appl. Fract, Mech. 99 (February) (2019) 177–193.

39. Bathe K. J., Wilson E. L., Numerical methods in finite element analysis, Prentice-Hall: Englewood Cliffs, New Jersey, USA, 1976.

40. Gallagher R. H., Finite element analysis: Fundamentals, Pearson College Div., London, 1975.

41. Zhao X., Mo Z.-L., Guo Z.-Y., Li J., A modified three-dimensional virtual crack closure technique for calculating stress intensity factors with arbitrarily shaped finite element mesh arrangements across the crack front, Theor. Appl. Fract. Mech. 109 (October) (2020) 102695.

42. Fakoor M., Shavsavar S., The effect of T-stress on mixed mode I/II fracture of composite materials: Reinforcement isotropic solid model in combination with maximum shear stress theory, Int. J. Solids Struct. 229 (15 October0 (2021) 111–145.

43. **Semenov A. S.,** PANTOCRATOR – konechno-elementnyy programmnyy kompleks, oriyentirovannyy na resheniye nelineynykh zadach mekhaniki [PANTOCRATOR – finite-element program specialized on the solution of non-linear problems of solid body mechanics], In: Proc. The V-th Int. Conf. "Scientific and engineering problems of reliability and service life of structures and methods of their decision", St. Petersburg Polytechnical University Publishing, St. Petersburg (2003) 466–480.

# СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

САВИКОВСКИЙ Артем Викторович — аспирант кафедры «Механика и процессы управления» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 savikovskij.av@edu.spbstu.ru ORCID: 0000-0003-1710-1943

**СЕМЕНОВ Артем Семенович** — доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой сопротивления материалов Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 Semenov.Artem@googlemail.com ORCID: 0000-0002-8225-3487

#### THE AUTHORS

SAVIKOVSKII Artem V. Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia savikovskii.artem@yandex.ru ORCID: 0000-0003-1710-1943 **SEMENOV** Artem S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia Semenov.Artem@googlemail.com ORCID: 0000-0002-8225-3487

Статья поступила в редакцию 29.09.2022. Одобрена после рецензирования 14.05.2023. Принята 14.05.2023. Received 29.09.2022. Approved after reviewing 14.05.2023. Accepted 14.05.2023. Научная статья УДК 539.3 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16312

# АНТИПЛОСКАЯ ТРЕЩИНА, ВЫХОДЯЩАЯ ИЗ ВЕРШИНЫ СОСТАВНОГО ФУНКЦИОНАЛЬНО-ГРАДИЕНТНОГО КЛИНА

## В. В. Тихомиров 🖾

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

⊠ victikh@mail.ru

Аннотация. Рассматривается задача об интерфейсной трещине продольного сдвига, расположенной между двумя функционально-градиентными клиновидными областями и выходящей из их общей вершины. Модули сдвига материалов областей являются квадратичными функциями полярного угла. Такой вид функциональной неоднородности позволяет выразить все компоненты упругого поля через одну гармоническую функцию. С помощью интегрального преобразования Меллина проблема сведена к скалярному уравнению Винера – Хопфа, для которого получено точное решение. Изучено влияние градиентов упругих свойств материалов и геометрических параметров структуры на коэффициент интенсивности напряжений в вершине трещины.

**Ключевые слова:** функционально-градиентный клин, интерфейсная трещина продольного сдвига, коэффициент интенсивности напряжений

Для цитирования: Тихомиров В. В. Антиплоская трещина, выходящая из вершины составного функционально-градиентного клина // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 150–159. DOI: https://doi. org/10.18721/ JPM.16312

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.16312

# AN ANTIPLANE CRACK EMERGING FROM THE TOP OF A COMPOSITE FUNCTIONAL GRADIENT WEDGE

# V. V. Tikhomirov 🖾

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

# ⊠ victikh@mail.ru

Abstract. In the paper, the problem on an interface longitudinal shear crack located between two functionally graded wedge-shaped regions and emerging from their common vertex has been considered. The shear modules of the materials are quadratic functions of the polar angle. This kind of functional inhomogeneity made it possible to express all the components of the elastic field through a single harmonic function. Using the Mellin integral transform, the problem was reduced to the Wiener – Hopf scalar equation, for which an exact solution was obtained. The influence of gradients of elastic properties of materials and geometric parameters of the structure on the stress intensity factor was studied.

Keywords: functionally graded wedge, interface crack of longitudinal shear, stress intensity factor

© Тихомиров В. В., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

**For citation:** Tikhomirov V. V., An antiplane crack emerging from the top of a composite functional gradient wedge, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 150–159. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16312

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

### Введение

Как известно, угловые точки упругих структур являются зонами повышенной концентрации напряжений и, следовательно, могут служить источниками появления и роста трещин. В рамках антиплоской задачи, трещины, выходящие из вершины изотропного, анизотропного, а также составного (композиционного) клина, рассматривались во многих работах [1 – 5]. Однако в случае, когда материал клиновидной области обладает градиентными свойствами, подобный анализ пока еще не проводился.

Функционально-градиентные материалы (ФГМ) представляют собой композиты, механические свойства которых непрерывно изменяются пространственным образом. Используемые в качестве покрытий, они обеспечивают защиту от термически и химически агрессивной окружающей среды. Распространенными формами механического повреждения тонких покрытий являются их растрескивание или отслоение. Разрушение слоистых градиентных покрытий с интерфейсной трещиной или с трещиной, ортогональной поверхности раздела материалов, исследовались, например, в работах [6, 7]. Градиентные материалы, применяемые как интерфейсные зоны, обеспечивают непрерывное изменение материалыных свойств и тем самым увеличивают прочность сцепления разнородных материалов [8]. Анализ клиновидной структуры с переходным ФГМ выполнен в работе [9].

Исследования, проведенные Чж. Джином и Р. Батра [10], показали, что упругие поля вблизи вершины трещины, находящейся в ФГМ, аналогичны полям в однородном материале, если упругие модули непрерывны и кусочно-непрерывно дифференцируемы. При анализе ФГМ, имеющих дефекты в виде трещин, для упругих модулей обычно используются линейные или экспоненциальные зависимости от координат, обеспечивающие аналитические решения уравнений равновесия. В работе [9] для градиентного материала предложена квадратичная зависимость модуля сдвига от полярного угла, которая в условиях антиплоской задачи позволяет выразить все компоненты упругого поля через одну гармоническую функцию. Такая зависимость упругого модуля использовалась в статье [11] при анализе составного градиентного клина, ослабленного полубесконечной трещиной.

В настоящей работе исследуется напряженное состояние составного функциональноградиентного клина с трещиной, распространяющейся из его вершины. В зависимости от градации материалов рассматриваются эффекты увеличения или уменьшения коэффициента интенсивности напряжений (КИН) в вершине трещины, по сравнению с однородным случаем.

#### Постановка задачи

Рассмотрим составной клин, содержащий интерфейсную антиплоскую трещину длины є, растущую из его вершины (рис. 1).

Материалы подобластей

$$\Omega_1 = \{ (r, \theta) : 0 \le r < \infty, 0 \le \theta \le \alpha_1 \},$$
  
$$\Omega_2 = \{ (r, \theta) : 0 \le r < \infty, -\alpha_2 \le \theta \le 0 \}$$

(*r*,  $\theta$  – полярные координаты) предполагаются функционально-градиентными.

Модули сдвига материалов являются функциями полярного угла и на границах  $\theta = \alpha_1$ и  $\theta = -\alpha_2$  принимают значения  $\tilde{\mu}_1$  и  $\tilde{\mu}_3$  соответственно. На интерфейсе модули сдвига материалов имеют одинаковую величину, равную  $\tilde{\mu}_2$ . Контакт материалов вне трещины предполагается идеальным. К берегам трещины приложена самоуравновешенная нагрузка g(r).

<sup>©</sup> Tikhomirov V. V., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.



При зависимости модулей сдвига материалов областей  $\Omega_{j}$  от полярного угла уравнения равновесия имеют вид

$$\frac{\partial^2 w_j}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 w_j}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial w_j}{\partial r} + \frac{1}{\mu_i(\theta)r^2} \frac{d\mu_j}{d\theta} \frac{\partial w_j}{\partial \theta} = 0, (1)$$

а напряжения выражаются через перемещения  $w_j$  по формулам

$$\tau_{\theta z j} = \frac{\mu_j}{r} \frac{\partial w_j}{\partial \theta}, \ \tau_{r z j} = \mu_j \frac{\partial w_j}{\partial r} \ (j = 1, 2).$$
(2)

Для модулей сдвига материалов принимаем ква-Рис. 1. Составной функционально- дратичные зависимости от угловой координаты:

$$\mu_j(\theta) = (a_j\theta + b_j)^2,$$

распространяющейся из его вершины: коэффициенты которых, определяемые значения- $\mu_1(\theta), \mu_2(\theta)$ -модулисдвигаградиентных ми на границах, имеют вид

$$a_1 = (\sqrt{\tilde{\mu}_1} - \sqrt{\tilde{\mu}_2})/\alpha_1,$$
  

$$a_2 = (\sqrt{\tilde{\mu}_3} - \sqrt{\tilde{\mu}_2})/\alpha_2,$$
  

$$b_1 = -b_2 = \sqrt{\tilde{\mu}_2}.$$

приложенная к берегам трещины

градиентный клин с интерфейсной

материалов областей  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$ ;  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,  $\theta$ , r,  $\varepsilon$  – геометрические параметры; g(r) – самоуравновешенная нагрузка,

продольного

трещиной

Если полагать, что перемещения в областях Ω, представимы в форме

сдвига,

$$w_{j}(r,\theta) = \frac{1}{a_{j}\theta + b_{j}} \tilde{w}_{j}(r,\theta), \qquad (3)$$

то из уравнений (1) вытекает, что функции  $\tilde{w}_j(r,\theta)$  являются гармоническими, а напряжения определяются формулами

$$\tau_{\theta z j} = -\frac{a_j}{r} \tilde{w}_j(r, \theta) + \frac{a_j \theta + b_j}{r} \frac{\partial \tilde{w}_j}{\partial \theta}, \qquad (4)$$
$$\tau_{r z j} = (a_j \theta + b_j) \frac{\partial \tilde{w}_j}{\partial r}.$$

Компоненты упругих полей (3), (4) должны удовлетворять смешанным условиям на границе раздела материалов и отсутствию напряжений на внешних кромках композита:

$$\tau_{\theta_{21}}(r, +0) = \tau_{\theta_{22}}(r, -0) = g(r) \ (0 \le r < \varepsilon)$$

$$\tau_{\theta_{21}}(r, +0) = \tau_{\theta_{22}}(r, -0), \ w_1(r, +0) = w_2(r, -0) \ (\varepsilon < r < \infty)$$

$$\tau_{\theta_{21}}(r, \alpha_1) = 0, \ \tau_{\theta_{22}}(r, -\alpha_2) = 0 \ (0 \le r < \infty)$$
(5)

### Сведение задачи к уравнению Винера – Хопфа и его решение

Применяя интегральное преобразование Меллина, для перемещений и напряжений получим следующие представления:

$$w_{j}(r,\theta) = \frac{1}{2\pi i} \int_{L} W_{j}(p,\theta) r^{-p} dp,$$

$$\tau_{\theta z j}(r,\theta) = \frac{1}{2\pi i} \int_{L} T_{\theta z j}(p,\theta) r^{-p-1} dp,$$
(6)

152

в которых трансформанты, согласно формулам (3) и (4), имеют вид

$$W_i(p,\theta) = [A_i(p)\sin p\theta + B_i(p)\cos p\theta]/(a_i\theta + b_i),$$

$$T_{\theta_{zj}}(p,\theta) = -a_j \Big[ A_j(p) \sin p\theta + B_j(p) \cos p\theta \Big] + \Big( a_j \theta + b_j \Big) p \Big[ A_j(p) \cos p\theta - B_j(p) \sin p\theta \Big].$$

В соответствии с условиями регулярности, контур интегрирования *L* в формулах (6) расположен параллельно мнимой оси в полосе  $-\delta_1 < \text{Re } p < \delta_2$  ( $\delta_1, \delta_2 > 0$ ). Величины, зависящие от параметра интегрального преобразования,  $A_j(p)$  и  $B_j(p)$  (j = 1, 2), определяются из условий (5).

Введем в рассмотрение следующие функции:

 $\tilde{\mu}_1$ 

$$U_{+}(p) = \int_{0}^{1} \frac{\partial}{\partial \rho} [w_{1}(\varepsilon \rho, +0) - w_{2}(\varepsilon \rho, -0)] \rho^{p} d\rho, \qquad (7)$$
$$T_{-}(p) = \int_{1}^{\infty} \tau_{\theta z 1}(\varepsilon \rho, +0) \rho^{p} d\rho, \quad G_{+}(p) = \int_{0}^{1} g(\varepsilon \rho) \rho^{p} d\rho.$$

При этом  $W_+(p)$  и  $G_+(p)$  регулярны и не имеют нулей в правой от контура L полуплоскости  $\Omega_+$ , а  $T_-(p)$  – в левой полуплоскости  $\Omega_-[12]$ . Выражая величины  $A_j(p)$  и  $B_j(p)$  через функции (7) в граничных условиях (5), преобразованных по Меллину, придем к скалярному уравнению Винера – Хопфа:

$$F(p)[T_{-}(p) + G_{+}(p)] + \tilde{\mu}_{2}\varepsilon^{-1}U_{+}(p) = 0 \quad (p \in L),$$
(8)

где

$$F(p) = \operatorname{ctg}(\alpha_1 p) \frac{v_1(\alpha_1 p)}{u_1(\alpha_1 p)} + \operatorname{ctg}(\alpha_2 p) \frac{v_2(\alpha_2 p)}{u_2(\alpha_2 p)},\tag{9}$$

$$u_{j}(x) = 1 + m_{j}^{-1}(m_{j} - 1)^{2} x^{-2} [1 - x \operatorname{ctg}(x)],$$
(10)  
$$v_{j}(x) = 1 + (m_{j} - 1) x^{-1} \operatorname{tg}(x) \quad (j = 1, 2),$$
$$m_{1} = \sqrt{\tilde{\mu}_{2}/\tilde{\mu}_{1}}, \quad m_{2} = \sqrt{\tilde{\mu}_{2}/\tilde{\mu}_{3}},$$
$$= \mu_{1}(\alpha_{1}), \quad \tilde{\mu}_{2} = \mu_{1}(0) = \mu_{2}(0), \quad \tilde{\mu}_{3} = \mu_{2}(-\alpha_{2}).$$

В формулы (10) входят два безразмерных параметра  $m_j$  ( $0 < m_j < \infty$ ), характеризующие относительные сдвиговые жесткости материалов на линии трещины по отношению к материалам на внешних гранях клина. При  $0 < m_i < 1$  трещина будет находиться в области локально мягкого материала композита, а при  $1 < m_j < \infty$  — в области локально жесткого материала. Значение  $m_j = 1$  отвечает однородному материалу в области  $\Omega_j$ . В случае однородного клина, когда  $m_1 = m_2 = 1$ , из формул (9) и (10) для коэффициента уравнения (8) имеем выражение, полученное в работе [13]. Если  $m_1 = m_2$ , то функция F(p) принимает вид, найденный в работе [11].

Для факторизации функции (9) представим ее в следующей форме:

$$F(p) = \frac{2}{p} K(p),$$

$$K(p) = X(p)\Phi(p), \quad X(p) = p \operatorname{ctg}(\alpha_1 p),$$

$$\Phi(p) = \frac{1}{2} F_1(p) F_2(p), \quad F_1(p) = \frac{v_1(\alpha_1 p)}{u_1(\alpha_1 p)},$$
(11)

$$F_2(p) = 1 + \operatorname{tg}(\alpha_1 p)\operatorname{ctg}(\alpha_2 p) \frac{u_1(\alpha_1 p)v_2(\alpha_2 p)}{u_2(\alpha_2 p)v_1(\alpha_1 p)}$$

На мнимой оси при p = it функция  $\Phi(it)$  непрерывна, не имеет нулей и полюсов, ее индекс равен нулю и при  $t \to \infty$  стремится к единице. Поэтому, согласно выкладкам, приведенным в работе [12], получим:

$$\Phi(p) = \Phi_{+}(p) \Phi_{-}(p), \qquad (12)$$

$$\Phi_{\pm}(p) = \exp\left[\mp \frac{1}{2\pi i} \int_{L} \frac{\ln \Phi(t)}{t - p} dt\right] \quad (p \notin L),$$

$$X(p) = X_{+}(p)X_{-}(p), \ X_{\pm}(p) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_{1}}} \frac{\Gamma(1 \pm p\alpha_{1}/\pi)}{\Gamma(1/2 \pm p\alpha_{1}/\pi)}.$$

Используя формулы (11), (12) и применяя теоремы Лиувилля [12], из уравнения (8) получаем:

$$X_{-}(p)\Phi_{-}(p)T_{-}(p) + Q_{-}(p) = -\frac{\tilde{\mu}_{2}p}{2\varepsilon}U_{+}(p)X_{+}^{-1}(p)\Phi_{+}^{-1}(p) - Q_{-}(p) = J(p),$$
(13)

где

$$Q_{\pm}(p) = \mp \frac{1}{2\pi i} \int_{L} \frac{Q(t)}{t-p} dt, \quad Q(t) = \frac{t}{2} \Phi_{+}^{-1}(t) X_{+}^{-1}(t) F(t) G_{+}(t).$$
(14)

Если провести оценку членов в равенстве (13) при  $p \to \infty$ , то мы приходим к выводу о постоянстве единой аналитической функции:

$$J(p) = \text{const} = C.$$

Эту постоянную можно найти из уравнения (13) при значении p = 0.

С учетом формул (12) и (14), а также равенства  $T_{-}(0) = -G_{+}(0)$ , вытекающего из уравнения равновесия области Ω<sub>1</sub>, находим, что

$$C = -C_*G_+(0) + \frac{1}{4\pi i} \int_L X_+^{-1}(p) \Phi_+^{-1}(t) F(t) G_+(t) dt, \qquad (15)$$

$$C_* = \Phi_{-}(0)X_{-}(0) = \left[\frac{3}{2\alpha_1\alpha_2}\left(\frac{\alpha_2m_1^2}{m_1^2 + m_1 + 1} + \frac{\alpha_1m_2^2}{m_2^2 + m_2 + 1}\right)\right]^{1/2}.$$

Для вычисления интеграла в формуле (15) воспользуемся теоремой Коши о вычетах. Полюсы подынтегральной функции, расположенные в полуплоскости  $\Omega_{\perp}$  (правой от контура L), являются полюсами F(t); эту функцию, исходя из формулы (9), удобно представить в следующем виде:

> $F(t) = m_1 \alpha_1 t \frac{\tilde{v}_1(\alpha_1 t)}{\tilde{u}_1(\alpha_1 t)} + m_2 \alpha_2 t \frac{\tilde{v}_2(\alpha_2 t)}{\tilde{u}_2(\alpha_2 t)},$ (16)

где

$$\tilde{v}_{j}(x) = x \cos x + (m_{j} - 1) \sin x, \ x = \alpha_{j} t,$$
  
$$\tilde{u}_{j}(x) = m_{j} x^{2} \sin x + (m_{j} - 1)^{2} (\sin x - x \cos x) \ (j = 1, \ 2).$$
(17)

Отсюда вытекает, что полюсы функции (16) определяются положительными корнями

уравнений  $\tilde{u}_j(x) = 0$ , находящимися в интервалах  $n\pi < x_{nj} < (n + 0.5)\pi$  (n = 1, 2, ...). Следует отметить, что существуют две группы полюсов:  $t_{nj} = x_{nj} / \alpha_j$  (j = 1, 2). Можно показать, что функции (17) не имеют комплексных нулей. Кроме того, при замене  $m_j$  на  $m_i^{-1}$  рассматриваемые полюсы будут идентичными.

В результате, из формулы (15) получаем, что

$$C = -C_*G_+(0) - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\alpha_1}{\pi}} \sum_{j=1}^2 \sum_{n=1}^\infty a_{nj}G_+(t_{nj}), \qquad (18)$$

где

$$a_{nj} = \frac{1}{\alpha_j} \frac{\Gamma(1/2 + \alpha_1 t_{nj} / \pi)}{\Gamma(1 + \alpha_1 t_{nj} / \pi)} \Phi_+^{-1}(t_{nj}) b(x_{nj}),$$
  
$$\Phi_+^{-1}(t_{nj}) = \exp\left[-\frac{t_{nj}}{\pi} \int_0^\infty \frac{\ln \Phi(i\xi)}{\xi^2 + t_{nj}^2} d\xi\right],$$
  
$$b(x_{nj}) = \frac{x_{nj} \cos x_{nj} + (m_j - 1) \sin x_{nj}}{x_{nj} \cos x_{nj} + (m_j + m_j^{-1}) \sin x_{nj}}.$$

На основании теоремы Абелева типа [12] заключаем, что асимптотика напряжений на линии трещины при  $r \rightarrow \varepsilon + 0$  имеет вид

$$\tau_{\theta z 1}(r,0) \sim C \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi} \frac{1}{\sqrt{r-\varepsilon}}}.$$
(19)

Определим коэффициент интенсивности напряжений (КИН) в вершине трещины формулой

$$K_{\rm III} = \lim_{r \to \varepsilon + 0} \sqrt{2\pi(r - \varepsilon)\tau_{\theta z 1}(r, 0)}$$

Тогда, используя асимптотику (19), получаем выражение

$$K_{\rm III}(\alpha_1, \alpha_2, m_1, m_2, \varepsilon) = \sqrt{2\varepsilon}C.$$
 (20)

Формулами (18) и (20) определяется КИН для различных схем нагружения берегов трещины самоуравновешенной нагрузкой на основе нахождения интеграла, задающего функцию  $G_{\perp}(p)$  в равенствах (7).

Пусть к берегам трещины приложены сосредоточенные силы величиной  $T_0$  на расстоянии  $r_0$  от вершины клина. В этом случае

$$g(r) = -T_0 \delta(r - r_0),$$
  

$$G_+(p) = -T_0 / \varepsilon (r_0 / \varepsilon)^p$$

 $(\delta(r - r_0) -$ дельта-функция Дирака).

Тогда, согласно формулам (18) и (20), получаем для КИНа следующее представление:

$$K_{\rm III} = T_0 \sqrt{\frac{2}{\varepsilon}} \left[ C_* + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\alpha_1}{\pi}} \sum_{j=1}^2 \sum_{n=1}^\infty a_{nj} \left( \frac{r_0}{\varepsilon} \right)^{t_{nj}} \right].$$
(21)

С целью выявления эффекта, вносимого градиентами материалов, введем в рассмотрение нормированный вариант КИНа:

$$N = K_{\rm III} / K_{\rm III}^0 , \qquad (22)$$

где  $K_{\text{III}}^0$  — КИН в вершине трещины, расположенной в однородном клине. Значение  $K_{\text{III}}^0$  можно получить из формулы (21), положив  $m_1 = m_2 = 1$ . В этом случае, согласно формулам (10),

$$u_{i}(x) = v_{i}(x) = 1 \ (i = 1, 2).$$

Следовательно, функции, входящие в представления (11), принимают вид

$$F_1(p) = 1, F_2(p) = 1 + tg(\alpha_1 p)ctg(\alpha_2 p),$$

а полюсы подынтегральной функции в выражении (15), в соответствии с представлением (9), определяются формулами

$$t_{ni} = \pi n / \alpha_i \ (n = 1, 2, ..., j = 1, 2).$$

В частности, при геометрической симметрии структуры, когда  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ , ряд (21) суммируется и КИН в однородном клине имеет вид

$$K_{\rm III}^0 = T_0 \sqrt{\frac{2}{\alpha \varepsilon}} \frac{\varepsilon^{\pi/(2\alpha)}}{\sqrt{\varepsilon^{\pi/\alpha} - r_0^{\pi/\alpha}}}.$$

#### Численные результаты

Коэффициент интенсивности напряжений (21) зависит от пяти параметров: двух углов раствора  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  клиновидных областей  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$ , относительных жесткостей этих областей  $m_1$  и  $m_2$ , а также безразмерного параметра  $r_0 / \varepsilon$ , определяющего положения точек приложения сил к берегам трещины.

Влияние на КИН геометрического параметра  $r_0 / \varepsilon$  при его малых значениях является весьма слабым и возрастает при величинах  $r_0 / \varepsilon$ , близких к единице, когда сходимость рядов в формуле (21) ухудшается. Зависимость нормированного КИНа (22) от параметра  $r_0 / \varepsilon$ , например, в случае однородной области  $\Omega_2$ , для  $m_1 > 1$  является монотонно убывающей, а для  $m_1 < 1$  – монотонно возрастающей. При  $r_0 / \varepsilon << 1$  ряды (21) не вносят значительного вклада в КИН, и его значение в этом случае определяется величиной  $C_*$ . Аналогичная ситуация имеет место также в случае малых углов раствора клиновидных областей, когда  $\alpha_1$  и  $\alpha_2 << 1$ .



Рис. 2. Зависимости нормированного КИНа от относительной сдвиговой жесткости  $m_1$  функционально-градиентной области  $\Omega_1$  в случае геометрически симметричного клина и однородной области  $\Omega_2$  при  $\varepsilon/r_0 = 0,5$  для различных значений угла  $\alpha = \alpha_1 = \alpha_2$ :

 $\pi/4$  (1);  $\pi/2$  (2);  $3\pi/4$  (3);  $\pi$  (4)



Рис. 3. Зависимости нормированного КИНа от угла α,

функционально-градиентной области  $\Omega_1$  и однородной области  $\Omega_2$  в виде четверти плоскости при  $\epsilon/r_0 = 0,5$  для различных значений параметра  $m_1: 0,25$  (1); 0,50 (2); 2,00 (3); 4,00 (4)

В случае композита геометрически симметричной структуры ( $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ ) с однородной областью  $\Omega_2$  ( $m_2 = 1$ ) зависимость нормированного КИНа (22) от градиентных свойств материала области  $\Omega_1$  приведена на рис. 2. Если в зоне интерфейса материал имеет более низкую жесткость на сдвиг, по сравнению с внешней границей ( $m_1 < 1$ ), то это приводит при всех углах  $\alpha$  к снижению КИНа (N < 1). Напротив, когда трещина расположена в зоне материала с высокой сдвиговой жесткостью ( $m_1 > 1$ ), происходит возрастание коэффициента интенсивности (N > 1), по сравнению с однородным случаем. При этом эффекты повышения и снижения нормированного КИНа становятся более выраженными при уменьшении углов раствора структуры.

Аналогичная ситуация имеет место и в случае композита несимметричного строения. Такое, например, поведение КИНа будет для однородной области  $\Omega_2$ , имеющей вид четверти плоскости, и любых значениях угла в пределах  $0 < \alpha_1 \leq 3\pi/2$  (рис. 3). Влияние на коэффициент интенсивности градиента материала области  $\Omega_1$  становится особенно заметным в случае тонких клиновидных покрытий, когда угол  $\alpha_1$  является достаточно малым.



Рис. 4. Зависимости нормированного КИНа от относительной сдвиговой жесткости  $m_1$  при  $\epsilon/r_0 = 0.5$  в случае функционально-градиентной полуплоскости, образованной клиновидными областями с углами  $\alpha_1 = \alpha_2 = \pi/2$ , для различных значений параметра  $m_2$ : 0,25 (1); 0,50 (2); 1,00 (3); 2,00 (4); 4,00 (5)

Изменение КИНа в вершине трещины в зависимости от градиентов модулей сдвига в обоих материалах рассмотрено на примере составной полуплоскости для углов  $\alpha_1 = \alpha_2 = \pi/2$ . В отличие от случая однородного материала области  $\Omega_2$ , когда  $m_2 = 1$ , ситуация не является столь однозначной, как ранее. В целом, наличие градиента модуля сдвига в этой области обуславливает снижение КИНа при  $m_2 < 1$  (см. кривые l и 2 на рис. 4) и возрастание КИНа при  $m_2 > 1$  (кривые 4 и 5) для любых значений параметра  $m_1$ . Однако градиентные свойства материала области  $\Omega_2$  могут приводить к значениям N > 1даже в случае достаточно малой относительной жесткости  $m_1 < 1$  для  $m_2 > 1$  (кривые 4 и 5). Кроме того, значения параметра  $m_2 < 1$  (кривые l и 2) могут обуславливать величины нормированного КИНа, не превышающие единицу в некотором диапазоне относительной сдвиговой жесткости, когда  $m_1 > 1$ .

#### Заключение

В данной работе на основе интегрального преобразования Меллина и использования метода Винера – Хопфа получено точное решение задачи о равновесии составного функционально-градиентного клина, ослабленного интерфейсной трещиной продольного сдвига, выходящей из его вершины. Берега трещины нагружены самоуравновешенными сосредоточенными силами. Модули сдвига материалов, составляющих клин двух клиновидных областей, предполагаются зависящими квадратичным образом от угловой координаты и принимают заданные значения на интерфейсе и внешних сторонах клина. Такая функциональная зависимость позволяет выразить все компоненты упругих полей в этих областях через гармонические функции. Проведен анализ влияния геометрических и жесткостных параметров композита на величину коэффициента интенсивности напряжений (КИН) в вершине трещины. Выяснено, что градиентные свойства материалов могут существенно влиять на указанную величину. В случае, когда трещина расположена в области, относительно более мягкой, по сравнению с областями вблизи его кромок, КИН значительно уменьшается, по сравнению с его значением в однородном материале. Наоборот, ужесточение материалов в области интерфейса вызывает для КИНа повышающий эффект по отношению к однородному случаю.

Предложенный в работе подход можно применять и в случае, когда модули сдвига материалов имеют скачок на линии роста трещины.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

**1. Wu X., Dzenis Y., Zou W.** Screw dislocation interacting with an interfacial edge crack between two bonded piezoelectric wedges // International Journal of Fracture. 2002. Vol. 117. No. 3. Pp. 9–14.

2. Beom H. G., Jang H. S. A wedge crack in an anisotropic material under antiplane shear // International Journal of Engineering Science. 2011. Vol. 49. No. 9. Pp. 867–880.

3. Beom H. G., Jang H. S. A crack emanating from a wedge in dissimilar anisotropic materials under antiplane shear // International Journal of Fracture. 2012. Vol. 177. No. 2. Pp. 191–198.

4. Beom H. G., Jang H. S. Interfacial wedge cracks in dissimilar anisotropic materials under antiplane shear // International Journal of Engineering Science. 2012. Vol. 56. No. 1. Pp. 49–62.

5. Тихомиров В. В. Точное решение задачи для трещины, выходящей из вершины двух разнородных клиньев // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. No. 2. С. 130–139.

6. Jin Z.-H., Batra R. C. Interface cracking between functionally graded coatings and a substrate under antiplane shear // International Journal of Engineering Science. 1996. Vol. 34. No. 15. Pp. 1705–1716.

7. Li Y.-D., Lee K. Y. An anti-plane crack perpendicular to the weak/micro-discontinuos interface in a bi-FGM structure with exponential and linear non-homogeneities // International Journal of Fracture. 2007. Vol. 146. No. 4. Pp. 203–211.

8. **Ding S.-H., Li X.** Mode-I crack problem for functionally graded layered structures // International Journal of Fracture. 2011. Vol. 168. No. 2. Pp. 209–226.

9. Тихомиров В. В. Сингулярность напряжений в вершине композитного клина с внутренним функционально-градиентным материалом // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2015. №. 3 (225). С. 96–106.

10. Jin Z.-H., Batra R. C. Some basic fracture mechanics concepts in functionally graded materials // Journal of Mechanics and Physics of Solids. 1996. Vol. 44. No. 8. Pp. 1221–1235.

11. Тихомиров В. В. Функционально-градиентный клин, ослабленный полубесконечной трещиной // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. No. 3. C. 201–213.

12. Noble B. Method based on the Wiener – Hopf technique for solution of partial differential equations. 2nd edition. Washington: American Mathematical Society, 1988. 246 p.

13. Тихомиров В. В. Полубесконечная трещина моды III в биматериальном клине // Научнотехнические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2016. No. 2 (242). С. 126–135.

#### REFERENCES

1. Wu X., Dzenis Y., Zou W., Screw dislocation interacting with an interfacial edge crack between two bonded piezoelectric wedges, Int. J. Fract. 117 (3) (2002) 9–14.

2. Beom H. G., Jang H. S., A wedge crack in an anisotropic material under antiplane shear, Int. J. Eng. Sci. 49 (9) (2011) Pp. 867–880.

3. Beom H. G., Jang H. S., A crack emanating from a wedge in dissimilar anisotropic materials under antiplane shear, Int. J. Fract. 177 (2) (2012) 191–198.

4. Beom H. G., Jang H. S., Interfacial wedge cracks in dissimilar anisotropic materials under antiplane shear, Int. J. Eng. Sci. 56 (1) (2012) Pp. 49–62.

5. Tikhomirov V. V., The exact solution of the problem on a crack emerging from the top of two dissimilar wedge, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 12 (2) (2019) 130–139 (in Russian).

6. Jin Z.-H., Batra R. C., Interface cracking between functionally graded coatings and a substrate under antiplane shear, Int. J. Eng. Sci. 34 (15) (1996) 1705–1716.

7. Li Y.-D., Lee K. Y., An anti-plane crack perpendicular to the weak/micro-discontinuos interface in a bi-FGM structure with exponential and linear non-homogeneities, Int. J. Fract. 146 (4) (2007) 203–211.

8. Ding S.-H., Li X., Mode-I crack problem for functionally graded layered structures, Int. J. Fract. 168 (2) (2011) 209–226.

9. Tikhomirov V. V., Stress singularity in a top of the composite wedge with internal functionally graded material, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (3 (225)) (2015) 96–106 (in Russian).

10. Jin Z.-H., Batra R. C., Some basic fracture mechanics concepts in functionally graded materials, J. Mech. Phys. Solids. 44 (8) (1996) 1221–1235.

11. **Tikhomirov V. V.,** Functionally graded wedge weakened by a semi-infinite crack, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 201–213 (in Russian).

12. Noble B., Method based on the Wiener – Hopf technique for solution of partial differential equations. 2nd edition, American Mathematical Society, Washington, 1988.

12. Noble B., Method based on the Wiener – Hopf technique for solution of partial differential equations, Pergamon Press, Oxford, 1958.

13. **Tikhomirov V. V.,** A semi-infinite crack of mode III in the bimaterial wedge, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (2 (242)) (2016) 126–135 (in Russian).

# СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

**ТИХОМИРОВ Виктор Васильевич** — кандидат физико-математических наук, заместитель директора по образовательной деятельности Института прикладной математики и механики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 victikh@mail.ru

#### THE AUTHOR

#### **TIKHOMIROV Victor V.**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia victikh@mail.ru

Статья поступила в редакцию 17.03.2023. Одобрена после рецензирования 14.05.2023. Принята 14.05.2023.

Received 17.03.2023. Approved after reviewing 14.05.2023. Accepted 14.05.2023.

Научная статья УДК 531.391+681.5 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16313

# ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ МЕТОДА МОДАЛЬНЫХ ФИЛЬТРОВ И МЕТОДА НАБЛЮДАТЕЛЕЙ ПРИ РЕАЛИЗАЦИИ МОДАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ КОЛЕБАНИЯМИ УПРУГИХ СИСТЕМ

# А. В. Федотов <sup>1</sup> <sup>∞</sup>, А. К. Беляев <sup>1</sup>, В. А. Полянский <sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия;

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

<sup>™</sup> alvafed@yandex.ru

Аннотация. Статья посвящена сравнению эффективности двух методов реализации модального управления для активного гашения колебаний распределенных упругих систем: метода модальных фильтров, предполагающего линейное преобразование измеренных и управляющих сигналов, и метода наблюдателей, использующих модель объекта для восстановления вектора состояния по результатам измерений. Для этого численно решается задача (в двух постановках) гашения вынужденных изгибных колебаний тонкой металлической балки на нескольких низших резонансах с помощью пьезоэлектрических сенсоров и актуаторов. Полученные результаты показали бесспорное преимущество метода наблюдателей перед методом модальных фильтров. Проанализированы эффекты передачи сигнала в контуре управления, возникающие в реальных системах, но не принимаемые, как правило, во внимание в численных исследованиях. Установлено, что эти эффекты существенно влияют на эффективность синтезируемых систем управления, поэтому их необходимо учитывать при моделировании.

**Ключевые слова:** активное гашение колебаний, модальное управление, модальные фильтры, наблюдатели, упругие системы

Финансирование: Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-573).

Для цитирования: Федотов А. В., Беляев А. К., Полянский В. А. Численное исследование эффективности метода модальных фильтров и метода наблюдателей при реализации модального управления колебаниями упругих систем // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 160–176. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16313

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.16313

# NUMERICAL STUDY OF THE EFFICIENCY OF MODAL FILTER METHOD AND OBSERVER METHOD FOR IMPLEMENTATION OF MODAL CONTROL OF VIBRATIONS OF ELASTIC SYSTEMS

A. V. Fedotov<sup>1</sup> ⊠, A. K. Belyaev<sup>1</sup>, V. A. Polyanskiy<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Institute for Problems of Mechanical Engineering of RAS, St. Petersburg, Russia; <sup>2</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

© Федотов А. В., Беляев А. К., Полянский В. А., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

# <sup>III</sup> alvafed@yandex.ru

**Abstract.** The article compares the efficiency of two methods for implementing modal control for active vibration suppression of distributed elastic systems. The former is the modal filter method, which implies a linear transformation of measured and control signals; the latter is the method of modal observers, which uses the object model to reconstruct the state vector from the measurement signals. For this purpose, the problem of suppression of forced bending vibrations of a thin metal beam at several lower resonance frequencies has been solved numerically for two different objects. The simulation results showed an undeniable advantage of the observer method over the modal filter one. The inherent effects of signal transmission in the control loop, occurring in real systems but usually neglected in numerical studies were analyzed. It was established that these phenomena had a significant impact on the efficiency of the synthesized control systems. Therefore, they must be taken into account in numerical simulations.

Keywords: active vibration suppression, modal control, modal filters, observers, elastic systems

**Funding.** The research was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Agreement No. 075-15-2021-573).

**For citation:** Fedotov A. V., Belyaev A. K., Polyanskiy V. A., Numerical study of the efficiency of modal filter method and observer method for implementation of modal control of vibrations of elastic systems, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 160–176. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16313

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

#### Введение

В последние десятилетия динамично развивается такая область техники, как активное управление колебаниями распределенных упругих систем. Подобные задачи встречаются во многих сферах: строительстве, робототехнике, машиностроении, автомобилестроении, аэрокосмической отрасли и т. п. Зачастую проблема управления формулируется как задача гашения вынужденных колебаний объекта, поскольку такие колебания могут ухудшать эксплуатационные характеристики конструкции, вызывать нежелательный шум и даже служить причиной ее повреждения и выхода из строя. Рассмотрению указанной задачи и посвящена данная работа.

Активное управление с обратной связью механическими колебаниями упругих систем подразумевает наличие в системе управления (СУ) сенсоров (датчиков), сигнал которых служит входом для СУ, и актуаторов (приводов), прикладывающих к объекту управляющее воздействие, которое является выходом СУ. Для данных целей широкое распространение получили пьезоэлектрические элементы, способные выполнять функции сенсоров и актуаторов благодаря прямому и обратному пьезоэффектам. Такие элементы просты и удобны в использовании, легко принимают нужную форму и могут работать в широком диапазоне частот, что делает их очень привлекательными для задач активного управления колебаниями. Именно такие сенсоры и актуаторы в виде пьезопластин, покрытых электродами и наклеиваемых на объект управления (металлическую балку), рассматриваются в данной работе.

В предыдущих работах авторов проводилось экспериментальное [1] и численное [2, 3] сравнение различных методов активного управления на примере задачи гашения вынужденных изгибных колебаний тонкой металлической балки в диапазоне частот, включающем две низшие резонансные частоты. Рассматривались локальный подход (каждый контур управления содержит один сенсор и один актуатор, расположенные с двух сторон балки в одной и той же области), модальный подход (каждый контур управления соответствует определенной форме колебаний и использует все имеющиеся сенсоры и актуаторы), а также метод управления формой (используется только один контур управления, настроенный таким образом, чтобы компенсировать известную форму внешнего

© Fedotov A. V., Belyaev A. K., Polyanskiy V. A., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

возмущения). Результаты исследований свидетельствуют о том, что при необходимости гасить вынужденные колебания объекта на нескольких резонансных частотах наибольшей эффективностью среди перечисленных обладает модальный подход.

В упомянутых исследованиях, при реализации модального подхода, для разделения форм колебаний в СУ авторами был использован метод модальных фильтров, т. е. матриц, задающих линейное преобразование измеренных и управляющих сигналов. Данная процедура позволяет «отфильтровывать» ненужные формы, для того чтобы обеспечивать соответствие каждого контура управления одной определенной форме колебаний объекта. Такой способ прост в применении, однако его эффективность ограничена, особенно в случае использования малого количества сенсоров и актуаторов. Существует другой, более продвинутый метод разделения форм в контурах управления — метод наблюдателей. Он предполагает использование модели объекта для восстановления вектора состояния по результатам измерений, и за счет этого должен обеспечивать более эффективное разделение форм. Однако данный подход также не решает полностью основную проблему модального управления — спилловер-эффект, т. е. перетекание энергии на высшие неуправляемые формы [4], что может привести к дестабилизации замкнутой системы.

Основная задача данной работы состоит в том, чтобы сравнить в одинаковых условиях два описанных метода реализации модального управления: метод модальных фильтров и метод наблюдателей.

Особенностью данного численного исследования является максимальная приближенность постановки задачи к условиям эксперимента, а именно — учет эффектов передачи сигнала в контуре управления, неотъемлемых в реальных системах. Приняты во внимание такие эффекты, как сдвиг фазы и изменение амплитуды управляющего сигнала, которые возникают вследствие запаздывания и наличия дополнительных элементов в контуре управления.

Как правило, при численном моделировании указанные эффекты не учитываются [5, 6], однако настоящее исследование с убедительностью доказывает, что они существенно влияют на результат синтеза СУ и ее эффективность, и потому их непременно следует учитывать в численных исследованиях, если их конечной целью является экспериментальная реализация рассматриваемых систем.

#### Теоретические основы рассматриваемых подходов

Истоки модального подхода восходят к началу 1960-х годов, когда его основные принципы были впервые сформулированы в статье [7]. Затем предложенный метод был развит в работах [8, 9]. В настоящее время модальный подход уже можно назвать классическим: он хорошо изучен и используется в разных областях техники [10 – 12]. При реализации этого подхода используют как метод модальных фильтров (для распределенных сенсоров и актуаторов [13, 14] или их дискретных систем [15, 16]), так и метод наблюдателей [5, 17, 18].

В данном разделе дается общая формулировка указанных методов, а также разъясняются особенности их использования в рамках настоящего исследования.

Метод модальных фильтров. Рассмотрим задачу управления изгибными колебаниями балок с помощью пьезоэлектрических сенсоров и актуаторов. Представим поперечное смещение точек балки w(x, t) в виде разложения по собственным формам:

$$w(x,t) = \sum_{i=1}^{n} X_i(x) q_i(t),$$
(1)

где n – число собственных форм колебаний балки, учитываемых в модели;  $X_i(x)$  – собственные формы колебаний;  $q_i(t)$  – обобщенные координаты.

Запишем в матричной форме уравнения колебаний балки для собственных форм:

$$\ddot{q} + 2\xi\Omega\dot{q} + \Omega^2 q = Q^c + Q^d, \qquad (2)$$

где  $q_{n\times 1}(t)$  — вектор обобщенных координат длиной n;  $\Omega_{n\times n}$  — диагональная матрица собственных частот колебаний балки;  $\xi$  — скалярный коэффициент демпфирования (для простоты принимаем его одинаковым для всех форм);  $Q_{n\times 1}^{c}(t)$ ,  $Q_{n\times 1}^{d}(t)$  — векторы обобщенных сил, соответствующие управлению и внешнему возмущению.

Для простоты предположим, что число сенсоров и актуаторов одинаково и равно  $m \ (m \le n)$ . Их работа описывается следующими уравнениями:

$$y_{m\times 1} = \Theta_{m\times n}^{s} q_{n\times 1}, \tag{3}$$

$$Q_{n\times 1}^c = \Theta_{n\times m}^a u_{m\times 1},\tag{4}$$

где  $y_{m\times 1}(t)$  – вектор сигналов сенсоров;  $u_{m\times 1}(t)$  – вектор управляющих сигналов, подавае-мых на актуаторы;  $\Theta_{m\times n}^{s}$ ,  $\Theta_{n\times m}^{a}$  – матрицы влияния для сенсоров и для актуаторов (они показывают, насколько интенсивно каждый сенсор реагирует на каждую из форм колебаний, а каждый актуатор возбуждает каждую из форм).

В задачах, рассматриваемых в статье, сенсоры и актуаторы расположены согласованно: парами сенсор-актуатор по обеим сторонам балки. Это означает, что матрицы влияния также взаимосвязаны:

$$\Theta_{n\times m}^{a} = k^{as} \left( \Theta_{m\times n}^{s} \right)^{I} = \Theta, \tag{5}$$

где  $k^{as}$  — скалярный коэффициент, зависящий от физических и геометрических параметров сенсоров и актуаторов.

Числовые значения элементов матриц влияния зависят от того, как актуаторы и сенсоры расположены на объекте управления. Существуют критерии, позволяющие оптимизировать места установки данных элементов – эти критерии формулируются как раз для матрицы  $\Theta$ . Например, в статьях [6, 17] предлагается максимизировать минимальное сингулярное число матрицы  $\Theta$ , или же минимальное собственное число матрицы  $\Theta^T \Theta$ , что по сути означает то же самое.

В настоящем исследовании пьезоэлементы размещаются на балке таким образом, чтобы максимизировать их влияние на первую и вторую собственные формы колебаний балки, поскольку задача управления состоит в гашении колебаний именно по двум низшим формам.

Наконец, мы подошли к определению модальных фильтров. Модальные фильтры – это матрицы, задающие линейные преобразования измеренных и управляющих сигналов и обеспечивающие соответствие каждого контура управления определенной форме колебаний объекта.

Будем считать, что управление ведется по k формам. За обработку измеренных сигналов отвечает матрица *T* – анализатор форм:

$$\hat{q}_{k\times 1} = T_{k\times m} \mathcal{Y}_{m\times 1},\tag{6}$$

где  $\hat{q}_{k\times 1}(t)$  – вектор оценок *k* низших обобщенных координат  $q_i(t)$ . Управляющие воздействия задаются в соответствии с матрицей *F* – синтезатором форм:

$$u_{m\times 1} = F_{m\times k} \bar{Q}_{k\times 1},\tag{7}$$

где  $\hat{Q}_{k\times 1}(t)$  — вектор желаемых управляющих воздействий на k низших собственных форм. Поскольку мы рассматриваем именно модальное управление, вектор желаемых воздействий зависит от вектора оценок обобщенных координат следующим образом:

$$\hat{Q}_{k\times 1} = -R_{k\times k}\hat{q}_{k\times 1},\tag{8}$$

где  $R_{k \times k}$  — диагональная матрица коэффициентов усиления.

Элементы данной матрицы в общем случае задают законы управления в каждом контуре, поэтому их можно записать как функции комплексной переменной s:

$$R_{ii} = R_i(s). \tag{9}$$

Очевидно, что в простейшем случае k = m = n матрицы *T* и *F* должны определяться следующим образом:

$$T = \left(\Theta^{s}\right)^{-1}, F = \left(\Theta^{a}\right)^{-1}.$$
(10)

Это будет означать выполнение равенств

$$\hat{q} = q, Q^c = Q.$$

Однако обычно при управлении распределенными системами число форм n, которые необходимо учитывать, превышает число сенсоров и актуаторов m, а число форм k, по которым ведется управление, также может отличаться от данных чисел.

В таком случае можно представить матрицы влияния в следующем виде:

$$\Theta_{m \times n}^{s} = \begin{bmatrix} \overline{\Theta}_{m \times k}^{s} & \widetilde{\Theta}_{m \times (n-k)}^{s} \end{bmatrix}, \Theta_{n \times m}^{a} = \begin{bmatrix} \overline{\Theta}_{k \times m}^{a} \\ \widetilde{\Theta}_{(n-k) \times m}^{a} \end{bmatrix},$$
(11)

а анализатор и синтезатор форм при этом будут определяться как псевдообратные соответствующим компонентам матриц влияния:

$$T_{k\times m} = \left(\overline{\Theta}_{m\times k}^{s}\right)^{+}, F_{m\times k} = \left(\overline{\Theta}_{k\times m}^{a}\right)^{+}.$$
(12)

Именно такой метод определения модальных фильтров использован в данной работе. Например, в случае управления по двум низшим формам колебаний с помощью двух пар сенсор-актуатор (k = m = 2), описанный метод гарантирует, что первая форма колебаний не возбуждается и не воздействует на первый контур управления, а вторая — на второй контур.

Однако более высокие формы колебаний будут как возбуждаться, так и воздействовать на оба контура управления. Это явление носит название спилловер-эффекта (перетекание энергии на высшие формы) и является основным препятствием, ограничивающим эффективность модального управления.

Необходимо отметить, что ранее авторами был предложен алгоритм, получивший название метода экспериментальной идентификации [19]: он позволяет экспериментально реализовать описанный способ определения модальных фильтров.

Между тем существуют и другие способы задания матриц T и F. Первый из них [20] близок к уже рассмотренному:

$$\left(\Theta_{m\times n}^{s}\right)^{+} = \begin{bmatrix} T_{k\times m} \\ \tilde{T}_{(n-k)\times m} \end{bmatrix}, \left(\Theta_{n\times m}^{a}\right)^{+} = \begin{bmatrix} F_{m\times k} & \tilde{F}_{m\times(n-k)} \end{bmatrix}.$$
(13)

Можно также определять анализатор форм T через аппроксимацию функции смещения точек балки w(x, t), применяя значения смещения, измеренные сенсорами [20] (при использовании пьезопластин, измеряющих и воздействующих на кривизну балки, правильнее аппроксимировать функцию кривизны w''(x, t)); аналогично можно определять и синтезатор форм F.

Предложенный метод можно приближенно описывать следующими формулами:

$$T_{k\times m} = M^{s}_{k\times k} \left(\overline{\Theta}^{s}_{m\times k}\right)^{T}, F_{m\times k} = \left(\overline{\Theta}^{a}_{k\times m}\right)^{T} M^{a}_{k\times k},$$
(14)

где  $M_{k\times k}^s$ ,  $M_{k\times k}^a$  – некоторые диагональные матрицы, элементы которых задают степень возбуждения и реагирования системы управления на отдельные формы.

При увеличении числа сенсоров и актуаторов (если они стремятся покрыть всю поверхность объекта управления) рассмотренные методы приводят к одинаковым результатам, поскольку собственные формы колебаний упругого тела ортогональны.

К достоинствам метода модальных фильтров следует отнести простоту его реализации, а также отсутствие явления дестабилизации высших форм колебаний объекта вследствие спилловер-эффекта, в случае использования достаточно большого числа сенсоров и актуаторов [20]. Но при малом числе сенсоров и актуаторов указанный эффект в такой системе все же опасен и может вызывать неустойчивость высших форм.

Метод наблюдателей. Для описания метода необходимо представить систему (2) в пространстве состояний:

$$\dot{q}^n = Aq^n + Bu + Dd, \tag{15}$$

где  $q^n$  — вектор состояния системы, связанный с вектором обобщенных координат из (2) следующим образом:

$$q^{n} = \begin{pmatrix} q_{1} & \dots & q_{n} & \dot{q}_{1} & \dots & \dot{q}_{n} \end{pmatrix}^{i};$$
(16)

d – вектор внешних воздействий длиной  $\overline{m}$ , а матрица D имеет вид

$$D = \begin{bmatrix} 0_{n \times \overline{m}} \\ \tilde{D}_{n \times \overline{m}} \end{bmatrix}, \tag{17}$$

так что выполняется следующее равенство:

$$\tilde{D}_{n\times\bar{m}}d_{\bar{m}\times 1} = Q_{n\times 1}^d.$$
(18)

Остальные матрицы, использованные в уравнении (15), также можно выразить через матрицы из уравнений (2) и (4):

$$A = \begin{bmatrix} 0_{n \times n} & I_{n \times n} \\ -\Omega_{n \times n}^2 & -2\xi\Omega_{n \times n} \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} 0_{n \times m} \\ \Theta_{n \times m}^a \end{bmatrix},$$
(19)

где 0<sub>*n×n*</sub> и 0<sub>*n×m*</sub> – матрицы, состоящие из нулей; *I*<sub>*n×n*</sub> – единичная матрица. Аналогичным образом записывается уравнение для сигналов сенсоров:

$$y = Cq^{n} = \begin{bmatrix} \Theta_{m \times n}^{s} & 0_{m \times n} \end{bmatrix} q^{n}.$$
 (20)

Для того чтобы сформулировать законы работы наблюдателей, перепишем уравнения (15) и (20), разделив систему на две части. При этом будем считать, что наблюдение осуществляется по тем же k низшим формам колебаний, по которым ведется управление (k < n):

$$\dot{q}^{k} = A^{(1)}q^{k} + B^{(1)}u + D^{(1)}d, \qquad (21)$$

$$\dot{q}^{n-k} = A^{(2)}q^{n-k} + B^{(2)}u + D^{(2)}d, \qquad (22)$$

$$y = C^{(1)}q^k + C^{(2)}q^{n-k}.$$
(23)

Здесь вместо одного вектора состояния появляется два:

$$q^{k} = \begin{pmatrix} q_{1} & \dots & q_{k} & \dot{q}_{1} & \dots & \dot{q}_{k} \end{pmatrix}^{T}, \qquad (24)$$

$$q^{n-k} = (q_{k+1} \dots q_n \dot{q}_{k+1} \dots \dot{q}_n)^t,$$
 (25)

и соответствующим образом на две части разделятся матрицы из уравнений (15) и (20). Далее сформулируем закон работы наблюдателей в предположении, что матрицы  $A^{(1)}, B^{(1)},$  $C^{(1)}$  известны:

$$\dot{\hat{q}} = A^{(1)}\hat{q} + B^{(1)}u + L\left(y - C^{(1)}\hat{q}\right).$$
(26)

Здесь  $\hat{q}_{2k imes l}$  — оценка вектора состояния  $q^k$ , или вектор оценок k первых обобщенных координат и скоростей.

Предположим, что закон управления задан по аналогии с уравнениями (7), (8) с постоянной матрицей управления *R*:

$$u_{m\times 1} = F_{m\times k}\hat{Q}_{k\times 1} = -F_{m\times k}R_{k\times 2k}\hat{q}_{2k\times 1}.$$
(27)

Заметим, что здесь, в отличие от формулы (8), матрица R является не квадратной, а прямоугольной (размер  $k \times 2k$ ), поскольку вектор  $\hat{q}$  содержит оценки не только обобщенных координат, но и скоростей.

Для записи общего уравнения для всей замкнутой системы введем вектор ошибок наблюдения  $e_{2k\times 1}$  и перепишем уравнения (21), (22), (26) и (27):

$$e = \hat{q} - q^k, \tag{28}$$

$$u = -FR(q^k + e), \tag{29}$$

$$\dot{q}^{k} = \left(A^{(1)} - B^{(1)}FR\right)q^{k} - B^{(1)}FRe + D^{(1)}d, \qquad (30)$$

$$\dot{q}^{n-k} = A^{(2)}q^{n-k} - B^{(2)}FR(q^k + e) + D^{(2)}d, \qquad (31)$$

$$\dot{e} = \left(A^{(1)} - LC^{(1)}\right)e + LC^{(2)}q^{n-k} - D^{(1)}d.$$
(32)

Таким образом, уравнение всей системы можно записать в следующем виде:

$$\dot{\overline{q}} = \overline{A}\overline{q} + \overline{D}d, \tag{33}$$

где введены следующие обозначения:

$$\overline{q} = \begin{pmatrix} q^k & q^{n-k} & e \end{pmatrix}^T,$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}^{(1)} & \mathbf{P}^{(1)} \mathbf{E} \mathbf{P} & \mathbf{0} \\ \mathbf{P}^{(1)} \mathbf{E} \mathbf{P} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$$
(34)

$$\overline{A} = \begin{bmatrix} A^{(1)} - B^{(1)}FR & 0_{2k\times2(n-k)} & -B^{(1)}FR \\ -B^{(2)}FR & A^{(2)} & -B^{(2)}FR \\ 0_{2k\times2k} & LC^{(2)} & A^{(1)} - LC^{(1)} \end{bmatrix},$$

$$\overline{D} = \begin{bmatrix} D^{(1)} \\ D^{(2)} \\ -D^{(1)} \end{bmatrix}.$$
(35)

Можно заметить, <u>ч</u>то в случае, если k = n, вторая строка и второй столбец матрицы замкнутой системы A исчезают и полюса системы задаются двумя матрицами:

$$\overline{A}_{11} = A^{(1)} - B^{(1)}FR$$
 и  $\overline{A}_{33} = A^{(1)} - LC^{(1)}$ .

Таким образом, задачи наблюдения и управления разделяются, и можно независимо синтезировать матрицы L и R, исходя из требуемых свойств замкнутой системы. Наличие же высших неуправляемых форм (при k < n) сразу же усложняет задачу: появляется уже упомянутый ранее спилловер-эффект. Можно выделить у этого эффекта две части: первая – ошибка наблюдения (observation spillover), которая возникает из-за активизации высших форм, за нее отвечает компонент матрицы  $\overline{A}_{32} = LC^{(2)}$ ; вторая – ошибка управления (control spillover), т. е. возбуждение системой управления высших форм, она выражается компонентами матрицы

$$\overline{A}_{21} = \overline{A}_{23} = -B^{(2)}FR.$$

Спилловер-эффект мешает работе системы управления и ограничивает ее эффективность, в том числе он способен привести к дестабилизации замкнутой системы.

Очевидно, что если динамика системы с управлением описывается уравнением (33) с матрицей (35), то данное описание позволяет явно находить решение во временной или частотной области, а также анализировать устойчивость системы по собственным числам

матрицы  $\overline{A}$ . Однако такой способ годится только в том случае, когда матрица управления R постоянна, т. е. ее компоненты не зависят от комплексной переменной s. В реальных же условиях, в отличие от теоретических моделей, в контуре управления всегда есть запаздывание, которое можно описать как раз заданием зависимости R(s). Также в контуре управления могут присутствовать дополнительные элементы, такие как фильтры нижних частот и усилители, имеющие свои амплитудно- и фазочастотные характеристики, что также влияет на передаточные функции (ПФ) в контурах управления.

В таком случае для вычисления динамического отклика системы при использовании наблюдателей можно применять следующие формулы для отображений Лапласа переменных, введенных ранее:

$$\hat{q}(s) = \left(sI_{2k} - A^{(1)} + LC^{(1)} + B^{(1)}FR(s)\right)^{-1}Ly(s),$$
(37)

$$u(s) = -FR(s)\hat{q}(s) = -K(s)y(s), \qquad (38)$$

$$K(s) = FR(s) \left( sI_{2k} - A^{(1)} + LC^{(1)} + B^{(1)}FR(s) \right)^{-1} L,$$
(39)

$$q(s) = (sI_{2n} - A + BK(s)C)^{-1} Dd(s).$$
(40)

В настоящей работе в моделях объекта, используемых в наблюдателях, матрица R считается постоянной. Это допущение необходимо, в том числе, для возможности анализа устойчивости наблюдения по матрице  $A_{abc}$ :

$$A_{obs} = A^{(1)} - LC^{(1)} - B^{(1)}FR.$$
(41)

Таким образом, в работе наблюдателя не учитываются перечисленные дополнительные эффекты, влияющие на передачу сигнала в контурах управления, в то время как в общей модели системы эти эффекты учтены. Одна из задач настоящего исследования как раз и состоит в том, чтобы проанализировать, как указанные эффекты влияют на эффективность управления с наблюдателями.

Рассмотрим подробнее структуру матрицы наблюдения *L* и матрицы управления *R*. Поскольку мы используем модальный подход, эти матрицы должны обеспечивать раздельное управление различными формами колебаний объекта. Для этого зададим матрицы следующим образом:

$$L_{2k\times k} = \begin{bmatrix} K_{k\times k}^{L} \\ K_{k\times k}^{Ld} \end{bmatrix} T_{k\times m}, R_{k\times 2k} = \begin{bmatrix} K_{k\times k}^{R} & K_{k\times k}^{Rd} \end{bmatrix},$$
(42)

где  $T_{k\times pld}$  – анализатор форм;  $K_{k\times k}^{L}, K_{k\times k}^{Ld}, K_{k\times k}^{R}, K_{k\times k}^{Rd}$  – диагональные матрицы с элементами  $K_{i}^{L}, K_{i}^{R}, K_{i}^{R}$  и  $K_{i}^{Rd}$ , i = 1, 2, ..., k. Элементы  $K_{i}^{R}$  и  $K_{i}^{Rd}$  показывают, как управляющее воздействие на *i*-ю форму зависит от оценок *i*-й обобщенной координаты и скорости; элементы  $K_{i}^{L}$  и  $K_{i}^{Ld}$  отражают

Элементы  $K_i^{L}$  и  $K_i^{Ra}$  показывают, как управляющее воздействие на *i*-ю форму зависит от оценок *i*-й обобщенной координаты и скорости; элементы  $K_i^{L}$  и  $K_i^{Ld}$  отражают влияние ошибки оценивания *i*-й обобщенной координаты на динамику оценок *i*-й обобщенной координаты и скорости. Указанная ошибка получена из ошибок определения измеряемых сигналов  $\hat{y} - y$  с помощью линейного преобразования, заданного матрицей *T*.

Стоит отметить, что в наблюдении и управлении участвуют матрицы, введенные ранее при рассмотрении метода модальных фильтров. Это матрица-анализатор и матрицасинтезатор форм T и F (см. уравнения (27) и (42)). Они осуществляют ту же самую функцию — разделение форм колебаний объекта в системе управления; их можно определить теми же способами, которые изложены в разделе «Метод модальных фильтров».

Подводя итог, необходимо отметить, что метод наблюдателей более сложен в применении, чем метод модальных фильтров, и можно ожидать, что он обеспечит более точную оценку обобщенных координат, поскольку для решения данной задачи метод наблюдателей предполагает использование модели объекта управления. Более того, метод наблюдателей в целях повышения эффективности можно дополнительно усложнить за счет расширения вектора оцениваемых переменных или использования распределенных наблюдателей, а также нелинейных методов управления [21 - 24].

#### Шарнирно-опертая балка

Первая часть исследования посвящена созданию модальных СУ для гашения колебаний шарнирно-опертой балки. Для системы, рассмотренной в данном разделе, задача синтеза СУ с помощью модальных фильтров решена в статье [25] одного из авторов настоящего исследования.

Итак, рассматривается шарнирно-опертая алюминиевая балка сечением  $3 \times 35$  мм и длиной 1 м, совершающая изгибные колебания в плоскости *xz* (рис. 1).



Рис. 1. Схематичное изображение шарнирно-опертой балки с сенсорами и актуаторами; *l* – длина балки, *M*<sub>0</sub> – внешний изгибающий момент

К балке в сечении с координатой  $x_0 = 0,4$  м приложено внешнее гармоническое возмущающее воздействие — изгибающий момент величиной  $M_0 = 0,1$  Н·м. Система управления включает в себя два сенсора и два актуатора, представляющих собой тонкие прямоугольные пьезоэлектрические пластинки размером  $50 \times 30$  мм, покрытые электродами и приклеенные к балке парами сенсор-актуатор на двух участках.

Задача системы управления состоит в том, чтобы погасить вынужденные изгибные колебания балки в диапазоне частот, включающем две низшие резонансные частоты колебаний. В численной модели балки учитывается n = 33 низших формы колебаний.

В соответствии с целью управления выбираются координаты сенсоров и актуаторов на балке: они расположены симметрично относительно середины балки таким образом, чтобы эффективно реагировать и воздействовать на первую и вторую формы изгибных колебаний. Для этого было принято решение разместить их равномерно, на расстояниях l/3 = 0,333 м от концов балки.

Рассмотрим этапы синтеза модальной СУ методом модальных фильтров. Сперва необходимо задать эти модальные фильтры, т. е. матрицы T и F (анализатор и синтезатор форм). Они заданы через обращение компонент матриц влияния, в соответствии с формулой (12) для простейшего случая k = m = 2; результат приведен в статье [25]. Следующий этап — задание законов управления для каждого контура. На этом этапе варьировались коэффициенты ПФ в контурах управления с помощью процедуры оптимизации [3, 26] и определялись наиболее эффективные из них. При этом отслеживалось условие устойчивости замкнутой системы с помощью критерия Найквиста для случая двух контуров управления [2].

Синтез модальной системы управления с наблюдателями состоял из аналогичных этапов. Во-первых, необходимо было задать матрицы T и F – они были заданы точно таким же образом. Во-вторых, следовало задать матрицы наблюдения L и управления R: их структура выбиралась в соответствии с формулой (42), поэтому оставалось определить только диагональные элементы матриц  $K_{2\times2}^{L}, K_{2\times2}^{Ld}, K_{2\times2}^{R}$  и  $K_{2\times2}^{Rd}$ , для чего опять же использовалась упомянутая выше процедура оптимизации.

Заметим, что для первой задачи — синтеза СУ методом модальных фильтров — в контурах управления учитывались особенности эксперимента, т. е. запаздывание по фазе и снижение амплитуды сигнала на высших частотах. Эти явления моделируются следующим звеном ПФ:

$$R^{del}(s) = \frac{1}{1+0,0005s}.$$
(43)

Данное звено входило в общие ПФ контуров управления, полученные методом оптимизации.

Вторая задача — синтез СУ с использованием наблюдателей — решается в двух вариантах: с учетом и без учета запаздывания (43). В случае, когда запаздывание не учитывается, замкнутая система допускает описание (33) с матрицей (35), в то время как при учете запаздывания задача описания системы становится более сложной, и для этого используются уравнения (37) — (40). При этом в модели системы, используемой в наблюдателе, матрица R, как было отмечено ранее, считается постоянной.

ПФ в контурах управления для метода модальных фильтров приведены в работе [25]. Далее приводятся оптимальные параметры СУ для метода наблюдателей. Для случая, когда запаздывание не учитывается, параметры имеют вид

$$\begin{cases} K^{L} = \operatorname{diag} \{0,75 \quad 3,60\}, K^{Ld} = \operatorname{diag} \{-155 \quad -2650\}, \\ K^{R} = 0_{2\times 2}, K^{Rd} = \operatorname{diag} \{195 \quad 640\}. \end{cases}$$
(44)

Если запаздывание учитывается, то

$$\begin{cases} K^{L} = \operatorname{diag} \{0,015 \quad 2,000\}, K^{Ld} = \operatorname{diag} \{-163 \quad -2600\}, \\ K^{R} = 0_{2\times 2}, K^{Rd} = \operatorname{diag} \{3600 \quad 1120\}. \end{cases}$$
(45)

Перейдем к сравнению результатов, полученных для различных систем управления. На рис. 2 представлены амплитудно-частотные характеристики замкнутой системы с различными вариантами управления, в диапазоне частот от 0 до 40 Гц.

В качестве контролируемой величины используется интенсивность колебаний балки *Е* в установившемся режиме, определяемая следующим образом:

$$E = \sqrt{\frac{1}{l}} \int_{0}^{l} |w(x,t)|^{2} dx.$$
(46)



Рис. 2. Амплитудно-частотная характеристика шарнирно-опертой балки без управления (кривая *I*), с управлением методом модальных фильтров (*2*) и методом наблюдателей без учета (*3*) и с учетом (*4*) запаздывания в контуре управления

Результаты гашения вынужденных колебаний на первом (I) и втором (II) резонансах для различных систем управления представлены в табл. 1.

# Таблица 1

Система управления	Снижение амплитуды, дБ, на резонансе		
	I $(\Delta E_1)$	II $(\Delta E_2)$	
С модальными фильтрами	-15,9	-16,2	
С наблюдателями:			
без учета запаздывания	-26,0	-25,1	
с его учетом	-32,6	-24,1	

### Снижение резонансных амплитуд колебаний шарнирно-опертой балки для различных систем управления

Анализ данных на рис. 2 и в табл. 1 приводит к заключению, что метод наблюдателей (кривые 3, 4) значительно эффективнее, чем метод модальных фильтров (кривая 2). При этом учет запаздывания в контуре управления оказывает существенное влияние на результат: если вблизи второго резонанса это влияние оказывается небольшим, то на первом оно приводит к сильному изменению амплитуды колебаний, повышая эффективность управления.

#### Упругозащемленная балка

Вторая часть исследования посвящена созданию модальных систем управления колебаниями другой упругой системы — балки, упруго защемленной в промежуточном сечении. Это численное исследование логически продолжает эксперимент, проведенный авторами ранее [1].

Постановка задачи повторяет использованную в эксперименте. Схема установки показана на рис. 3. Алюминиевая балка 1 сечением  $3 \times 35$  мм и длиной 70 см расположена вертикально и закреплена в одной точке на расстоянии 10 см от нижнего конца. В конструкцию закрепления, соединяющую балку с неподвижным основанием 3, входит пьезоэлектрический стержень-толкатель 2, продольные колебания которого вызывают вибрацию опоры, выступающую в роли внешнего возбуждения.

В состав системы управления входят две пары сенсор-актуатор (4 – сенсоры, 5 – актуаторы), такие же, как в задаче, рассмотренной в разделе «Шарнирно-опертая балка».

Цель системы управления, как и ранее, — гашение изгибных колебаний балки на первом (I) и втором (II) резонансах. Расположение сенсоров и актуаторов на балке выбрано в соответствии с указанной целью [1].

Рис. 3. Схема экспериментальной установки:

1 – алюминиевая балка; 2 – пьезоэлектрический стержень-толкатель;
 3 – неподвижное основание; 4 – сенсоры; 5 – актуаторы;
 6 – дискретный контроллер; 7 – фильтры нижних частот; 8 – усилители

Помимо дискретного контроллера *6*, преобразующего измеренные сигналы в управляющие, в цепь управления входят дополнительные элементы — фильтры нижних частот 7 и усилители 8. Фильтры сглаживают высокочастотные составляющие сигнала, возникающие из-за его дискретизации в контроллере, и в целом повышают устойчивость замкнутой системы; усилители увеличивают амплитуду управляющего сигнала перед подачей на актуаторы в 25 раз. Кроме этого, необходимо также учитывать изменения сигнала в цепи управления, возникающие из-за релаксации заряда пьезосенсоров при измерении напряжения на них и проявляющееся на низких частотах. Этот эффект был обнаружен экспериментально и затем учтен при моделировании.

На рис. 4 показаны логарифмические амплитудные и фазовые частотные характеристики фильтров, усилителей и пьезосенсоров, поскольку все они влияют на передачу сигнала в цепи управления, а значит, их необходимо учитывать в модели системы.



Рис. 4. Амплитудно-частотные (a, c, e) и фазочастотные (b, d, f) характеристики элементов цепи управления, влияющих на передачу сигнала: фильтров нижних частот (a, b), усилителей (c, d) и пьезосенсоров (e, f)

Численное моделирование замкнутой системы осуществляется в несколько этапов.

Во-первых, создается трехмерная модель балки с пьезоэлементами и конструкцией закрепления в пакете ANSYS, гармонический анализ которой позволяет получать различные амплитудно- и фазочастотные характеристики объекта. В настоящем исследовании используется конечно-элементная (КЭ) модель, содержащая 3 534 элемента и 21 088 узлов; коэффициент демпфирования в такой модели принят одинаковым для всех форм:  $\xi = 0,002$ .

Более подробно КЭ-модель описана в работах [2, 26]; там же приведено сравнение результатов КЭ-расчетов и эксперимента, показавшее высокую точность используемой модели.

На втором этапе моделирования для каждого варианта тестируемой системы управления задаются ее параметры и определяются амплитудно- и фазочастотные характеристики, после чего в результате комбинирования полученных характеристик [2] вычисляются частотные характеристики замкнутой системы. Для определения эффективности управления анализируется амплитуда колебаний точки на верхнем конце балки.

Результаты работы систем управления, синтезированных ранее с помощью процедуры оптимизации и основанных на методе модальных фильтров, приведены в работах [3, 26]. При создании СУ методом наблюдателей было принято решение управлять не по двум,

а по трем низшим формам (k = 3), при этом количество сенсоров и актуаторов и их расположение на балке остаются такими же, как и для метода модальных фильтров (m = 2). Это можно считать неоспоримым достоинством метода наблюдателей: модель системы в контуре наблюдения может быть сколь угодно сложной, даже при малом числе используемых сенсоров и актуаторов. В методе же модальных фильтров это число накладывает ограничение на количество форм колебаний, управляемых независимо:  $k \le m$ .

Для СУ с наблюдателями, матрицы *T* и *F* задавались в соответствии с формулой (12):

$$T = \begin{bmatrix} 0,38 & 0,28\\ -1,32 & 2,84\\ 2,29 & 2,21 \end{bmatrix} \cdot 10^{-6}, F = \begin{bmatrix} 8,16 & -28,48 & 49,17\\ 6,06 & 61,12 & 47,54 \end{bmatrix}.$$
 (47)

Матрицы наблюдения *L* и управления *R*, полученные с помощью процедуры оптимизации, имеют следующую структуру (с учетом вида обеих матриц (42)):

$$\begin{cases} K^{L} = \operatorname{diag} \{90 \quad 5,08 \quad -2\}, K^{Ld} = \operatorname{diag} \{-4280 \quad -4920 \quad -4660\}, \\ K^{R} = 0_{3\times 3}, K^{Rd} = \operatorname{diag} \{9800 \quad 610 \quad 3600\}. \end{cases}$$
(48)

На рис. 5 представлены результаты гашения колебаний балки с помощью различных систем управления, а именно — амплитудно-частотные характеристики замкнутой системы, где в качестве отслеживаемой величины выступает амплитуда колебаний точки на верхнем конце балки, в диапазоне частот от 0 до 300 Гц.



Рис. 5. Амплитудно-частотные характеристики упругозащемленной балки без использования системы управления (кривая *I*), а также с управлением, основанном на методах модальных фильтров (2) и наблюдателей (3)

В табл. 2 приведены результаты гашения вынужденных колебаний балки для различных систем управления на резонансах с первого (I) по пятый (V). Следует отметить, что в задачу первой СУ входило управление только по двум низшим формам, а второй — по трем, однако, как оказалось, данные системы могут работать и на более высоких резонансах.

Из данных на рис. 5 и в табл. 2 видно, что метод наблюдателей, как и в случае шарнирно-опертой балки, оказывается эффективнее метода модальных фильтров: он приводит к большему снижению амплитуды вынужденных колебаний балки не только на первом (I) и втором (II), но также и на нескольких последующих резонансах.

Таблица 2

Система управления	Снижение амплитуды, дБ, на резонансе					
	$I(\Delta y_1)$	II $(\Delta y_2)$	III $(\Delta y_3)$	IV $(\Delta y_4)$	$V(\Delta y_5)$	
С модальными фильтрами	-31,96	-31,06	+11,42	-8,73	-14,72	
С наблюдателями	-36,50	-36,52	-22,85	-15,94	-24,51	

# Снижение резонансных амплитуд колебаний упругозащемленной балки для различных систем управления

### Заключение

В работе было проведено численное сравнение двух методов реализации модального управления колебаниями распределенных систем: метода модальных фильтров и метода наблюдателей. Показано, что второй метод позволяет создать более эффективные системы управления, чем первый, приводящие к большему снижению амплитуд вынужденных колебаний объекта на большем числе резонансных частот. При этом важным преимуществом метода наблюдателей является простота синтеза управления: вместо задания громоздких передаточных функций можно обойтись оптимизацией элементов нескольких диагональных матриц.

Кроме того, было исследовано влияние запаздывания в контуре управления, возникающего в реальных системах, в том числе ввиду наличия в цепи управления дополнительных элементов (таких как фильтры и усилители), на результат синтеза модальной системы управления с наблюдателями. Было показано, что такое влияние существенно, поэтому в численных моделях необходимо учитывать данные эффекты.

Для дальнейшего численного исследования интересными представляются несколько направлений: поиск оптимального способа задания матриц — синтезатора и анализатора форм, модификация наблюдателя путем расширения вектора наблюдений, а также использование нелинейных законов наблюдения и управления. Перспективной видится также задача экспериментального подтверждения результатов сравнения эффективности различных методов реализации модального управления, полученных в статье теоретическими методами.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Belyaev A. K., Fedotov A. V., Irschik H., Nader M., Polyanskiy V. A., Smirnova N. A. Experimental study of local and modal approaches to active vibration control of elastic systems // Structural Control and Health Monitoring. 2018. Vol. 25. No. 8. P. e2105.

2. **Федотов А. В.** Численное моделирование гашения колебаний распределенной системы с помощью пьезоэлементов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 1. С. 142–155.

3. Fedotov A. V., Belyaev A. K., Polyanskiy V. A., Smirnova N. A. Local, modal and shape control strategies for active vibration suppression of elastic systems: experiment and numerical simulation // V. A. Polyanskiy, A. K. Belyaev (Eds.). Mechanics and Control of Solids and Structures (Book Series: Advanced Structured Materials. Vol. 164). Cham, Switzerland: Springer, 2022. Pp. 151–169.

4. Meirovitch L., Baruh H. On the problem of observation spillover in self-adjoint distributedparameter systems // Journal of Optimization Theory and Applications. 1983. Vol. 30. No. 2. Pp. 269–291.

5. Lu J., Wang P., Zhan Z. Active vibration control of thin-plate structures with partial SCLD treatment // Mechanical Systems and Signal Processing. 2017. Vol. 84. Part A. Pp. 531–550.

6. Sun D., Wu H., Zhang H., Li Y. Vibration control of flexible plates using piezoelectric patches // IFAC Proceedings Volumes. 1999. Vol. 32. No. 2. Pp. 8078–8083.  Gould L. A., Murray-Lasso M. A. On the modal control of distributed parameter systems with distributed feedback // IEEE Transactions on Automatic Control. 1966. Vol. 11. No. 4. Pp. 729–737.
 8. Porter B., Crossley T. R. Modal control. London: Taylor and Francis, 1972. 246 p.

9. Meirovitch L. Dynamics and control of structures. New York: John Wiley & Sons, 1990. 425 p.

10. Pusch M., Ossmann D., Luspay T. Structured control design for a highly flexible flutter demonstrator // Aerospace. 2019. Vol. 6. No. 3. Pp. 27–46.

11. Carvalhal R., Silva S., Lopes V. Modal control applications in intelligent truss structures // ABCM Symposium Series in Mechatronics. 2004. Vol. 1. January. Pp. 304–310.

12. Chomette B., Chesne S., Remond D., Gaudiller L. Damage reduction of on-board structures using piezoelectric components and active modal control – application to a printed circuit board // Mechanical Systems and Signal Processing. 2010. Vol. 24. No. 2. Pp. 352–364.

13. Lee C.-K., Moon F. C. Modal sensors/actuators // Journal of Applied Mechanics. 1990. Vol. 57. No. 2. Pp. 434–441.

14. **Donoso A., Bellido J. C.** Systematic design of distributed piezoelectric modal sensors/actuators for rectangular plates by optimizing the polarization profile // Structural and Multidisciplinary Optimization. 2009. Vol. 38. No. 4. Pp. 347–356.

15. Peukert C., Pöhlmann P., Merx M., Müller J., Ihlenfeldt S. Investigation of local and modal based active vibration control strategies on the example of an elastic system // Journal of Machine Engineering. 2019. Vol. 19. No. 2. Pp. 32–45.

16. Zenz G., Berger W., Gerstmayr J., Nader M., Krommer M. Design of piezoelectric transducer arrays for passive and active modal control of thin plates // Smart Structures and Systems. 2013. Vol. 12. No. 5. Pp. 547–577.

17. Guo X., Jiang J. Optimization of actuator placement in a truss-cored sandwich plate with independent modal space control // Smart Materials and Structures. 2011. Vol. 20. No. 11. 115011.

18. Sharma M., Singh S. P., Sachdeva B. L. Modal control of a plate using a fuzzy logic controller // Smart Materials and Structures. 2007. Vol. 16. No. 4. Pp. 1331–1341.

19. Беляев А. К., Полянский В. А., Смирнова Н. А., Федотов А. В. Процедура идентификации при модальном управлении распределенным упругим объектом // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 2. С. 69–81.

20. Meirovitch L., Baruh H. The implementation of modal filters for control of structures // Journal of Guidance, Control, and Dynamics. 1985. Vol. 8. No. 6. Pp. 707–716.

21. **Bagordo G., Cazzulani G., Resta F., Ripamonti F.** A modal disturbance estimator for vibration suppression in nonlinear flexible structures // Journal of Sound and Vibration. 2011. Vol. 330. No. 25. Pp. 6061–6069.

22. Li S., Zhao R., Li J., Mo Y. Piezoelectric multi-modal vibration control for all-clamped stiffened plate using multi-loop active disturbance rejection method // Proceedings of the 32nd Chinese Control Conference, 26–28 July, 2013, Xi'an, China. IEEE, 2013. Pp. 5351–5356.

23. Liu Y., Fu Y., He W., Hui Q. Modeling and observer-based vibration control of a flexible spacecraft with external disturbances // IEEE Transactions on Industrial Electronics. 2018. Vol. 66. No. 11. Pp. 8648–8658.

24. Nekhoroshikh A. N., Efimov D., Polyakov A., Perruquetti W., Furtat I. B. On simple design of a robust finite-time observer // Proceedings of the 61st Conference on Decision and Control (CDC-2022), December 6–9, 2022. Cancun, Mexico. IEEE, 2022. Pp. 4746–4751.

25. **Федотов А. В.** Применимость упрощенных моделей пьезоэлементов в задаче активного гашения колебаний // Известия высших учебных заведений. Приборостроение. 2020. Т. 63. № 2. С. 126–132.

26. Fedotov A. V. Active vibration suppression of Bernoulli – Euler beam: experiment and numerical simulation // Cybernetics and Physics. 2019. Vol. 8. No. 4. Pp. 228–234.

### REFERENCES

1. Belyaev A. K., Fedotov A. V., Irschik H., et al., Experimental study of local and modal approaches to active vibration control of elastic systems, Struct. Control Health Monit. 25 (8) (2018) e2105.

2. Fedotov A. V., The damping of the distributed system vibrations using piezoelectric transducers: simulation, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 12 (1) (2019) 142–155 (in Russian).

3. Fedotov A. V., Belyaev A. K., Polyanskiy V. A., Smirnova N. A., Local, modal and shape control strategies for active vibration suppression of elastic systems: experiment and numerical simulation, In book: V. A. Polyanskiy, A. K. Belyaev (Eds.). Mechanics and Control of Solids and Structures (Book Series: Advanced Structured Materials. Vol. 164). Springer, Cham, Switzerland (2022) 151–169.

4. Meirovitch L., Baruh H., On the problem of observation spillover in self-adjoint distributed-parameter systems, J. Optim. Theory Appl. 30 (2) (1983) 269–291.

5. Lu J., Wang P., Zhan Z., Active vibration control of thin-plate structures with partial SCLD treatment, Mech. Syst. Signal Process. 84 (A) (2017) 531–550.

6. Sun D., Wu H., Zhang H., Li Y., Vibration control of flexible plates using piezoelectric patches, IFAC Proc. Vols. 32 (2) (1999) 8078–8083.

7. Gould L. A., Murray-Lasso M. A., On the modal control of distributed parameter systems with distributed feedback, IEEE Trans. Automat. 11 (4) (1966) 729–737.

8. Porter B., Crossley T. R., Modal control, Taylor and Francis, London, 1972.

9. Meirovitch L., Dynamics and control of structures, John Wiley & Sons, New York, 1990.

10. Pusch M., Ossmann D., Luspay T., Structured control design for a highly flexible flutter demonstrator, Aerospace. 6 (3) (2019) 27–46.

11. Carvalhal R., Silva S., Lopes V., Modal control applications in intelligent truss structures, ABCM Symp. Ser. Mechatron. 1 (January) (2004) 304–310.

12. Chomette B., Chesne S., Remond D., Gaudiller L., Damage reduction of on-board structures using piezoelectric components and active modal control – application to a printed circuit board, Mech. Syst. Signal Proc. 24 (2) (2010) 352–364.

13. Lee C.-K., Moon F. C., Modal sensors/actuators, J. Appl. Mech. 57 (2) (1990) 434-441.

14. **Donoso A., Bellido J. C.,** Systematic design of distributed piezoelectric modal sensors/actuators for rectangular plates by optimizing the polarization profile, Struct. Multidisc. Optim. 38 (4) (2009) 347–356.

15. Peukert C., Pöhlmann P., Merx M., et al., Investigation of local and modal based active vibration control strategies on the example of an elastic system, J. Mach. Eng. 19 (2) (2019) 32–45.

16. Zenz G., Berger W., Gerstmayr J., et al., Design of piezoelectric transducer arrays for passive and active modal control of thin plates, Smart Struct. Syst. 12 (5) (2013) 547–577.

17. Guo X., Jiang J., Optimization of actuator placement in a truss-cored sandwich plate with independent modal space control, Smart Mater. Struct. 20 (11) (2011) 115011.

18. Sharma M., Singh S. P., Sachdeva B. L., Modal control of a plate using a fuzzy logic controller, Smart Mater. Struct. 16 (4) (2007) 1331–1341.

19. Belyaev A. K., Polyanskiy V. A., Smirnova N. A., Fedotov A. V., Identification procedure in the modal control of a distributed elastic system, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 10 (2) (2017) 69–81.

20. Meirovitch L., Baruh H., The implementation of modal filters for control of structures, J. Guid. Control. Dynam. 8 (6) (1985) 707–716.

21. **Bagordo G., Cazzulani G., Resta F., Ripamonti F.,** A modal disturbance estimator for vibration suppression in nonlinear flexible structures, J. Sound Vib. 330 (25) (2011) 6061–6069.

22. Li S., Zhao R., Li J., Mo Y., Piezoelectric multi-modal vibration control for all-clamped stiffened plate using multi-loop active disturbance rejection method, Proc. 32nd Chinese Control Conf., 26–28 July, 2013, Xi'an, China, IEEE (2013) 5351–5356.

23. Liu Y., Fu Y., He W., Hui Q., Modeling and observer-based vibration control of a flexible spacecraft with external disturbances, IEEE Trans. Industr. Electron. 66 (11) (2018) 8648–8658.

24. Nekhoroshikh A. N., Efimov D., Polyakov A., et al., On simple design of a robust finite-time observer, Proc. 61st Conf. on Decision and Control (CDC-2022), Dec. 6–9, 2022. Cancun, Mexico, IEEE (2022) 4746–4751.

25. Fedotov A. V., Applicability of simplified models of piezoelectric elements in the problem of active vibration damping, J. Instrum. Eng. 63 (2) (2020) 126–132 (in Russian).

26. Fedotov A. V., Active vibration suppression of Bernoulli – Euler beam: experiment and numerical simulation, Cybern. Phys. 8 (4) (2019) 228–234.

# СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ФЕДОТОВ Александр Васильевич — кандидат технических наук, старший научный сотрудник лаборатории мехатроники Института проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия. 199178, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В. О., 61. alvafed@yandex.ru ORCID: 0000-0001-6028-7566

БЕЛЯЕВ Александр Константинович — член-корреспондент Российской академии наук, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, заведующий лабораторией мехатроники Института проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия.

199178, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В. О., 61. 13augen@mail.ru ORCID: 0000-0002-5934-8138

**ПОЛЯНСКИЙ Владимир Анатольевич** — доктор технических наук, профессор Высшей школы киберфизических систем и управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 vapol@mail.ru ORCID: 0000-0002-1199-1028

# THE AUTHORS

## FEDOTOV Aleksandr V.

Institute for Problems of Mechanical Engineering of RAS 61, Bolshoi Ave. V. Isl., St. Petersburg, 199178, Russia alvafed@yandex.ru ORCID: 0000-0001-6028-7566

# **BELYAEV** Alexander K.

Institute for Problems of Mechanical Engineering of RAS 61, Bolshoi Ave. V. Isl., St. Petersburg, 199178, Russia 13augen@mail.ru ORCID: 0000-0002-5934-8138

# **POLYANSKIY Vladimir A.**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia vapol@mail.ru ORCID: 0000-0002-1199-1028

Статья поступила в редакцию 05.05.2023. Одобрена после рецензирования 29.06.2023. Принята 29.06.2023. Received 05.05.2023. Approved after reviewing 29.06.2023. Accepted 29.06.2023. Научная статья УДК 532.5.032 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16314

# ЗАДАЧА СТОКСА ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО КОНТУРА

# Е. Н. Афанасов<sup>1</sup> <sup>∞</sup>, С. Г. Кадыров<sup>2</sup>, В. В. Певзнер<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ООО «Эволюция морских цифровых технологий», Санкт-Петербург, Россия;

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный морской технический университет,

Санкт-Петербург, Россия

<sup>™</sup> zhenya.afanasov@yandex.ru

Аннотация. В работе рассмотрена задача о малых гармонических колебаниях эллиптического контура, погруженного в несжимаемую вязкую жидкость. Предложены аналитический и асимптотические методы решения этой задачи. Приведено сопоставление результатов, полученных при численной реализации аналитического метода, с результатами асимптотических решений. Показано, что совместное использование предложенных методов позволяет описать решение почти во всем диапазоне значений безразмерного параметра вязкости.

Ключевые слова: задача Стокса, вязкая несжимаемая жидкость, колебания твердого тела, эллиптический цилиндр

Для цитирования: Афанасов Е. Н., Кадыров С. Г., Певзнер В. В. Задача Стокса для эллиптического контура // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физикоматематические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 177–188. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16314

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.16314

# THE STOKES PROBLEM FOR AN ELLIPTIC CONTOUR

# E. N. Afanasov<sup>1</sup><sup>III</sup>, S. G. Kadyrov<sup>2</sup>, V. V. Pevzner<sup>2</sup>

<sup>1</sup>LLC "Evolution Marine Digital", St. Petersburg, Russia;

<sup>2</sup> State Marine Technical University, St. Petersburg, Russia

# <sup>III</sup> zhenya.afanasov@yandex.ru

**Abstract.** The paper considers the problem on small harmonic oscillations of an elliptical contour immersed in the incompressible viscous fluid. Analytical and asymptotic methods for solving this problem have been proposed. The results obtained in the numerical implementation of the analytical method and the results of asymptotic solutions were compared. The possibilities of describing the solution in almost the entire range of values of the dimensionless viscosity parameter by joint application of the proposed methods were shown.

Keywords: Stokes problem, viscous incompressible fluid, solid body vibrations, elliptical cylinder

**For citation:** Afanasov E. N., Kadyrov S. G., Pevzner V. V., The Stokes problem for an elliptic contour, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 177–188. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16314

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

© Афанасов Е. Н., Кадыров С. Г., Певзнер В. В., 2023. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

#### Введение

Расчеты гидродинамических сил, действующих на твердые и упругие конструкции, совершающие колебания в вязкой несжимаемой жидкости, являются весьма важными и актуальными в различных приложениях, например, в нанотехнологиях, в технике измерений вязкости, в гидромеханике морских сооружений.

Поскольку обычно конструкции имеют сложную геометрическую форму, для решения таких задач используют методы вычислительного эксперимента на основе сеточных методов численного моделирования, которые реализованы в известных коммерческих пакетах инженерного анализа (например, Ansys Fluent, STAR-CCM+ и др.). Вычислительный подход универсален, однако весьма дорог и трудоемок.

Ввиду этих обстоятельств, важно иметь возможность решать сравнительно простые «эталонные» задачи, для которых удается построить их явное, асимптотическое или численное решения. Полученные решения можно использовать как первое и часто хорошее приближение для более трудных по постановке проблем.

Единственной плоской задачей (кроме модельной задачи о колебаниях плоскости), допускающей точное аналитическое решение, остается до сих пор задача о малых колебаниях кругового цилиндра в покоящейся вязкой несжимаемой жидкости, решение которой получено Стоксом в 1851 году.

Такая упрощенная модель достаточно длительное время использовалась для решения гидродинамических задач, например, в теории атомно-силовых микроскопов, и по-прежнему остается популярной. Однако очевидно, что оценка гидродинамической реакции конструкций, имеющих сложную геометрическую форму, является весьма приближенной, если она основана на результатах Стокса для кругового цилиндра.

В настоящей работе рассмотрена задача Стокса для эллиптического контура, совершающего малые гармонические колебания в несжимаемой вязкой жидкости, и предложены методы, которые в совокупности позволяют описать ее решение почти во всем диапазоне значений безразмерного параметра вязкости.

#### Постановка задачи

Пусть произвольный плоский контур, погруженный в несжимаемую вязкую жидкость с кинематической вязкостью v и плотностью р, совершает малые гармонические колебания в своей плоскости с заданной частотой  $\omega$ . Амплитуда колебаний предполагается много меньшей размеров контура.

Для записи уравнений движения в безразмерном виде характерный размер контура L используется как единица длины, амплитуды скоростей  $v_x$ ,  $v_y$  жидкости и вынужденных колебаний контура  $u_0$  отнесены к величине  $\omega L$ , давление — к  $\rho \omega^2 L^2$ , гидродинамическая сила  $F_y - \kappa \rho \omega^2 L^3$ .

Уравнения гидродинамики вязкой несжимаемой жидкости при сделанных выше предположениях имеют вид [1]:

$$\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} - \beta \frac{\partial p}{\partial x} + i\beta v_x = 0,$$

$$\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} - \beta \frac{\partial p}{\partial y} + i\beta v_y = 0,$$

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0,$$
(1)

где  $\beta = \frac{\omega L^2}{v}$  – безразмерный параметр.

Граничные условия на линии контура Г формулируются как условия «прилипания»:

$$v_n \Big|_{\Gamma} = u_n, \quad v_{\tau} \Big|_{\Gamma} = u_{\tau}, \tag{2}$$

<sup>©</sup> Afanasov E. N., Kadyrov S. G., Pevzner V. V., 2023. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

где  $(v_n, v_{\tau}), (u_n, u_{\tau})$  – нормальная и касательная составляющие векторов скоростей жидкости и контура соответственно.

Возмущения поля скоростей, вызванные колебаниями, затухают при удалении от контура Г:

$$v_x \to 0, \ v_y \to 0, \ \sqrt{x^2 + y^2} \to \infty.$$
 (3)

Если использовать представление компонент вектора скорости через две скалярные функции φ и ψ, называемые далее для краткости потенциалами [2], а именно

$$v_x = \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y}, \ v_y = \frac{\partial \varphi}{\partial y} - \frac{\partial \psi}{\partial x},$$

то можно записать систему уравнений (1) и граничные условия (2), (3) в виде

$$\begin{cases} \Delta \varphi = 0, \\ \Delta \psi + i\beta \psi = 0, \\ p = i\varphi; \end{cases}$$
(4)

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial n} + \frac{\partial \psi}{\partial \tau} = u_n, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} - \frac{\partial \psi}{\partial n} = u_{\tau}, \\ \varphi, \psi \to 0, \sqrt{x^2 + y^2} \to \infty. \end{cases}$$
(5)

Как показано в статье [3], гидродинамическая сила  $F_x$ , действующая на плоский контур с нормалью  $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$ , совершающий малые гармонические колебания вдоль оси Ox, определяется через потенциалы формулой

$$F_{x} = -i \int_{\Gamma} \varphi n_{x} dl - i \int_{\Gamma} \psi n_{y} dl.$$
(6)

Поставленная задача представляет как теоретический, так и практический интерес в различных областях: при проектировании микросистем (сканирующая зондовая микроскопия [4 – 6]), приборов для измерений вязкости [7], в задачах гидромеханики морских сооружений [8]. Значения безразмерного параметра  $\beta$  на практике могут изменяться в широком диапазоне: от 10<sup>-3</sup> до 10<sup>5</sup>.

Точное решение задачи о колебаниях кругового цилиндра в вязкой несжимаемой покоящейся жидкости, а также формула для расчета гидродинамического сопротивления цилиндра получены Джорджем Стоксом в 1851 г. [9]. Впоследствии этот труднодоступный для ознакомления результат был повторен в статье [10] и подтвержден экспериментально (см., например, работы [11, 12]).

По аналогии с этой классической задачей будем называть задачу о колебаниях произвольного плоского конура, помещенного в безграничную несжимаемую жидкость, задачей Стокса для этого контура.

#### Задача Стокса для кругового цилиндра

Приведем результаты решения задачи, полученные с помощью метода потенциалов в монографии [2]. Для случая несжимаемой жидкости, в полярных координатах *r*,  $\theta$ , решение имеет следующий вид:

$$\varphi(r,\theta) = u_0 \frac{H(1,\beta) - 1}{H(1,\beta) + 1} \frac{1}{r} \cos \theta, \tag{7}$$

$$\psi(r,\theta) = u_0 \frac{2H(r,\beta)}{H(1,\beta)+1} \sin \theta,$$

$$F_x(\beta) = -i\pi u_0 \frac{3H(1,\beta)-1}{1+H(1,\beta)},$$
(7)

где введена функция

$$H(r,\beta) = \frac{H_1^{(1)}(r\sqrt{i\beta})}{\sqrt{i\beta} H_1^{\prime(1)}(r\sqrt{i\beta})}\Big|_{r=1}.$$
(8)

При больших значениях  $\beta$ , из формулы (7) для гидродинамической силы следует, что

$$F_{x}\left(\beta\right) \underset{\beta \to \infty}{\sim} i\pi u_{0} \left[ 1 + 2\left(1 + i\right)\sqrt{\frac{2}{\beta}} \right]. \tag{9}$$

Формулу (9) часто называют формулой Стокса [10 – 12].

Видно, что при  $\beta \to \infty F_x(\beta) \to i\pi u_0$ , что соответствует представлениям «присоединенной» массы несжимаемой идеальной жидкости.

При малых β потенциалы имеют вид

$$\varphi(r,\theta) \underset{\beta \to 0}{\sim} \frac{4iu_0}{\beta \left(2\gamma - \frac{i\pi}{2} - 2\ln 2 + \ln\beta\right)} \frac{1}{r} \cos\theta,$$

$$\psi(r,\theta) \underset{\beta \to 0}{\sim} \frac{4iu_0}{\beta \left(2\gamma - \frac{i\pi}{2} - 2\ln 2 + \ln\beta\right)} \frac{1}{r} \sin\theta,$$
(10)

и, в соответствии с формулой (6),

$$F_{x} \underset{\beta \to 0}{\sim} \frac{8\pi u_0}{\beta \left(2\gamma - \frac{i\pi}{2} - 2\ln 2 + \ln\beta\right)}$$
(11)

(здесь у – постоянная Эйлера).

#### Методы решения задачи Стокса для эллиптического цилиндра

Аналитическое решение. Для эллиптического контура в статье [13] получены некоторые асимптотические результаты, а в [14] построено формальное решение.

Итак, в качестве масштаба длины примем большую полуось эллипса (L = a). Уравнение эллипса в декартовых (безразмерных) координатах имеет вид

$$\Gamma: x^2 + \frac{y^2}{\varepsilon^2} = 1 \left(\varepsilon = \frac{b}{a}\right).$$

Перейдем к эллиптическим координатам:

$$x = hch\xi cos\eta, y = hsh\xi sin\eta,$$

где  $h = \sqrt{1 - \varepsilon^2}$  — половина фокусного расстояния,

$$\xi \in [\xi_0, +\infty), \ \eta \in [0, 2\pi].$$

Тогда уравнение эллипса записывается в виде

$$\xi = \xi_0, \ \left( \operatorname{ch} \xi_0 = \frac{1}{\sqrt{1 - \varepsilon^2}}, \ \operatorname{sh} \xi_0 = \frac{\varepsilon}{\sqrt{1 - \varepsilon^2}} \right).$$
Единичные нормальный (**n**) и касательный ( $\tau$ ) векторы к контуру эллипса выражаются как

$$\mathbf{n} = \frac{\left(\varepsilon \cos \eta, \sin \eta\right)}{\sqrt{\sin^2 \eta + \varepsilon^2 \cos^2 \eta}}, \ \mathbf{\tau} = \frac{\left(-\sin \eta, \varepsilon \cos \eta\right)}{\sqrt{\sin^2 \eta + \varepsilon^2 \cos^2 \eta}}$$

Производные по нормали и по касательной следуют выражениям

$$\frac{\partial}{\partial n} = \nabla \cdot \mathbf{n} = \frac{\frac{\partial}{\partial \xi}}{\sqrt{\sin^2 \eta + \varepsilon^2 \cos^2 \eta}}, \quad \frac{\partial}{\partial \tau} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \frac{\frac{\partial}{\partial \eta}}{\sqrt{\sin^2 \eta + \varepsilon^2 \cos^2 \eta}}.$$

Граничные условия для потенциалов при  $\xi = \xi_0$  задаются в виде

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \xi} + \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} = \varepsilon u_0 \cos \eta,$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \eta} - \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} = -u_0 \sin \eta.$$
(12)

Уравнение Лапласа для потенциала ф в эллиптических координатах дается равенством

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \eta^2} = 0$$

Его решение, убывающее на бесконечности, имеет следующий вид:

$$\varphi(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^{\infty} C_{2k-1} e^{-(2k-1)(\xi-\xi_0)} \cos(2k-1)\eta.$$
(13)

Уравнение для потенциала  $\psi$  в эллиптических координатах выражается формулой

$$\frac{1}{\left(ch^{2}\xi - \cos^{2}\eta\right)} \left(\frac{\partial^{2}\psi}{\partial\xi^{2}} + \frac{\partial^{2}\psi}{\partial\eta^{2}}\right) + \left(1 - \varepsilon^{2}\right)i\beta \psi = 0.$$
(14)

Как известно (см. монографию [15]), уравнение (14) допускает разделение переменных и его решение, убывающее на бесконечности и нечетное с периодом  $2\pi$ , имеет вид

$$\Psi(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^{\infty} D_{2k-1} H_{2k-1}(\xi, \xi_0, q) s e_{2k-1}(\eta, q).$$
(15)

Здесь введены обозначения

$$q = \frac{1}{4}i(1-\varepsilon^{2})\beta;$$

$$H_{2k-1}(\xi,\xi_{0},q) = \frac{Ne_{2k-1}^{(1)}(\xi,q)}{\frac{dNe_{2k-1}^{(1)}(\xi,q)}{d\xi}}|_{\xi=\xi_{0}};$$
(16)

использованы следующие функции:

 $se_{2k-1}(b_{2k-1}(q),\eta,q)$  – нечетная функция Матье с периодом  $2\pi$ ;  $Ne_{2k-1}^{(1)}(b_{2k-1}(q),\xi,q)$  – модифицированная функция Матье 3-го рода (применяется тер-

минология, принятая в монографии [15]).

Обе функции отвечают собственному числу  $b_{2k-1}(q), k = 1, 2, ...$ 

Отметим, что, помимо ( $\xi$ ,  $\eta$ ) остальные аргументы во всех функциях в дальнейшем опускаются для краткости записи.

Периодическая функция Матье  $se_{2k-1}(\eta)$  и ее производная представимы в виде ряда Фурье:

$$se_{2k-1}(\eta) = \sum_{r=1}^{\infty} B_{2k-1,2r-1} \sin(2r-1)\eta,$$

$$\frac{d}{d\eta} se_{2k-1}(\eta) = \sum_{r=1}^{\infty} (2r-1) B_{2k-1,2r-1} \cos(2r-1)\eta,$$

$$B_{2k-1,2r-1} = \frac{1}{\pi} \int_{0}^{2\pi} se_{2k-1}(\eta) \sin(2r-1)\eta d\eta.$$
(18)

Для непериодической функции Матье  $Ne_{2k-1}^{(1)}(\xi)$  используются формулы, приведенные в монографии [15]:

$$Ne_{2k-1}^{(1)}\left(\xi\right) = \frac{s_{2k-1}}{\sqrt{q}} \sum_{r=1}^{\infty} \left(-1\right)^{r-1} B_{2k-1,2r-1} \left[J_{r-1}\left(v_{1}\right)H_{r}^{(1)}\left(v_{2}\right) - J_{r}\left(v_{1}\right)H_{r-1}^{(1)}\left(v_{2}\right)\right],$$

$$s_{2k-1} = se_{2k-1}'\left(0\right)se_{2k-1}\left(\frac{\pi}{2}\right), v_{1} = \sqrt{q}e^{-\xi}, v_{2} = \sqrt{q}e^{\xi}.$$
(19)

Таким образом,

$$\begin{split} H_{2k-1}(\xi,\xi_{0}) &= \\ &= \frac{\frac{1}{\sqrt{q}}\sum_{s=1}^{\infty} (-1)^{s-1} B_{2k-1,2s-1} \Big[ J_{s-1}(v_{1}) H_{s}^{(1)}(v_{2}) - J_{s}(v_{1}) H_{s-1}^{(1)}(v_{2}) \Big]}{\sum_{s=1}^{\infty} (-1)^{s-1} B_{2k-1,2s-1} \Big[ J_{s-1}(v_{1}) H_{s}^{(1)}(v_{2}) - J_{s}(v_{1}) H_{s-1}^{(1)}(v_{2}) \Big]' \Big|_{\xi=\xi_{0}}}, \\ &= \Big[ J_{s-1}(v_{1}) H_{s}^{(1)}(v_{2}) - J_{s}(v_{1}) H_{s-1}^{(1)}(v_{2}) \Big]' \Big|_{\xi=\xi_{0}} = \\ &= e^{-\xi_{0}} \Big[ -J_{s-1}'(v_{1}^{0}) H_{s}^{(1)}(v_{2}^{0}) + e^{2\xi_{0}} J_{s-1}(v_{1}^{0}) H_{s}^{\prime(1)}(v_{2}^{0}) + J_{s}'(v_{1}^{0}) H_{s-1}^{\prime(1)}(v_{2}^{0}) - e^{2\xi_{0}} J_{s}(v_{1}^{0}) H_{s-1}^{\prime(1)}(v_{2}^{0}) \Big], \\ &\quad v_{1}^{0} = \sqrt{q} e^{-\xi_{0}}, v_{2}^{0} = \sqrt{q} e^{\xi_{0}}. \end{split}$$

Подстановка решений (13), (15) в граничные условия (12) дает следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} -\sum_{k=1}^{\infty} (2k-1)C_{2k-1}\cos(2k-1)\eta + \sum_{k=1}^{\infty} D_{2k-1}H_{2k-1}(\xi_0,\xi_0)se'_{2k-1}(\eta) = \varepsilon u_0\cos\eta, \\ -\sum_{k=1}^{\infty} (2k-1)C_{2k-1}\sin(2k-1)\eta - \sum_{k=1}^{\infty} D_{2k-1}se_{2k-1}(\eta) = -u_0\sin\eta. \end{cases}$$
(20)

Если использовать представление  $se_{2k-l}(\eta)$ ,  $se'_{2k-1}(\eta)$  в виде ряда Фурье по функциям sin(2k-1),  $cos(2k-1)\eta$ , то можно свести систему уравнений (20) относительно коэффициентов  $C_{2k-1}$ ,  $D_{2k-1}$  к бесконечной системе линейных уравнений, т. е.

$$\begin{cases} -C_{2r-1} + \sum_{k=1}^{\infty} D_{2k-1} B_{2r-1,2k-1} H_{2k-1} (\xi_0, \xi_0, q) = \varepsilon u_0 \delta_r^1, \\ C_{2r-1} + \sum_{k=1}^{\infty} D_{2k-1} B_{2r-1,2k-1} = u_0 \delta_r^1, \end{cases}$$

182

где  $\delta_r^1$  – символ Кронекера, который означает следующее:

$$\delta_r^1 = \begin{cases} 1, \ r = 1, \\ 0, \ r \neq 1 \end{cases}$$

Исключая коэффициенты  $C_{2r-1}$ , окончательно имеем:

$$\sum_{k=1}^{\infty} D_{2k-1} B_{2r-1,2k-1} \Big[ 1 + H_{2k-1} \big( \xi_0, \xi_0, q \big) \Big] = \big( 1 + \varepsilon \big) u_0 \delta_r^1.$$
(21)

Бесконечную систему линейных уравнений (21) можно решать методом редукции. Наконец, согласно формуле (6), имеем:

$$F_{x} = -i \int_{0}^{2\pi} \sum_{k=1}^{\infty} C_{2k-1} \cos(2k-1) \eta \varepsilon \cos \eta d\eta -$$
  
$$-i \int_{0}^{2\pi} \sum_{k=1}^{\infty} D_{2k-1} H_{2k-1} (\xi_{0}, \xi_{0}, q) s e_{2k-1} (\eta, q) \sin \eta d\eta =$$
  
$$= i \pi \left[ -\varepsilon C_{1} - \sum_{k=1}^{\infty} D_{2k-1} H_{2k-1} (\xi_{0}, \xi_{0}, q) B_{2k-1,1} \right].$$
 (22)

Асимптотика решения для больших значений  $\beta$ . Как показано в статье [16], с помощью метода граничных интегральных уравнений при  $\beta \rightarrow \infty$  можно построить асимптотическое решение задачи Стокса для произвольного гладкого выпуклого контура в виде асимптоти-

ческих рядов по степеням  $\frac{1}{\sqrt{\beta}}$ .

Для эллиптического контура первые два члена такого разложения дают выражения для потенциалов в точках контура [16]:

$$\varphi(\xi_{0},\eta)_{\beta\to\infty} - u_{0}\varepsilon\cos\eta + \frac{1}{i\sqrt{i\beta}}\frac{u_{0}(1+\varepsilon)\varepsilon^{2}}{\pi}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{I_{m}(\varepsilon)}{m}\cos m\eta,$$

$$I_{m}(\varepsilon) = \int_{0}^{2\pi}\frac{\cos\eta\cos m\eta}{\left(\varepsilon^{2}\cos^{2}\eta + \sin^{2}\eta\right)^{3/2}}d\eta,$$

$$\psi(\xi_{0},\eta)_{\beta\to\infty}\frac{1}{i\sqrt{i\beta}}\frac{(1+\varepsilon)u_{0}\sin\eta}{\sqrt{\varepsilon^{2}\cos^{2}\eta + \sin^{2}\eta}}.$$
(23)

Подстановка формул (23) в выражение (6) для гидродинамической силы приводит к следующей записи:

$$F_{x} = i\pi u_{0}\varepsilon^{2} + \frac{4(1+\varepsilon)\varepsilon u_{0}}{\sqrt{i\beta}(1-\varepsilon)} \left[ K\left(\frac{\varepsilon^{2}-1}{\varepsilon^{2}}\right) - E\left(\frac{\varepsilon^{2}-1}{\varepsilon^{2}}\right) \right],$$
(24)

где К, Е – полные эллиптические интегралы.

При  $\varepsilon \to 1$  эллипс вырождается в окружность и формула (24) переходит в формулу (9). Асимптотика решения для малых значений **β.** При  $\beta \to 0$  имеем [15]:

$$q \to 0, \ se_{2k-1}(\eta, q) \to \sin(2k-1)\eta, \ B_{2k-1,2r-1} \underset{q \to 0}{\sim} \delta_{2r-1}^{2k-1},$$

и тогда первый член в формулах (13), (15) становится главным. Следовательно, система уравнений (20) позволяет получить следующие зависимости:

\_\_ (...

$$\varphi(\xi,\eta) \mathop{\sim}_{q\to 0} \frac{H_1(\xi_0,\xi_0,q)-\varepsilon}{H_1(\xi_0,\xi_0,q)+1} e^{-(\xi-\xi_0)} u_0 \cos\eta,$$

$$\Psi(\xi,\eta) \underset{q\to 0}{\sim} \frac{(1+\varepsilon)H_1(\xi,\xi_0,q)}{H_1(\xi_0,\xi_0,q)+1} u_0 \sin \eta.$$

Разложением в ряды по малому параметру β находим:

$$\Phi_{\beta \to 0} \sim \frac{8ie^{-\xi_{-}\xi_{0}}}{(1-\varepsilon)\beta\left\{-e^{-4\xi_{0}}-e^{-2\xi_{0}}+\left[2\gamma-i\pi+\ln\beta+2\ln\left(e^{\xi_{0}}\frac{1}{4}\sqrt{i\left(1-\varepsilon^{2}\right)}\right)\right]\right\}}u_{0}\cos\eta,$$

$$\Psi_{\beta \to 0} \sim \frac{8ie^{-\xi_{-}\xi_{0}}}{(1-\varepsilon)\beta\left\{-e^{-4\xi_{0}}-e^{-2\xi_{0}}+\left[2\gamma-i\pi+\ln\beta+2\ln\left(e^{\xi_{0}}\frac{1}{4}\sqrt{i\left(1-\varepsilon^{2}\right)}\right)\right]\right\}}u_{0}\sin\eta,$$

и сила, соответственно, по формуле (6) выражается как

$$F_{x} \underset{\beta \to 0}{\sim} \frac{8(1+\varepsilon)\pi u_0 e^{-2\xi_0}}{(1-\varepsilon)\beta\left\{-e^{-4\xi_0} - e^{-2\xi_0} + \left[2\gamma - i\pi + \ln\beta + 2\ln\left(e^{\xi_0}\frac{1}{4}\sqrt{i(1-\varepsilon^2)}\right)\right]\right\}}.$$
(25)

При ε → 1

$$2\ln\left(e^{\xi_0}\frac{1}{4}\sqrt{i\left(1-\varepsilon^2\right)}\right) = 2\ln\left(\frac{1+\varepsilon}{4}\sqrt{i}\right) = \frac{i\pi}{2} - 2\ln 2, \ e^{-2\xi_0} \sim \frac{1-\varepsilon}{2} + O\left(1-\varepsilon\right)^2,$$

и предельным переходом из выражения (25) получается формула (11) для окружности.

**Метод конечных разностей.** Численный алгоритм решения поставленной задачи подробно описан в статье [17]. Сопоставление результатов, полученных разными методами в работах [16, 17], позволяет заключить, что предлагаемый метод конечных разностей может применяться в достаточно широком диапазоне значений  $\beta \in [0,1,25]$ , т. е. даже в диапазоне «умеренных» значений  $\beta \in [1, 10]$ , где применимость асимптотических решений оказывается сомнительной.

#### Численная реализация методов решения

Для численной реализации формул аналитического решения необходимо вычислить собственные числа  $b_{2k-1}(q)$  уравнения Матье и коэффициенты  $B_{2k-1, 2r-1}$ . Методика их вычисления описана давно [15, 18]. Хотя теоретическую работу по методам вычисления этих чисел принято считать завершенной [19], в реальности многие результаты до сих пор не получены, в особенности это касается случая чисто мнимых и больших по модулю значений q. Поэтому приходится опираться на применение пакета Mathematica, в котором имеются функции расчета периодических функций Матье, и находить коэффициенты  $B_{2k-1, 2r-1}$  численным интегрированием по формулам (18).

Опыт расчетов по изложенным выше методам показал, что диапазон чисел  $\beta$  можно условно разделить на три части: малые ( $\beta < 1$ ), большие ( $\beta > 10$ ) и умеренные ( $\beta \in [1, 10]$ ). В диапазоне малых  $\beta$  метод редукции для системы (21) сходится быстро (за 3 – 5 итераций). Результаты расчета модуля силы  $|F_{\gamma}|$  для различных значений  $\varepsilon$  приведены на рис. 1.

Анализ показал, что при  $\beta > 1$  сходимость метода замедляется, порядок матрицы коэффициентов  $B_{2k-1,2r-1}$  возрастает, число обусловленности быстро растет, а при  $\beta > 10$  вычисление коэффициентов  $B_{2k-1,2r-1}$  по формуле (18) становится практически невозможным, так как подынтегральная функция быстро осциллирует. Проблемы реализации расчетной схемы в этом диапазоне в целом сходны с аналогичными в теории дифракции и рассеяния высокочастотных звуковых волн.

В случае задачи Стокса для кругового цилиндра применение асимптотик при  $\beta < 1$  и  $\beta > 10$  в совокупности с методом конечных разностей позволяет охватить весь возможный диапазон изменения значений параметра  $\beta$ .



Рис. 1. Расчетные зависимости модуля силы  $|F_x|$  от параметра є при различных малых значениях числа  $\beta$ : 10<sup>-3</sup>, 10<sup>-2</sup> (*a*) и 10<sup>-1</sup>, 0,5 (*b*).

Использованы формула (25) (сплошные линии) и аналитическое решение (символы)

Для эллиптического контура, по-видимому, можно надеяться на такой же эффект. В работе [16] методом конечных разностей установлено, что асимптотика (24) дает приемлемые результаты уже при  $\beta > 10$ .

На рис. 2 показаны результаты расчета по формуле (24) и по аналитическому решению для  $\beta \in [1, 10]$ . «Выход» решения на указанную асимптотику очевиден.



Рис. 2. Расчетные зависимости модуля силы  $|F_x|$  от параметра  $\beta$  при различных значениях параметра  $\epsilon$ : 0,10 (1), 0,25 (2), 0,50 (3), 0,75 (4), 0,99 (5). Использованы формула (24) (сплошные линии) и аналитическое решение (символы)

### Заключение

Рассмотренные в работе методы можно применять для решения задачи о малых гармонических колебаниях эллиптического контура, погруженного в несжимаемую вязкую жидкость, и, как показывает сопоставление результатов, в совокупности они позволяют описать решение почти во всем диапазоне значений параметра β.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. В 10 тт. Т. 6. Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 736 с.

2. Гузь А. Н. Динамика сжимаемой вязкой жидкости. Киев: А.С.К., 1998. 350 с.

3. **Кадыров С. Г.** Метод граничных интегральных уравнений в задаче о малых колебаниях тел в сжимаемой вязкой жидкости // Морской вестник. 2013. Спец. выпуск № 1 (10). С. 85–87.

4. **Ricci A., Giuri E.** Fluid Structure Interaction (FSI) analysis of microcantilevers vibrating in fluid environment // Proceedings of the European COMSOL Conference. March 30, 2009. Milan. 2009. Pp. 1–11.

5. Kirstein S., Mertesdorf M., Schoenhoff M. The influence of a viscous fluid on the vibration dynamics of scanning near-field optical microscopy fiber probes and atomic force microscopy cantilevers // Journal of Applied Physics. 1998. Vol. 84. No. 4. Pp. 1782–1790.

6. Sader J. E. Frequency response of cantilever beams immersed in viscous fluids with applications to the atomic force microscope // Journal of Applied Physics. 1998. Vol. 84. No. 1. Pp. 64–76.

7. Badiane D., Gasser A., Blond E, Belliere L. Vibrating beam in viscous fluid for viscosity sensing: Application to an industrial vibrating viscometer // Proceedings of the 12th Pan American Congress of Applied Mechanics (PACAM XII), Port of Spain, Trinidad, 2–6 January, 2012. 6 p.

8. Chaplin J. R., Subbiah K. Hydrodynamic damping of a cylinder in still water and a transverse current // Applied Ocean Research. 1998. Vol. 20. No. 4. Pp. 251–259.

9. Stokes G. G. On the effect of the internal friction of fluids on the motion of pendulums // Transactions of the Cambridge Philosophical Society. 1851. Vol. 9. No. 2. Pp. 8–106.

10. Tanahashi T. Force acting on an oscillating cylinder in incompressible viscous fluid // Keio Engineering Reports. 1972. Vol. 25. No. 11. Pp. 129–140.

11. Bearman P. W., Downie M. J., Graham J. M. R. Forces on cylinders in viscous oscillatory flow at low Keulegan – Carpenter numbers // Journal of Fluid Mechanics. 1985. Vol. 154. May. Pp. 337–356.

12. Sarpkaya T. Force on a circular cylinder in viscous oscillatory flow at low Keulegan – Carpenter numbers // Journal of Fluid Mechanics. 1986. Vol. 165. April. Pp. 61–71.

13. **Ray M.** Vibration of an infinite elliptic cylinder in a viscous liquid // Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik. 1936. Vol. 16. No. 2. Pp. 99–108.

14. Kanwal R. P. Vibrations of an elliptic cylinder and a flat plate in a viscous fluid // Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik. 1955. Vol. 35. No. 1–2. Pp. 17–22.

15. Мак-Лахлан Н. В. Теория и приложения функций Матье. Пер. с англ. под ред. И. Н. Денисюка. М.: Изд-во иностр. лит., 1953. 476 с.

16. Афанасов Е. Н., Кадыров С. Г. Граничные интегральные уравнения и асимптотика решения плоской задачи о малых колебаниях тела в вязкой несжимаемой жидкости // Математическое моделирование, компьютерный и натурный эксперимент в естественных науках. 2016. № 4. С. 4–18.

17. Афанасов Е. Н. Малые колебания твердого тела в вязкой несжимаемой жидкости // Морские интеллектуальные технологии. 2014. № 4-1 (26). С. 103–109.

18. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Эллиптические и автоморфные функции. Функции Ламе и Матье. Пер. с англ. (Справочная математическая библиотека). М.: Наука. Гл. редакция физ.-мат. лит-ры, 1967. 300 с.

19. Meixner J., Schäfke F. W., Wolf G. Mathieu functions // Mathieu functions and spheroidal functions and their mathematical foundations, Lecture Notes in Mathematics. Vol. 837. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1980. Pp. 63–101.

#### REFERENCES

1. Landau L. D., Lifshitz E. M., Course of theoretical physics, in 10 Vols. Vol. 6. Fluid Mechanics, Pergamon Press, Oxford, UK, 1959.

2. Guz A. N., Dinamika szhimayemoy vyazkoy zhidkosti [Dynamics of compressible viscous fluid], A.S.K. Publishing, Kiev, 1998 (in Russian).

3. Kadyrov S. G., The method of boundary integral equations in the issue of small oscillations of

bodies in a viscous compressible fluid, Morskoy Vestnik. (S1 (10)) (2013) 85-87 (in Russian).

4. Ricci A., Giuri E., Fluid Structure Interaction (FSI) analysis of microcantilevers vibrating in fluid environment, Proc. Europ. COMSOL Conf., March 30, 2009. Milan (2009) 1–11.

5. Kirstein S., Mertesdorf M., Schoenhoff M., The influence of a viscous fluid on the vibration dynamics of scanning near-field optical microscopy fiber probes and atomic force microscopy cantilevers, J. Appl. Phys. 84 (4) (1998) 1782–1790.

6. Sader J. E., Frequency response of cantilever beams immersed in viscous fluids with applications to the atomic force microscope, J. Appl. Phys. 84 (1) (1998) 64–76.

7. Badiane D., Gasser A., Blond E., Belliere L., Vibrating beam in viscous fluid for viscosity sensing: Application to an industrial vibrating viscometer, Proc. 12th Pan American Congress of Applied Mechanics (PACAM XII), Port of Spain, Trinidad, 2–6 Jan. (2012).

8. Chaplin J. R., Subbiah K., Hydrodynamic damping of a cylinder in still water and a transverse current, Appl. Ocean Res. 20 (4) (1998) 251–259.

9. Stokes G. G., On the effect of the internal friction of fluids on the motion of pendulums, Trans. Camb. Phil. Soc. 9 (2) (1851) 8–106.

10. **Tanahashi T.,** Force acting on an oscillating cylinder in incompressible viscous fluid, Keio Eng. Rep. 25 (11) (1972) 129–140.

11. Bearman P. W., Downie M. J., Graham J. M. R., Forces on cylinders in viscous oscillatory flow at low Keulegan – Carpenter numbers, J. Fluid Mech. 154 (May) (1985) 337–356.

12. Sarpkaya T., Force on a circular cylinder in viscous oscillatory flow at low Keulegan – Carpenter numbers, J. Fluid Mech. 165 (April) (1986) 61–71.

13. **Ray M.**, Vibration of an infinite elliptic cylinder in a viscous liquid, Z. Angew. Math. Mech. 16 (2) (1936) 99–108.

14. Kanwal R. P., Vibrations of an elliptic cylinder and a flat plate in a viscous fluid, Z. Angew. Math. Mech. 35 (1–2) (1955) 17–22.

15. McLachlan N., Theory and application of Mathieu functions, Oxford University Press, Oxford, UK, 1947.

16. Afanasov E. N., Kadyrov S. G., Boundary integral equations and asymptotic solutions of the plane problem of small oscillations of body in a viscous incompressible fluid, Simulation, Computer and Full-Scale Experiment in Natural Sciences. (4) (2016) 4-18.

17. Afanasov E. N., Small oscillations of a rigid body in a viscous incompressible fluid, Marine Intellectual Technologies. (4-1 (26)) (2014) 103–109 (in Russian).

18. Bateman H., Erdélyi A., Higher transcendental functions. In 3 Vols. Vol. III. McGraw-Hill Book Company, New York, 1955.

19. Meixner J., Schäfke F. W., Wolf G., Mathieu functions, In book: Mathieu functions and spheroidal functions and their mathematical foundations, Lecture Notes in Mathematics, Vol. 837, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (1980) 63–101.

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АФАНАСОВ Евгений Николаевич — инженер-гидродинамик ООО «Эволюция морских цифровых технологий», Санкт-Петербург, Россия.

197198, Россия, г. Санкт-Петербург, Александровский парк, 4, к. 3 zhenya.afanasov@yandex.ru

**КАДЫРОВ Сергей Газимурович** — кандидат технических наук, доцент кафедры математики Санкт-Петербургского государственного морского технического университета, Санкт-Петербург, Россия.

190008, Россия, г. Санкт-Петербург, Лоцманская ул., 3 skadyrov@gmail.com

**ПЕВЗНЕР Виталий Владимирович** — старший преподаватель кафедры математики Санкт-Петербургского государственного морского технического университета, Санкт-Петербург, Россия.

190008, Россия, г. Санкт-Петербург, Лоцманская ул., 3 vpevzner@mail.ru

# THE AUTHORS

# AFANASOV Evgeny N.

*LLC "Evolution Marine Digital"* 4-3 Alexandrovsky Park, St. Petersburg, 197198, Russia zhenya.afanasov@yandex.ru

# KADYROV Sergey G.

State Marine Technical University 3 Lotsmanskaya St., St. Petersburg, 190008, Russia skadyrov@gmail.com

### **PEVZNER Vitaliy V.** State Marine Technical University 3 Lotsmanskaya St., St. Petersburg, 190008, Russia vpevzner@mail.ru

Статья поступила в редакцию 28.04.2023. Одобрена после рецензирования 18.06.2023. Принята 18.06.2023. Received 28.04.2023. Approved after reviewing 18.06.2023. Accepted 18.06.2023. Научное издание

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

# «ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS» TOM 16, № 3, 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 30.09.2023. 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/