

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

ТОМ 17, №3
2024

Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого
2024

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

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Боровков А.И., проректор по перспективным проектам;

Жуков А.Е., 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 ВИНТИ 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 8 (812) 552-62-16.

<http://ntv.spbstu.ru/physics>

THE MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE
POLYTECHNICAL UNIVERSITY
JOURNAL

Physics
and Mathematics

**VOLUME 17, No.3,
2024**

Peter the Great St. Petersburg
Polytechnic University
2024

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

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

V.A.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. Karaseov – 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 peer-reviewed 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-tehnicheskie 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 ПИ № ФС77-52144 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 Politekhnikeskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.

Phone: 8 (812) 552-62-16.

<http://ntv.spbstu.ru/physics>

© Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 2024

Содержание

Физика конденсированного состояния

- Ревин А. А., Конаков А. А., Королев Д. С. *Электронная структура нанокристаллов оксида галлия, легированных мелкими донорами* 7
- Баранов А. И., Вторыгин Г. Э., Уваров А. В., Максимова А. А., Вячеславова Е. А., Гудовских А. С. *Спектроскопия полной проводимости гетероструктур фосфида бора на кремниевых подложках, полученных методом плазмохимического осаждения* 17
- Дворецкая Л. Н., Можаров А. М., Комаров С. Д., Вячеславова Е. А., Моисеев Э. И., Федоров В. В., Мухин И. С. *Создание оптических изолированных микрорезонаторов GaP(NAs) на кремнии* 25
- Кастро Р. А., Карулина Е. А., Галиханов М. Ф., Резцов Т. В., Фомичева Е. Е. *Релаксация электрического заряда в полимерных смесях на основе полиэтилена высокого давления и сополимера этилена с винилацетатом (статья на английском языке)* 36

Математическое моделирование физических процессов

- Барыкин Д. А., Шугуров К. Ю., Можаров А. М., Мухин И. С. *Численное моделирование туннельного эффекта в гетероструктуре нитрида галлия на кремнии* 46
- Земсков А. В., Вестяк А. В., Тарлаковский Д. В. *Модель нестационарных механо-диффузионных колебаний прямоугольной ортотропной пластины Тимошенко со смешанным закреплением по краям* 57

Физическое материаловедение

- Никитина Е. А., Капралова В. М., Сударь Н. Т., Студзинский В. М., Герасимов В. И. *Электрические и оптические свойства нанокompозитного материала на основе поливинилового спирта и фуллеренола* 76
- Абдувайитов А. А., Ташмухамедова Д. А., Умирзаков Б. Е., Хужаниёзов Д. Б., Бекпулатов И. Р., Лобода В. В. *Влияние бомбардировки ионами аргона на состав, электронную структуру и физические свойства фторида кадмия (статья на английском языке)* 87
- Донаев С. Б., Ширинов Г. М., Умирзаков Б. Е., Лобода В. В. *Влияние низкоэнергетической электронной бомбардировки на состав и структуру поверхности фосфида галлия* 97

Механика

- Астапов Я. К., Лукин А. В., Попов И. А. *Анализ точности коротковолновых и длинноволновых асимптотик для стационарных волн Лэмба в изотропном слое* 105
- Афанасов Е. Н., Кадыров С. Г., Сорокин В. Н. *Асимптотические методы решения задачи Стокса для плоского контура* 118
- Новокшенов А. Д., Абдулин И., Вершинин Д. В. *Алгоритм топологической оптимизации для связанных задач электроупругости* 134

Астрофизика

- Теофило-Сальвадор Э. *Изучение пар изолированных взаимодействующих галактик в аспекте гидродинамического поведения газа (статья на английском языке)* 148

Contents

Condensed matter physics

- Revin A. A., Konakov A. A., Korolev D. S.** *The electronic structure of gallium oxide nanocrystals doped with shallow donors* 7
- Baranov A. I., Vtorygin G. E., Uvarov A. V., Maksimova A. A., Vyacheslavova E. A., Gudovskikh A. S.** *Admittance spectroscopy of boron phosphide heterostructures grown by plasma enhanced chemical vapor deposition on silicon substrates* 17
- Dvoretckaia L. N., Mozharov A. M., Komarov S. D., Vyacheslavova E. A., Moiseev E. I., Fedorov V. V., Mukhin I. S.** *Creation of optical isolated GaP(NAs) microcavities on silicon* 25
- Castro R. A., Karulina E. A., Galikhanov M. F., Reztsov T. V., Fomicheva E. E.** *Relaxation of electric charge in polymer blends based on low-density polyethylene and copolymer of ethylene with vinyl acetate* 36

Simulation of physical processes

- Barykin D. A., Shugurov K. Yu., Mozharov A. M., Mukhin I. S.** *Numerical simulation of the tunnel effect in the gallium nitride heterostructure on silicon* 46
- Zemskov A. V., Vestyak A. V., Tarlakovskii D. V.** *A model of unsteady mechanodiffusion vibrations of a rectangular orthotropic Timoshenko plate with mixed edge fixing* 57

Physical materials technology

- Nikitina E. A., Kapralova V. M., Sudar N. T., Studzinskii V. M., Gerasimov V. I.** *Electrical and optical properties of a nanocomposite based on polyvinyl alcohol and fullerene* 76
- Abduvayitov A. A., Tashmukhamedova D. A., Umirzakov B. E., Khujaniyozov J. B., Bekpulatov I. R., Loboda V. V.** *Effect of argon ion bombardment on the composition, electronic structure and physical properties of cadmium fluoride* 87
- Donaev S. B., Shirinov G. M. ugli, Umirzakov B. Y., Loboda V. V.** *Influence of low-energy electron bombardment on the composition and structure of the gallium phosphide surface* 97

Mechanics

- Astapov Y. K., Lukin A. V., Popov I. A.** *An analysis of the accuracy of short-wave and long-wave asymptotics for stationary Lamb waves in the isotropic layer*..... 105
- Afanasov E. N., Kadyrov S. G., Sorokin V. N.** *Asymptotic methods for solving the Stokes problem for a flat contour* 118
- Novokshenov A. D., Abdulin I., Vershinin D. V.** *A topology optimization algorithm for electroelasticity coupled problems* 134

Astrophysics

- Teófilo-Salvador E.** *Individual behavior of gas hydrodynamics from pairs of isolated galaxies in interaction* 148

Физика конденсированного состояния

Научная статья

УДК 538.915

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17301>

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА НАНОКРИСТАЛЛОВ ОКСИДА ГАЛЛИЯ, ЛЕГИРОВАННЫХ МЕЛКИМИ ДОНОРАМИ

А. А. Ревин, А. А. Конаков, Д. С. Королев ✉

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,

г. Нижний Новгород, Россия

✉ dmkorolev@phys.unn.ru

Аннотация. Приведены результаты теоретических расчетов электронных состояний нанокристаллов оксида галлия (Ga_2O_3) как легированных донорной примесью, так и нелегированных. Определены структура, состояния и энергетические уровни размерного квантования в нанокристаллах в приближении огибающей функции. Согласно расчетам, электронно-дырочная пара образует в нанокристалле связанное состояние экситонного типа. Показано, что типичные донорные примеси в Ga_2O_3 , такие как кремний и олово, создают в запрещенной зоне состояния, локализованные в пространственной области, в несколько раз меньшей объема нанокристалла. Образуют компактную нейтральную пару, электрон и донорный ион не оказывают какого-либо заметного влияния на состояния оптически возбужденных электронно-дырочных пар. Обсуждается также влияние внедрения примеси на рекомбинационные процессы.

Ключевые слова: нанокристалл, оксид галлия, электронная структура, донорная примесь, квантово-размерный эффект

Финансирование: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-10233, <https://rscf.ru/project/21-79-10233/>.

Для цитирования: Ревин А. А., Конаков А. А., Королев Д. С. Электронная структура нанокристаллов оксида галлия, легированных мелкими донорами // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 7–16. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17301>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17301>

THE ELECTRONIC STRUCTURE OF GALLIUM OXIDE NANOCRYSTALS DOPED WITH SHALLOW DONORS

A. A. Revin, A. A. Konakov, D. S. Korolev ✉

National Research Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod,

Nizhni Novgorod, Russia

✉ dmkorolev@phys.unn.ru

Abstract. The results of theoretical calculations of electronic states of the gallium oxide (Ga_2O_3) nanocrystals both doped with donor impurity and undoped have been presented in the paper. In the envelope function approximation, the structure, states and energy levels of size quantization in the nanocrystals were determined. According to our calculations, the electron-hole pair forms a bound state of the exciton type in the nanocrystal. The typical donor

impurities in Ga_2O_3 , such as silicon and tin, were shown to create bandgap states localized in a spatial domain being several times smaller than the nanocrystal's volume. Forming a compact neutral pair, the electron and donor ions have no noticeable influence on the states of the optically excited electron-hole pairs. The effect of impurity implantation on recombination processes was also discussed.

Keywords: nanocrystal, gallium oxide, electronic structure, donor impurity, quantum size effect

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 21-79-10233, <https://rscf.ru/project/21-79-10233/>).

For citation: Revin A. A., Konakov A. A., Korolev D. S., The electronic structure of gallium oxide nanocrystals doped with shallow donors, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 7–16. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17301>

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

Введение

Широкозонные полупроводники рассматриваются в качестве наиболее перспективных для применения в электронике. В последнее время все большую популярность приобретает оксид галлия – полупроводниковый материал, рассматриваемый в качестве базового для устройств электроники четвертого поколения. Благодаря его характеристикам, в первую очередь достаточно большой ширине запрещенной зоны, составляющей около 4,5–5,2 эВ, оксид галлия – один из лучших материалов для создания устройств силовой электроники, детекторов УФ-излучения, газовых сенсоров и т. п. [1–3]. Еще одно важное преимущество, которым обладает оксид галлия, – это наличие технологии получения монокристаллических подложек большого диаметра.

К настоящему времени наблюдается устойчивый рост количества публикаций, посвященных разработке и изучению способов получения материалов на основе оксида галлия (выращивание монокристаллов, эпитаксия и нанесение тонких пленок), модификации его свойств и потенциальным применениям в приборных структурах [4–6]. Наряду с экспериментальными, растет и число теоретических работ, посвященных исследованию зонной структуры, электронных состояний и параметров дефектных уровней для объемного оксида галлия [7–9].

Одним из актуальных направлений развития технологии материалов на основе оксида галлия является создание наноструктур. Перспектива их практического применения связана, в первую очередь, с возможностью создания светоизлучающих и фотоприемных устройств на их основе [10, 11]. Однако широкое применение ограничено тем, что в качестве основных для получения наноструктур служат методы химического синтеза, не совместимые с микроэлектронной технологией.

Преодолеть это ограничение позволяет использование методики ионно-лучевого синтеза нанокристаллов (NC) Ga_2O_3 в диэлектрических матрицах (например, оксиды кремния или алюминия) на кремниевых подложках [12]. Преимуществом ионного синтеза, кроме его полной совместимости с кремниевой технологией, является возможность легирования материала примесными атомами, что позволяет контролируемо модифицировать свойства синтезированных образцов. Несмотря на интенсификацию экспериментальных исследований в этой области, теоретические работы по изучению наноструктур оксида галлия практически отсутствуют.

Структуры с нанокристаллами оксида галлия обладают интенсивной люминесценцией в УФ- и голубой областях спектра, что можно использовать как при создании светодиодных структур, так и для преобразования УФ-излучения в видимое [13, 14]. При этом спектры фотолюминесценции таких наноструктур отличаются от спектров излучения объемных образцов Ga_2O_3 . Однако объяснение наблюдаемых закономерностей, в частности учет квантоворазмерного эффекта в люминесценции наночастиц, на настоящий

момент носит исключительно качественный характер [15]. Также совершенно неизученным остается вопрос о влиянии легирования мелкими донорами на зонную структуру и электронные состояния НС Ga_2O_3 .

В настоящей работе проведено теоретическое исследование электронной структуры нанокристаллов оксида галлия без допирующих примесей, а также нанокристаллов, легированных мелкой донорной примесью.

Электронная структура нанокристаллов оксида галлия без примесей (в нулевом приближении)

Для изучения влияния мелких доноров на структуру состояний квазичастиц в НС целесообразно рассмотреть потенциал примеси как возмущение, поэтому стоит сначала кратко описать структуру состояний электронов и дырок в чистом НС Ga_2O_3 .

Задача размерного квантования электронов и дырок в оксиде галлия решалась в приближении огибающей функции. Уравнение для определения собственных функций и собственных значений имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) F(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})F(\mathbf{r}) = EF(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где m_x, m_y, m_z – составляющие анизотропной эффективной массы электрона или дырки; E – энергия; $F(\mathbf{r})$ – огибающая функция; потенциал $U(\mathbf{r})$ предполагается центральным.

Будем считать, что $U(\mathbf{r})$ – сферическая яма конечной глубины (рис. 1). Величина разрыва зон проводимости составляет около 3 эВ, валентных зон – примерно 1 эВ [4]. Пренебрегаем также анизотропией эффективных масс [16]: для электронов учет анизотропии масс дает поправки за пределами точности расчетов, для дырок величина поправок имеет несколько большую величину, но все равно остается малой.

Тогда решение уравнения (1) получаем в следующем виде:

$$\begin{aligned} \psi_{klm} &= A \frac{j_l(kr)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad \text{при } r < R, \\ \psi_{klm} &= B \frac{h_l(i\kappa r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad \text{при } r > R, \end{aligned} \quad (2)$$

где r – радиус нанокристалла; $k^2 = \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}$; $\kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$; $j_l(kr)$ – сферические функции Бесселя; $h_l(i\kappa r)$ – функции Ханкеля мнимого аргумента.

Неопределенные константы находятся из условия нормировки и непрерывности волновой функции. Энергетический спектр НС Ga_2O_3 находится из условия непрерывности логарифмической производной.

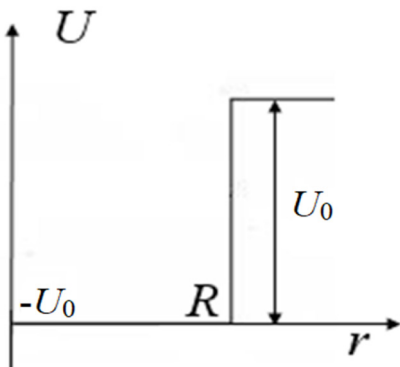


Рис. 1. Вид потенциала сферической ямы (R – ее радиус) конечной глубины U_0

На рис. 2 приведены графики зависимости энергий основного ($1s$) состояния электрона проводимости и дырки, отсчитываемых от дна зоны проводимости (вверх) и потолка валентной зоны (вниз), соответственно.

Анализ графиков позволяет заключить, что полученные значения энергий основных уровней размерного квантования слабо отличаются от уровней энергий бесконечной сферической ямы, поэтому далее для расчетов в качестве волновых функций основных и низколежащих возбужденных состояний можно использовать волновые функции бесконечной сферической ямы. Стоит отметить, что для такого приближения гораздо важнее близость волновых функций, чем энергий.

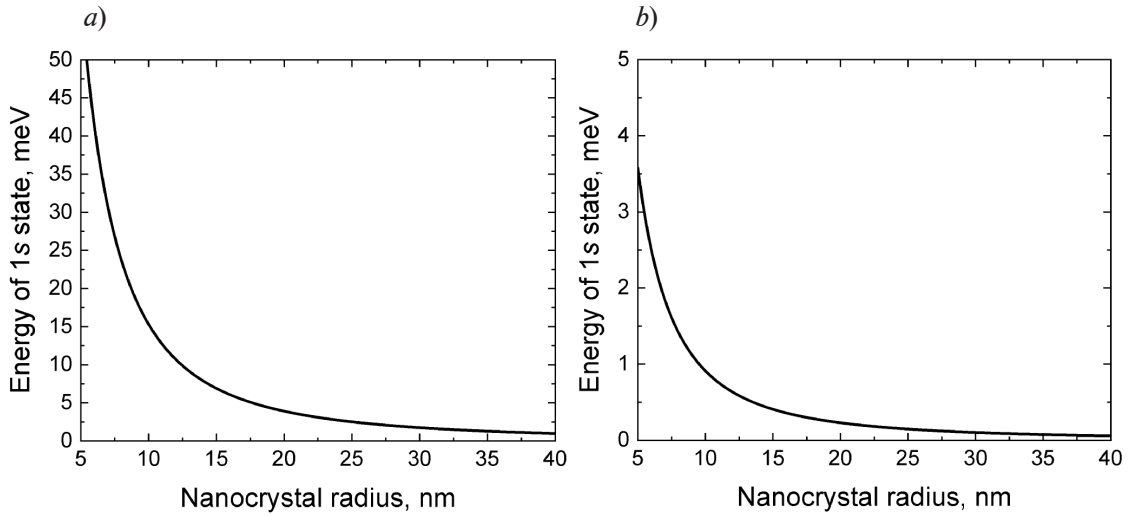


Рис. 2. Зависимости энергий 1s-состояния электрона (a) и дырки (b) от радиуса NC $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$

На рис. 3 изображены радиальные плотности, задаваемые волновыми функциями основного состояния, для конечной и бесконечной ямы. Видно, что волновые функции всюду близки и использование функций бесконечной ямы вполне оправдано.

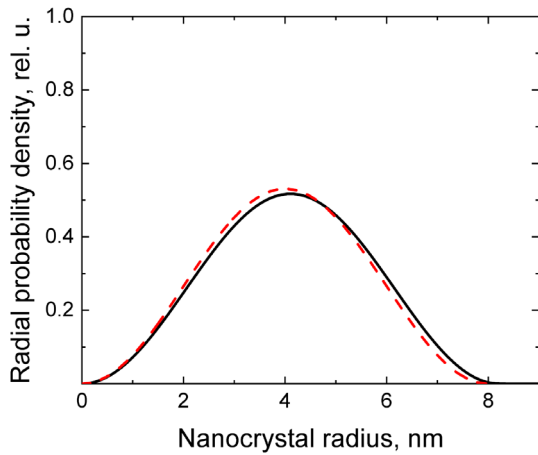


Рис. 3. Сравнение радиальных плотностей вероятности $r^2|\psi|^2$ для сферических ям конечного (сплошная линия) и бесконечного (пунктир) значений глубины.

Плотность выражена в «естественных» для конечной ямы единицах (rel. u.): $k_0 = \sqrt{2mU_0/\hbar^2}$

Оператор кулоновского взаимодействия \hat{V} в координатном представлении имеет вид

$$\hat{V} = -\frac{e^2}{\epsilon_s |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}, \quad (4)$$

где \mathbf{r}_e , \mathbf{r}_h – радиусы-векторы электрона и дырки, соответственно; ϵ_s – статическая диэлектрическая проницаемость.

Зависимость энергии кулоновского взаимодействия от радиуса нанокристалла приведена на рис. 4. Как видно из графика, величина прямого кулоновского взаимодействия электрона и дырки сопоставима с энергиями размерного квантования, получаемыми из рассматриваемых независимо уравнений типа (1). Это говорит о том, что разделения

Разделение системы уравнений для дырок и электронов на два независимых уравнения типа (1) не всегда оправдано (см., например, статью [17]); в общем случае дырка и электрон влияют на состояния друг друга и необходимо решать систему уравнений, которые не разделяются на независимые уравнения для электрона и дырки.

Оценим по теории возмущений энергию взаимодействия частиц, находящихся в состояниях (2). Такая оценка позволит установить, можно ли считать их состояния независимыми. Очевидно, что эта энергия будет диагональным матричным элементом кулоновского взаимодействия:

$$E = \langle 1s_e 1s_h | \hat{V} | 1s_e 1s_h \rangle, \quad (3)$$

где $|1s_e 1s_h\rangle$ – вектор основного состояния системы электрона и дырки.

Соответствующая этому вектору волновая функция равна произведению волновых функций основного состояния дырки и электрона.

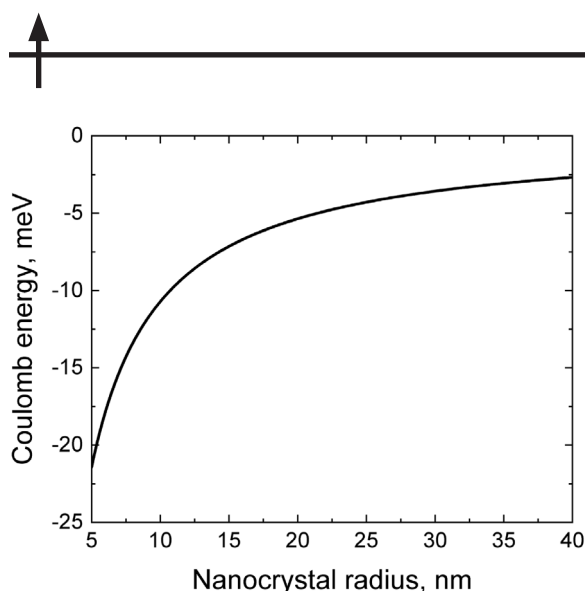


Рис. 4. Зависимость энергии кулоновского взаимодействия дырки и электрона от радиуса нанокристалла

зон. Последний факт говорит о том, что, по всей видимости, необходимо использовать многозонную модель для исследования дырочных состояний. Однако эти вопросы требуют отдельного рассмотрения и выходят за рамки данной статьи.

Электронная структура примесных атомов в нановключениях оксида галлия

Для объемных материалов характерно четкое разделение дефектов на мелкие и глубокие. Это разделение в первую очередь происходит по степени локализации потенциала, который создает этот дефект. Потенциал глубоких центров сильно локализован и действует в области одной элементарной ячейки. Мелкие дефекты, хотя и могут иметь часть потенциала, которая ограничена элементарной ячейкой (так называемый потенциал центральной ячейки [18]), но также всегда имеют и дальнедействующую кулоновскую часть потенциала, поэтому их часто называют кулоновскими центрами. Отсюда следует, что глубокие дефекты почти не меняют структуры создаваемых ими состояний в наноразмерных системах, так как они не «чувствуют» границ НС. В то же время состояния мелких дефектов могут сильно изменяться. Радиусы дискретных локализованных электронных состояний, которые они создают в объемном материале, могут быть порядка или даже больше размеров нановключений, т. е. границы НС, которые создают потенциал конфайнмента, неизбежно следует включать в задачу. В связи с этим нахождение состояний для мелких доноров в НС представляет собой гораздо более важную задачу, чем для глубоких центров.

Рассмотрим, как влияет добавление примесных атомов на электронный и дырочный спектры нанокристаллов оксида галлия. В приближении огибающей функции, при наличии мелкого донора, гамильтониан в уравнении (1) принимает следующий вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, \mathbf{h}), \quad (5)$$

где m – эффективная масса электрона или дырки в изотропном приближении, $U(\mathbf{r})$ – потенциал сферической ямы, $V(\mathbf{r}, \mathbf{h})$ – потенциал донора, который зависит от положения донора в точке с радиусом-вектором \mathbf{h} .

Потенциал примеси содержит два слагаемых:

$$V = V_C + W(\mathbf{r}), \quad (6)$$

где $W(\mathbf{r})$ – короткодействующий потенциал центральной ячейки, зависящий от ближайшего окружения донора; V_C – кулоновская часть потенциала, $V_C = \frac{e_0^2}{\epsilon_s r}$.

Короткодействующий потенциал можно рассчитать, используя диэлектрическую функцию, либо учесть феноменологически, зная положения примесных уровней в объемном материале. В настоящее время информация об уровнях различных донорных примесей довольно неоднозначна. Для кремния [19] можно предположить, что в большинстве случаев уровень слабо отличается от водородоподобного, который имеет значение около 27 мэВ. Для олова же, по разным данным, положение уровня может изменяться от 16 мэВ [20] до 60 мэВ [21], причем концентрации доноров практически равны ($9 \cdot 10^{17}$ и $7 \cdot 10^{17}$ см⁻³, соответственно). Уменьшение энергии донорного уровня по сравнению с водородоподобным связано с делокализацией электрона, ввиду изменения диэлектрической проницаемости или влияния соседних примесей; повышение энергии уровня обычно связано с сильным потенциалом центральной ячейки. Сложность теоретического анализа возникает из-за того, что эти случаи реализуются при почти равных концентрациях. Поэтому в первом приближении пренебрежем потенциалом центральной ячейки и рассчитаем структуру водородоподобного донора.

Вычислим поправку к энергии основного состояния электрона и дырки по теории возмущений, где потенциал возмущения имеет следующий вид:

$$V_C = \pm \frac{e_0^2}{\epsilon_s |\mathbf{r} - \mathbf{h}|}, \quad (7)$$

где \mathbf{h} – радиус-вектор примесного атома.

Знак плюс берется для дырок, так как донор заряжен положительно и дырка отталкивает, знак минус берется для электронов.

Для расчетов были выбраны следующие параметры: радиус нанокристалла $R = 10$ нм, а в качестве волновых функций, по указанным выше причинам, использовались функции бесконечной ямы, и невозмущенные энергии имели значения $E_{1se} \approx 13$ мэВ и $E_{1sh} \approx 1$ мэВ. Графики зависимости поправок к энергии первого порядка для электронов и дырок приведены на рис. 5.

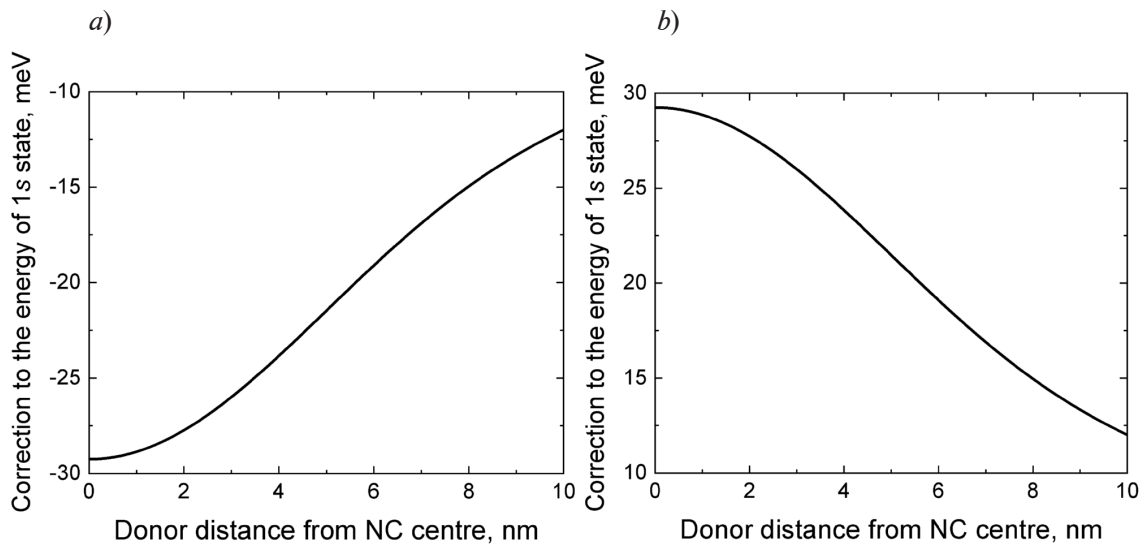


Рис. 5. Зависимости поправок к энергии основного состояния электронов (а) и дырок (б) от положения донора в нанокристалле (NC) (первый порядок теории возмущений)

Из графиков видно, что поправка первого порядка к основному состоянию не является малой величиной, по сравнению с энергией основного состояния, вне зависимости от позиции донора в нанокристалле. Отсюда следует, что потенциал донора нельзя считать малым и это необходимо учитывать конечной суммой ряда теории возмущений. Следовательно, необходимо использовать иной метод расчета спектра.

Подходящим методом расчета энергетических уровней электронов и дырок является вариационный метод Рэлея – Ритца [22]. Стоит отметить, что иные величины, для расчета которых используется волновая функция, могут получаться далекими от действительности, хотя в этом приближении энергетические уровни рассчитываются довольно точно.

Рассмотрим сначала случай донора в центре нанокристалла. По всей видимости, исходя из данных на рис. 5, в этом случае он будет больше всего влиять на электронную структуру. В качестве пробной для основного состояния электрона естественно выбрать функцию, которая будет «похожа» одновременно на функцию сферической ямы и функцию атома водорода. Поэтому пробную волновую функцию выберем в следующем виде:

$$\psi_e = A \frac{\sin \frac{\pi \cdot r}{R}}{r} \exp(-\alpha r), \quad (8)$$

где α , A – константы, при этом α – вариационный параметр; A – константа нормировки.

На рис. 6 показано радиальное распределение уровня энергии основного состояния электрона в нанокристалле с примесным кулоновским донором.

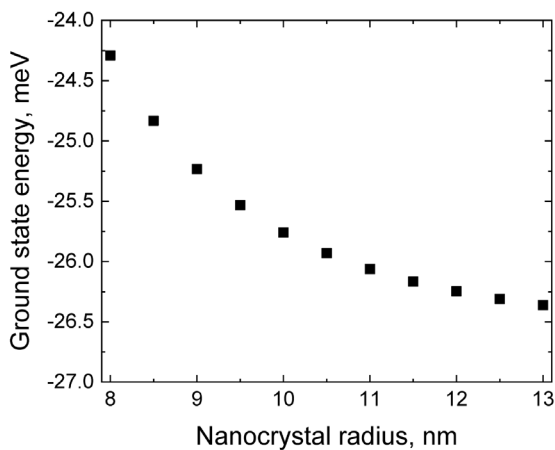


Рис. 6. Радиальная зависимость энергии основного уровня электрона в нанокристалле с примесным кулоновским центром (донором)

Из графика видно, что донорные уровни легированного нанокристалла в случае водородоподобного потенциала слабо отличаются от донорных уровней объемного материала; при этом «радиус» волновой функции $\alpha^{-1} \sim 1$ нм, т. е. донор, как и в объемном материале, образует нейтральную систему довольно малого радиуса, которая почти не будет влиять на оптически возбужденную электронно-дырочную пару. Это следует из сосредоточения плотностей дырки и электрона в состояниях (2) в сферическом слое, радиус которого примерно равен половине радиуса нанокристалла (см. рис. 3), а система, включающая донорный электрон и ион, имеет «эффективный радиус действия» $\alpha \sim 1$ нм. Такой результат позволяет утверждать, что в легированном нанокристалле оксида галлия оптически возбужденная электронно-дырочная пара ведет себя так, как в нанокристалле без допирующей примеси, и ширина оптической щели практически не зависит от легирования нанокристалла.

Важным отличием легированного нанокристалла от нелегированного является присутствие «лишнего» электрона, который имеет высокую (порядка ширины запрещенной зоны) энергию объемного материала уже в основном состоянии, а это значит, что после оптического возбуждения электронно-дырочной пары появляется дополнительный канал рекомбинации, связанный с Оже-процессом. Оже-рекомбинация может играть важную практическую роль в случае применения структур с нанокристаллами оксида галлия при разработке детекторов ультрафиолетового диапазона. Это следует из того, что в нелегированном нанокристалле электрон всегда находится в локализованном состоянии. Ввиду того, что его волновая функция слабо отличается от функции бесконечной ямы, вероятность перескока электрона между нанокристаллами стремится к нулю, т. е. в массивах нанокристаллов, не содержащих примеси, протекание фототока маловероятно.

В противоположность этому, в процессе Оже-рекомбинации электрон может попасть в область непрерывного спектра между уровнем вакуума и дном зоны проводимости диэлектрической матрицы. В этой области энергий волновая функция электрона делокализована и он может успешно перемещаться по всему массиву нанокристаллов, что повлечет за собой возникновение фототока.

Заключение

В настоящей работе была исследована электронная структура нанокристалла $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, легированного мелким донором. Показано, что кулоновский потенциал невозможно рассматривать как малое возмущение, так как он сильно влияет на электронное состояние всей системы, создавая состояние, близкое к примесному для объемного полупроводника.

Использованный в работе подход служит очень хорошим приближением для электронов, так как минимум зоны проводимости – единственный и хорошо отделен от остальных зон по энергиям. В то же время это приближение носит качественный характер для дырок и применимо только для оценки ширины оптической щели.

Дальнейшие исследования следует проводить с учетом многодолинности в многозонной модели и принимать во внимание сильное взаимодействие дырки с оптическими полярными фононами, которое в низкоразмерных системах может значительно усиливаться.

Полученные результаты могут быть использованы при разработке светоизлучающих и фотоприемных устройств на основе нанокристаллов оксида галлия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wang C., Zhang J., Xu S., Zhang C., Feng Q., Zhang Y., Ning J., Zhao S., Zhou H., Hao Y. Progress in state-of-the-art technologies of Ga_2O_3 devices // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2021. Vol. 54. No. 24. P. 243001.
2. Zhang J., Dong P., Dang K., et al. Ultra-wide bandgap semiconductor Ga_2O_3 power diodes // *Nature Communications*. 2022. Vol. 13. July 6. P. 3900.
3. Zhai H., Wu Z., Fang Z. Recent progress of Ga_2O_3 -based gas sensors // *Ceramics International*. 2022. Vol. 48. No. 17. Pp. 24213–24233.
4. Pearton S. J., Yang J., Cary P. H., Ren F., Kim J., Tadjer M. J., Mastro M. A. A review of Ga_2O_3 materials, processing, and devices // *Applied Physics Reviews*. 2018. Vol. 5. No. 1. P. 011301.
5. Nikolskaya A., Okulich E., Korolev D., et al. Ion implantation in $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$: Physics and technology // *Journal of Vacuum Science & Technology A*. 2021. Vol. 39. No. 3. P. 030802.
6. Higashiwaki M. $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ material properties, growth technologies, and devices: A review // *AAPPS (The Association of Asia Pacific Physical Societies) Bulletin*. 2022. Vol. 32. No. 1. P. 3.
7. Zhang J., Shi J., Qi D., Chen L., Zhang K. H. L. Recent progress on the electronic structure, defect, and doping properties of Ga_2O_3 // *APL Materials*. 2020. Vol. 8. No. 2. P. 020906.
8. Frodason Y. K., Krzyzaniak P. P., Vines L., Varley J. B., Van de Walle C. J., Johansen K. M. H. Diffusion of Sn donors in $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ // *APL Materials*. 2023. Vol. 11. No. 4. P. 041121.
9. Wang M., Mu S., Van de Walle C. G. Incorporation of Si and Sn donors in $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ through surface reconstructions // *Journal of Applied Physics*. 2021. Vol. 130. No. 18. P. 185703.
10. Jamwal N. S., Kiani A. Gallium oxide nanostructures: A review of synthesis, properties and applications // *Nanomaterials*. 2022. Vol. 12. No. 12. P. 2061.
11. Rajamani S., Arora K., Belov A., et al. Enhanced solar-blind photodetection performance of encapsulated Ga_2O_3 nanocrystals in Al_2O_3 matrix // *IEEE Sensors Journal*. 2018. Vol. 18. No. 10. Pp. 4046–4052.
12. Korolev D. S., Matyunina K. S., Nikolskaya A. A., et al. Ion-beam synthesis of gallium oxide nanocrystals in a SiO_2/Si dielectric matrix // *Nanomaterials*. 2022. Vol. 12. No. 11. P. 1840.
13. Zhou J., Chen H., Fu K., Zhao Y. Gallium oxide-based optical nonlinear effects and photonics devices // *Journal of Materials Research*. 2021. Vol. 36. No. 23. Pp. 4832–4845.
14. Sigaev V. N., Golubev N. V., Ignat'eva E. S., Paleari A., Lorenzi R. Light-emitting Ga-oxide nanocrystals in glass: A new paradigm for low-cost and robust UV-to visible solar-blind converters and UV emitters // *Nanoscale*. 2014. Vol. 6. No. 3. Pp. 1763–1774.
15. Nguyen K., Radovanovic P. V. Defects and impurities in colloidal Ga_2O_3 nanocrystals: New opportunities for photonics and lighting // *Canadian Journal of Chemistry*. 2022. Vol. 100. No. 1. Pp. 1–8.
16. Yamaguchi K. First principles study on electronic structure of $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ // *Solid State Communications*. 2004. Vol. 131. No. 12. Pp. 739–744.
17. Rebrost P., Stopa M., Aspuru-Guzik A. Förster coupling in nanoparticle excitonic circuits // *Nano Letters*. 2010. Vol. 10. No. 8. Pp. 2849–2856.

18. **Pantelides S. T., Sah C. T.** Theory of localized states in semiconductors. I. New results using an old method // *Physical Review B*. 1974. Vol. 10. No. 2. Pp. 621–637.
19. **Neal A. T., Mou S., Rafique S., et al.** Donors and deep acceptors in β -Ga₂O₃ // *Applied Physics Letters*. 2018. Vol. 113. No. 6. P. 062101.
20. **Oishi T., Harada K., Koga Y., Kasu M.** Conduction mechanism in highly doped β -Ga₂O₃ ($\bar{2}01$) single crystals grown by edge-defined film-fed growth method and their Schottky barrier diodes // *Japanese Journal of Applied Physics*. 2016. Vol. 55. No. 3. P. 030305.
21. **Higashiwaki M., Sasaki K., Kamimura T., Wong M. H., Krishnamurthy D., Kuramata A., Masui T., Yamakoshi S.** Depletion-mode Ga₂O₃ metal-oxide-semiconductor field-effect transistors on β -Ga₂O₃ (010) substrates and temperature dependence of their device characteristics // *Applied Physics Letters*. 2013. Vol. 103. No. 12. P. 123511.
22. **Kohn W., Luttinger J. M.** Theory of donor states in silicon // *Physical Review*. 1955. Vol. 98. No. 4. Pp. 915–922.

REFERENCES

1. **Wang C., Zhang J., Xu S., et al.**, Progress in state-of-the-art technologies of Ga₂O₃ devices, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 54 (24) (2021) 243001.
2. **Zhang J., Dong P., Dang K., et al.**, Ultra-wide bandgap semiconductor Ga₂O₃ power diodes, *Nat. Commun.* 13 (July 6) (2022) 3900.
3. **Zhai H., Wu Z., Fang Z.**, Recent progress of Ga₂O₃-based gas sensors, *Ceram. Int.* 48 (17) (2022) 24213–24233.
4. **Pearton S. J., Yang J., Cary P. H., et al.**, A review of Ga₂O₃ materials, processing, and devices, *Appl. Phys. Rev.* 5 (1) (2018) 011301.
5. **Nikolskaya A., Okulich E., Korolev D., et al.**, Ion implantation in β -Ga₂O₃: Physics and technology, *J. Vac. Sci. Technol. A*. 39 (3) (2021) 030802.
6. **Higashiwaki M.**, β -Ga₂O₃ material properties, growth technologies, and devices: A review, *AAPPS Bul.* 32 (1) (2022) 3.
7. **Zhang J., Shi J., Qi D., et al.**, Recent progress on the electronic structure, defect, and doping properties of Ga₂O₃, *APL Mater.* 8 (2) (2020) 020906.
8. **Frodason Y. K., Krzyzaniak P. P., Vines L., et al.**, Diffusion of Sn donors in β -Ga₂O₃, *APL Mater.* 11 (4) (2023) 041121.
9. **Wang M., Mu S., Van de Walle C. G.**, Incorporation of Si and Sn donors in β -Ga₂O₃ through surface reconstructions. *J. Appl. Phys.* 130 (18) (2021) 185703.
10. **Jamwal N. S., Kiani A.**, Gallium oxide nanostructures: A review of synthesis, properties and applications, *Nanomater.* 12 (12) (2022) 2061.
11. **Rajamani S., Arora K., Belov A., et al.**, Enhanced solar-blind photodetection performance of encapsulated Ga₂O₃ nanocrystals in Al₂O₃ matrix, *IEEE Sens. J.* 18 (10) (2018) 4046–4052.
12. **Korolev D. S., Matyunina K. S., Nikolskaya A. A., et al.**, Ion-beam synthesis of gallium oxide nanocrystals in a SiO₂/Si dielectric matrix, *Nanomater.* 12 (11) (2022) 1840.
13. **Zhou J., Chen H., Fu K., Zhao Y.**, Gallium oxide based optical nonlinear effects and photonics devices, *J. Mater. Res.* 36 (23) (2021) 4832–4845.
14. **Sigaev V. N., Golubev N. V., Ignat'eva E. S., et al.**, Light-emitting Ga-oxide nanocrystals in glass: A new paradigm for low-cost and robust UV – to visible solar-blind converters and UV emitters, *Nanoscale*. 6 (3) (2014) 1763–1774.
15. **Nguyen K., Radovanovic P. V.**, Defects and impurities in colloidal Ga₂O₃ nanocrystals: New opportunities for photonics and lighting, *Can. J. Chem.* 100 (1) (2022) 2022 1–8.
16. **Yamaguchi K.**, First principles study on electronic structure of β -Ga₂O₃, *Solid State Commun.* 131 (12) (2004) 739–744.
17. **Rebentrost P., Stopa M., Aspuru-Guzik A.**, Förster coupling in nanoparticle excitonic circuits, *Nano Lett.* 10 (8) (2010) 2849–2856.
18. **Pantelides S. T., Sah C. T.**, Theory of localized states in semiconductors. I. New results using an old method, *Phys. Rev. B*. 10 (2) (1974) 621–637.
19. **Neal A. T., Mou S., Rafique S., et al.**, Donors and deep acceptors in β -Ga₂O₃, *Appl. Phys. Lett.* 113 (6) (2018) 062101.

20. Oishi T., Harada K., Koga Y., Kasu M., Conduction mechanism in highly doped β -Ga₂O₃ ($\bar{2}01$) single crystals grown by edge-defined film-fed growth method and their Schottky barrier diodes, Jap. J. Appl. Phys. 55 (3) (2016) 030305.

21. Higashiwaki M., Sasaki K., Kamimura T., et al., Depletion-mode Ga₂O₃ metal-oxide-semiconductor field-effect transistors on β -Ga₂O₃ (010) substrates and temperature dependence of their device characteristics, Appl. Phys. Lett. 103 (12) (2013) 123511.

22. Kohn W., Luttinger J. M., Theory of donor states in silicon, Phys. Rev. 98 (4) (1955) 915–922.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

РЕВИН Александр Александрович – младший научный сотрудник лаборатории физики и технологии тонких пленок Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия.

603950, Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23
revinalexandre@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-5701-1171

КОНАКОВ Антон Алексеевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры квантовых и нейроморфных технологий Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия.

603950, Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23
konakov_anton@mail.ru
ORCID: 0000-0001-8850-2651

КОРОЛЕВ Дмитрий Сергеевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников, электроники и нанoeлектроники Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия.

603950, Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23
dmkorolev@phys.unn.ru
ORCID: 0000-0003-1440-2994

THE AUTHORS

REVIN Alexandr A.

National Research Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod
23 Gagarin Ave., Nizhni Novgorod, 603950, Russia
revinalexandre@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-5701-1171

KONAKOV Anton A.

National Research Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod
23 Gagarin Ave., Nizhni Novgorod, 603950, Russia
konakov_anton@mail.ru
ORCID: 0000-0001-8850-2651

KOROLEV Dmitry S.

National Research Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod
23 Gagarin Ave., Nizhni Novgorod, 603950, Russia
dmkorolev@phys.unn.ru
ORCID: 0000-0003-1440-2994

Статья поступила в редакцию 15.04.2024. Одобрена после рецензирования 06.05.2024. Принята 06.05.2024.

Received 15.04.2024. Approved after reviewing 06.05.2024. Accepted 06.05.2024.

Научная статья
УДК 621.383.51
DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17302>

СПЕКТРОСКОПИЯ ПОЛНОЙ ПРОВОДИМОСТИ ГЕТЕРОСТРУКТУР ФОСФИДА БОРА НА КРЕМНИЕВЫХ ПОДЛОЖКАХ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ

А. И. Баранов¹ ✉, Г. Э. Вторьгин¹, А. В. Уваров¹,
А. А. Максимова^{2,1}, Е. А. Вячеславова¹, А. С. Гудовских^{1,2}

¹ Академический университет им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия;

² Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» имени В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

✉ itiomchik@yandex.ru

Аннотация. Проведены исследования слоев фосфида бора ВР и гетеропереходов ВР/*n*-Si, сформированных методом плазмохимического осаждения при температуре 350 °С на подложках *n*-Si с использованием диборана и фосфина. Установлено, что увеличение мощности водородной плазмы позволяет избежать пиннинга уровня Ферми на границе ВР/*n*-Si. Дополнительное разбавление потоком водорода приводило к увеличению проводимости слоя ВР, а поведение вольтамперной характеристики структуры Au/ВР/*n*-Si (золотой электрод) становилось выпрямляющим. Методом спектроскопии полной проводимости были обнаружены поверхностные состояния электронов на границах ВР/*n*-Si во всех образцах и глубокие электронные уровни с энергией 0,58 – 0,65 эВ в слоях ВР, выращенных без дополнительного потока водорода.

Ключевые слова: фосфид бора, плазмохимическое осаждение, спектроскопия полной проводимости, поверхностные состояния

Финансирование: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-10413, <https://rscf.ru/project/21-79-10413/>.

Для цитирования: Баранов А. И., Вторьгин Г. Э., Уваров А. В., Максимова А. А., Вячеславова Е. А., Гудовских А. С. Спектроскопия полной проводимости гетероструктур фосфида бора на кремниевых подложках, полученных методом плазмохимического осаждения // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 17–24. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17302>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17302>

ADMITTANCE SPECTROSCOPY OF BORON PHOSPHIDE HETEROSTRUCTURES GROWN BY PLASMA ENHANCED CHEMICAL VAPOR DEPOSITION ON SILICON SUBSTRATES

A. I. Baranov¹ ✉, G. E. Vtorygin¹, A. V. Uvarov¹,
A. A. Maksimova^{2,1}, E. A. Vyacheslavova^{1,2}, A. S. Gudovskikh^{1,2}

¹ Alferov University, St. Petersburg, Russia;

² Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", St. Petersburg, Russia

✉ itiomchik@yandex.ru

Abstract. The study of BP layers and BP/*n*-Si heterojunctions formed by plasma enhanced chemical deposition on *n*-Si substrates has been carried out at a temperature of 350 °C using diborane and phosphine. The additional enhancement of hydrogen plasma power was established to make it possible to avoid pinning of the Fermi level at the BP/*n*-Si interface. Moreover, additional dilution with a hydrogen flow led to an increase in the BP layer conductivity, and the behavior of the current-voltage characteristic of the Au/BP/*n*-Si structure (golden electrode) became rectifying. Surface states of electrons at the BP/*n*-Si heterojunctions in all the samples and deep electronic levels with energy 0.58–0.65 eV in BP layers grown without the additional hydrogen flow were detected by admittance spectroscopy.

Keywords: boron phosphide, plasma enhanced chemical vapor deposition, admittance spectroscopy, interface states

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 21-79-10413, <https://rscf.ru/project/21-79-10413/>).

For citation: Baranov A. I., Vtorygin G. E., Uvarov A. V., Maksimova A. A., Vyacheslavova E. A., Gudovskikh A. S., Admittance spectroscopy of boron phosphide heterostructures grown by plasma enhanced chemical vapor deposition on silicon substrates, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 17–24. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17302>

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

Введение

В настоящее время идет активный поиск новых полупроводниковых материалов для замены аморфного кремния, который служит в качестве эмиттера в солнечных элементах на подложках монокристаллического кремния. В работе [1] теоретически было показано, что фосфид бора BP является одним из наиболее перспективных бинарных соединений для создания эмиттера *p*-типа к кремниевым подложкам *n*-Si, поскольку является непрямозонным, а также обладает большим различием между энергиями непрямого (2 эВ) и прямого (4 эВ) переходов, что приводит к большому разрыву зоны проводимости на гетеропереходе *p*-BP/*n*-Si и создает предпосылки для формирования селективного контакта для дырок. Опубликовано всего несколько работ по выращиванию BP плазмохимическими и эпитаксиальными методами [2 – 4], причем в них исследовали исключительно структурные свойства слоев.

В нашей предыдущей работе [5] были изучены электрофизические свойства слоев BP, выращенных методом плазмохимического осаждения в температурном интервале 250 – 350 °C; для них было установлено значительное встраивание атомов углерода при использовании триметилбора как источника бора. Для структур на основе этих слоев наблюдался пиннинг уровня Ферми на гетерогранице BP/*n*-Si. По этой причине, в последующих экспериментах в качестве источника бора был использован диборан [6], что позволило добиться увеличения оптической ширины запрещенной зоны BP до 1,9 эВ. При этом в спектрах комбинационного рассеяния объекта отсутствовали пики, отвечающие углероду, что указывало на его аморфизацию [7].

Цель настоящей работы – представить результаты изучения и анализ электрофизических свойств слоев фосфида бора и гетеропереходов BP /*n*-Si на их основе, выращенных с использованием диборана и фосфина.

Экспериментальная часть

Создание структур. Осаждение слоев BP было проведено в установке плазмохимического осаждения Oxford PlasmaLab 100 PECVD (13,56 МГц), снабженной линиями фосфина PH₃ и диборана B₂H₆, служащими источниками атомов фосфора и бора, соответственно. Использовались 100%-й газ фосфин PH₃ и 2%-я газовая смесь диборана в водороде (B₂H₆/H₂). Слои фосфида бора осаждались на трехдюймовые полированные подложки монокристаллического кремния толщиной 380 мкм.

Эти подложки были изготовлены методом Чохральского, были легированы фосфором и обладали удельным электрическим сопротивлением 5 – 10 Ом·см. Непосредственно перед загрузкой в рабочую камеру подложки кремния обрабатывали в 10%-м водном растворе плавиковой кислоты ($\text{HF}/\text{H}_2\text{O}$) для снятия естественного оксида. Слои фосфида бора осаждались при фиксированной температуре 350 °С и одинаковом давлении 1000 мТорр при соотношении потоков газовой смеси и газа $\text{B}_2\text{H}_6/\text{H}_2 : \text{PH}_3 = 2 : 1$ в течение 20 мин с разной мощностью плазмы (20 и 200 Вт) и дополнительным разбавлением водородом (100 см³/мин) (см. таблицу). Полученные значения толщины выращенных слоев также представлены в таблице.

Таблица

Условия выращивания и значения толщины выращенных слоев фосфида бора

Процесс	Разбавление газом H_2	Мощность плазмы, Вт	Толщина, нм
I	He использовалось	20	285
II		200	276
III	100 см ³ /мин	200	360

Примечание. Температура выращивания слоев составляла 350 °С, давление – 1000 мТорр.

На тыльной стороне подложки кремния был сформирован омический контакт путем осаждения тонкого (5 нм) высоколегированного слоя фосфида галлия *n*-GaP с последующим термическим напылением серебра Ag в установке ВОС Edwards Auto500. На лицевую сторону образцов фосфида бора было термически нанесено золото Au через маску с отверстиями диаметром 1 мм для формирования барьера Шоттки.

Измерения. Вольтамперные характеристики образцов были зарегистрированы при комнатной температуре с использованием прецизионного источника-измерителя Keithley 2400.

Измерения спектроскопии полной проводимости были проведены с помощью прецизионного RLC-метра Keysight E4980A-001 на частотах от 20 Гц до 2 МГц с амплитудой тестового сигнала 50 мВ в гелиевом криостате замкнутого цикла Janis CCS-400H/204 в температурном диапазоне от 40 до 400 К.

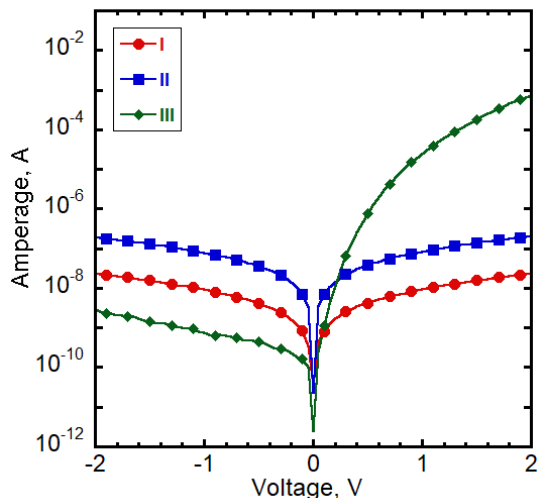


Рис. 1. Вольтамперные характеристики образцов структуры Au/BP/*n*-Si, выращенных при разных условиях (см. таблицу)

Результаты и их обсуждение

Полученные темновые вольтамперные характеристики (ВАХ) показаны на рис. 1. Анализ этих зависимостей позволяет заключить, что слои, которые выращивали без разбавления водородом, демонстрируют симметричные графики при прямом и обратном напряжениях смещения, причем проводимость слоя фосфида бора возрастает при повышении мощности плазмы с 20 до 200 Вт. Добавление в газовую смесь потока водорода 100 см³/мин приводит к тому, что на ВАХ наблюдается выпрямляющий эффект: при наложении положительного потенциала возникает экспоненциальный рост тока

через образец, а отрицательного – слабый ток, что свидетельствует о существовании области пространственного заряда на границе раздела золотого электрода и фосфида бора (Au/BP), что обусловлено наличием потенциального барьера.

Ранее в работе [8] было показано, что полученные слои обладают донорным типом проводимости. Такой результат позволил провести измерения вольтфарадных характеристик при разных температурах. Согласно полученным данным, емкость образца, выращенного в плазме с низкой мощностью, слабо зависит от приложенного напряжения в диапазоне от -20 до $+20$ В при различных температурах. Это связано с тем, что ширина области пространственного заряда в кремнии не изменяется при варьировании напряжения вследствие пиннинга уровня Ферми; пиннинг формируется ввиду большой концентрации дефектов на гетерогранице. Аналогичное явление наблюдалось нами ранее для тонких слоев BP, выращенных с прекурсором триметилбора при различных параметрах плазмы [5]. Однако при выращивании структуры с использованием диборана удалось провести профилирование структуры Au/BP/*n*-Si, благодаря повышению мощности плазмы до 200 Вт и разбавлению водородом газовых потоков. Установлено, что при низких значениях температуры (менее 100 К) область пространственного заряда распространяется на кремниевую подложку, если приложить обратное смещение ($V \leq 0$ В). По мере повышения температуры величина обратного напряжения, при котором начинается профилирование кремния, растет, и при комнатной температуре следует прикладывать гораздо большие отрицательные напряжения (ниже -4 В), чем при температуре 100 К. Такое поведение зависимости может быть связано с наличием дефектов в слоях фосфида бора и на границах раздела BP/*n*-Si. Полученные данные указывали на целесообразность измерений методом спектроскопии полной проводимости; последняя позволяет детектировать дефекты такого типа.

На рис. 2 представлены зарегистрированные спектры емкость – частота для всех образцов при нулевом постоянном смещении. Наблюдаемые ступени емкости означают дополнительный вклад в емкость образца. Этот вклад может быть обусловлен откликом с точечного дефектного уровня или обменом носителями на поверхностных состояниях, сформированных на гетерограницах BP/Si.

В образцах, выращенных при 200 Вт, наблюдается подобная серия ступеней в диапазоне 100 – 180 К, которая отвечает отклику с энергией активации 0,19 и 0,17 эВ для образцов, выращенных с разбавлением водородом (см. рис. 2, *c*), и без разбавления (см. рис. 2, *b*), соответственно. Кроме того, установлено, что при увеличении амплитуды приложенного обратного смещения (от -1 до -4 В) ступень емкости смещается в сторону больших частот при одной и той же температуре. Это и приводит при значении смещения -4 В к увеличению расчетной энергии активации этого отклика: до 0,82 и 0,46 эВ для образцов, выращенных с разбавлением водородом, и без разбавления, соответственно (данные на рис. 2 не представлены).

Зависимость энергии активации от напряжения свидетельствует об отклике от поверхностных состояний на гетерогранице BP/Si. Согласно результатам компьютерного моделирования, выполненного в среде AFORS-НЕТ, отклик связан в данном случае с переходом электронов с поверхностных состояний в зону проводимости кремния: когда прикладывается обратное напряжение смещения, квазиуровень Ферми сдвигается в сторону середины запрещенной зоны, что приводит к повышению энергии перехода. Полученный результат объясняет наблюдаемые ранее температурные зависимости вольтфарадных характеристик [8]. При низких температурах изотипный гетеропереход Au/BP/*n*-Si характеризуется классическим поведением, где слой BP является полностью обедненным из-за слабого легирования. При $V_{DC} = 0$ В, область пространственного заряда распространяется на кремний, а при обратном напряжении смещения происходит профилирование концентрации носителей заряда в кремниевой подложке. Расчетная зонная диаграмма структуры Au/BP/*n*-Si при 100 К показана на рис. 3, *a*. Однако при увеличении температуры поверхностные состояния вызывают появление дополнительного заряда на гетерогранице BP/*n*-Si, что приводит к изменению формы изгиба зон. Это изменение, в свою очередь, требует приложения большей амплитуды обратного смещения для обеднения области кремния на границе с фосфидом бора при определенной тестовой частоте (зонная диаграмма при 300 К представлена на рис. 3, *b*).

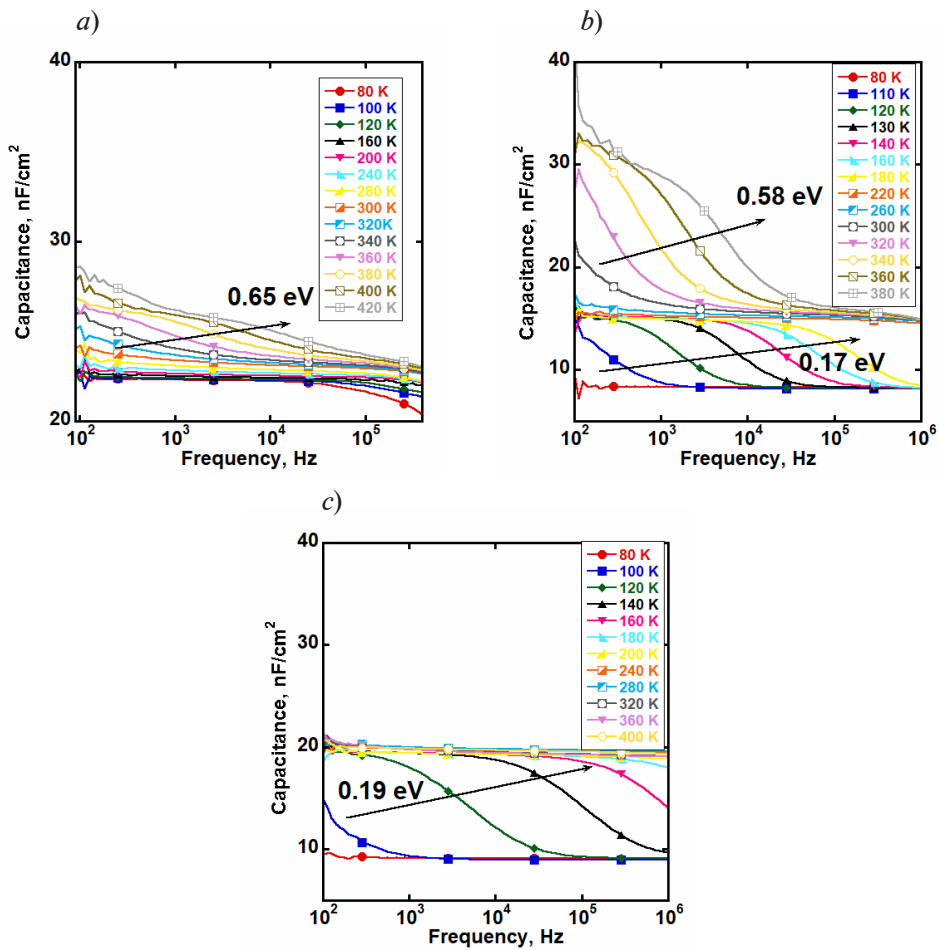


Рис. 2. Частотные зависимости емкости образцов I (a), II (b), III (c) структуры Au/BP/n-Si (см. таблицу) для разных значений температуры, при постоянном нулевом смещении.

Показаны значения энергии активации откликов; энергии глубоких уровней $E_a = 0,17 - 0,19$ эВ и $E_a = 0,58 - 0,65$ эВ

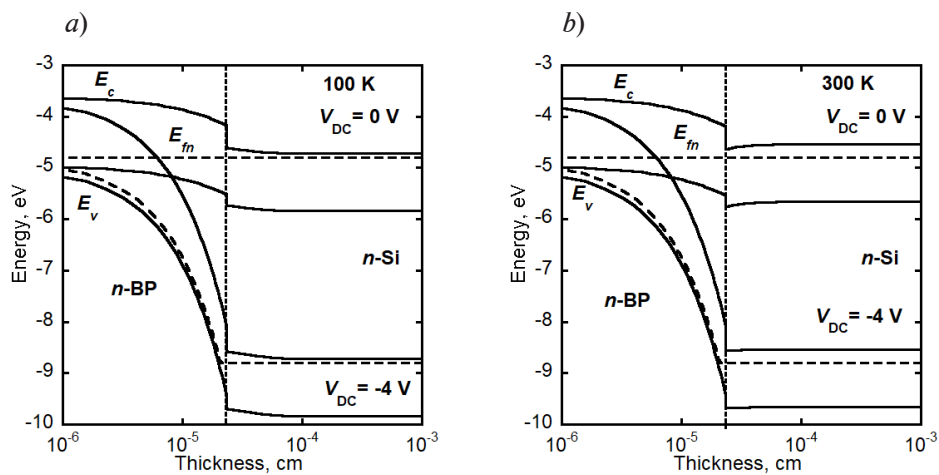


Рис. 3. Зонные диаграммы гетероперехода Au/BP/n-Si при 100 К (a) и 300 К (b) при разных значениях смещения V_{DC} (при наличии поверхностных состояний на границе BP/n-Si).

Представлены энергетические положения дна зоны проводимости E_c , квазиуровня Ферми для электронов E_{fn} и потолка валентной зоны E_v

В обоих образцах, выращенных без дополнительного потока водорода, был детектирован высокотемпературный дефект с энергиями активации 0,65 и 0,58 эВ для процессов с мощностью плазмы 20 и 200 Вт соответственно. При этом значения не зависят от приложенного постоянного напряжения смещения, в отличие от откликов, описанных выше; следовательно обнаруженный дефект связан с дефектным уровнем в слое фосфида бора. Поскольку изучение дефектов в слоях ВР емкостными методами проведено впервые, его природа неизвестна на данный момент, однако резонно предположить, что он является глубоким уровнем, связанным со структурными свойствами слоя, чему будут посвящены будущие эксперименты.

Заключение

Впервые емкостными методами были исследованы гетеропереходы ВР/*n*-Si, полученные методом плазмохимического осаждения слоев фосфида бора ВР с потоками диборана и фосфина. Использование диборана вместо триметилбора в качестве источника бора позволило избавиться от пиннинга уровня Ферми на гетерогранице ВР/*n*-Si при увеличении мощности плазмы с 20 до 200 Вт. Устранение пиннинга обусловлено отсутствием паразитного встраивания углерода в структуру и улучшением стехиометрического состава ВР, а введение дополнительного потока водорода для разбавления газовой смеси увеличило проводимость слоя *n*-ВР. Тем не менее, на границе ВР/*n*-Si формируются поверхностные состояния (обнаружены методом спектроскопии полной проводимости); их наличие генерирует появление дополнительного заряда на границе при комнатной температуре, поэтому необходимо прикладывать гораздо большие обратные напряжения для распространения обедненной области на подложку кремния. Кроме того, в слоях фосфида бора, выращенных без дополнительного потока водорода, обнаружены глубокие уровни с энергиями $E_a = 0,58 - 0,65$ эВ.

Таким образом, оптимальным является рост слоев фосфида бора с потоком диборана при большой мощности плазмы (200 Вт) и с дополнительным разбавлением водородом (значение потока – 100 см³/мин), так как это обеспечивает меньшее дефектообразование в слоях фосфида бора и на границе ВР/*n*-Si.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Varley J. B., Miglio A., Ha V.-A., van Setten M. J., Rignanese G.-M., Hautier G. High-throughput design of non-oxide *p*-type transparent conducting materials: Data mining, search strategy, and identification of boron phosphide // *Chemistry of Materials*. 2017. Vol. 29. No. 6. Pp. 2568–2573.
2. Ogwu A. A., Hellwig T., Haddow D. Fracture and yield behaviour of wear and erosion resistant boron phosphide coatings for aerospace and automotive applications // *Archives of Materials Science and Engineering*. 2015. Vol. 75. No. 1. Pp. 30–34.
3. Nishimura S., Hanamoto H., Terashima K., Matsumoto S. Growth of GaN on Si(100) substrates using BP as a buffer layer – selective epitaxial growth // *Materials Science and Engineering B*. 2002. Vol. 93. No. 1–3. Pp. 135–138.
4. Padavala B., Frye C. D., Wang X., Raghobamachar B., Edgar J. H. CVD growth and properties of boron phosphide on 3C-SiC // *Journal of Crystal Growth*. 2016. Vol. 449. 1 September. Pp. 15–21.
5. Maksimova A. A., Uvarov A. V., Baranov A. I., et al. Investigation of plasma deposited boron phosphide and its contact to silicon // *ACS Applied Energy Materials*. 2022. Vol. 5. No. 5. Pp. 5367–5373.
6. Maksimova A. A., Uvarov A. V., Pozdeev V. A., Kirilenko D. A., Baranov A. I., Vyacheslavova E. A., Gudovskikh A. S. Boron phosphide grown by PECVD and its optical properties // *St. Petersburg Polytechnic University Journal. Physics and Mathematics*. 2023. Vol. 16. No. 3.2. Pp. 273–277.
7. Максимова А. А., Уваров А. В., Вячеславова Е. А., Баранов А. И., Гудовских А. С. Разработка технологии плазмохимического осаждения фосфида бора при низкой температуре // *Физика твердого тела*. 2023. Т. 16. № 12. С. 2198–2200.
8. Vtorygin G. E., Baranov A. I., Uvarov A. V., Maksimova A. A., Vyacheslavova E. A. Capacitance-voltage characterization of BP layers grown by PECVD mode // *St. Petersburg Polytechnic University Journal. Physics and Mathematics*. 2023. Vol. 16. No. 3.1. Pp. 473–478.



REFERENCES

1. Varley J. B., Miglio A., Ha V.-A., et al., High-throughput design of non-oxide *p*-type transparent conducting materials: Data mining, search strategy, and identification of boron phosphide, *Chem. Mater.* 29 (6) (2017) 2568–2573.
2. Ogwu A. A., Hellwig T., Haddow D., Fracture and yield behaviour of wear and erosion resistant boron phosphide coatings for aerospace and automotive applications, *Arch. Mater. Sci. Eng.* 75 (1) (2015) 30–34.
3. Nishimura S., Hanamoto H., Terashima K., Matsumoto S., Growth of GaN on Si(100) substrates using BP as a buffer layer – selective epitaxial growth, *Mater. Sci. Eng. B.* 93 (1–3) (2002) 135–138.
4. Padavala B., Frye C. D., Wang X., et al., CVD growth and properties of boron phosphide on 3C-SiC, *J. Cryst. Growth.* 449 (1 Sept) (2016) 15–21.
5. Maksimova A. A., Uvarov A. V., Baranov A. I., et al., Investigation of plasma deposited boron phosphide and its contact to silicon, *ACS Appl. Energy Mater.* 5 (5) (2022) 5367–5373.
6. Maksimova A. A., Uvarov A. V., Pozdeev V. A., et al., Boron phosphide grown by PECVD and its optical properties, *St. Petersburg Polytechnic University Journal. Physics and Mathematics.* 16 (3.2) (2023) 273–277.
7. Maksimova A. A., Uvarov A. V., Vyacheslavova E. A., et al., Development of technology for plasma-enhanced chemical vapor deposition of boron phosphide at low temperatures, *Phys. Solid State.* 16 (12) (2023) 2107–2109.
8. Vtorygin G. E., Baranov A. I., Uvarov A. V., et al., Capacitance-voltage characterization of BP layers grown by PECVD mode, *St. Petersburg Polytechnic University Journal. Physics and Mathematics.* 16 (3.1) (2023) 473–478.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БАРАНОВ Артем Игоревич – *PhD*, младший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета им. Ж. И. Алфёрова, РАН, Санкт-Петербург, Россия

194021, Россия, Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
itiomchik@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-4894-6503

ВТОРЫГИН Георгий Эдуардович – студент Академического университета им. Ж. И. Алфёрова, РАН, Санкт-Петербург, Россия

194021, Россия, Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
piespogany@gmail.com
ORCID: 0009-0008-5149-0157

УВАРОВ Александр Вячеславович – младший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета им. Ж. И. Алфёрова, РАН, Санкт-Петербург, Россия

194021, Россия, Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
lumenlight@mail.ru
ORCID: 0000-0002-0061-6687

МАКСИМОВА Алина Андреевна – аспирантка, ассистент кафедры фотоники Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» имени В. И. Ульянова (Ленина); младший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

197376, Россия, г. Санкт Петербург, ул. Профессора Попова, 5
deer.blackgreen@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-3503-7458

ВЯЧЕСЛАВОВА Екатерина Александровна – аспирантка, младший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета им. Ж. И. Алфёрова, РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
cate.viacheslavova@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-6869-1213

ГУДОВСКИХ Александр Сергеевич — доктор технических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета им. Ж. И. Алфёрова, профессор кафедры фотоники Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» имени В. И. Ульянова (Ленина), РАН, Санкт-Петербург, Россия
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
gudovskikh@spbau.ru
ORCID: 0000-0002-7632-3194

THE AUTHORS

BARANOV Artem I.

Alferov University
8/3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia
itiomchik@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-4894-6503

VTORYGIN Georgii E.

Alferov University
8/3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia
piespogany@gmail.com
ORCID: 0009-0008-5149-0157

UVAROV Alexander V.

Alferov University
8/3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia
lumenlight@mail.ru
ORCID: 0000-0002-0061-6687

MAKSIMOVA Alina A.

*St. Petersburg Electrotechnical University "LETI",
Alferov University*
5 Professor Popov St., St. Petersburg, 197376, Russia
deer.blackgreen@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-3503-7458

VYACHESLAVOVA Ekaterina A.

Alferov University
8/3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia
cate.viacheslavova@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-6869-1213

GUDOVSKIKH Alexander S.

*Alferov University,
St. Petersburg Electrotechnical University "LETI"*
8/3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia
gudovskikh@spbau.ru
ORCID: 0000-0002-7632-3194

*Статья поступила в редакцию 03.05.2024. Одобрена после рецензирования 21.05.2024.
Принята 21.05.2024.
Received 03.05.2024. Approved after reviewing 21.05.2024. Accepted 21.05.2024.*

Научная статья

УДК 535.015

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17303>

СОЗДАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ИЗОЛИРОВАННЫХ МИКРОРЕЗОНАТОРОВ GaP(NAs) НА КРЕМНИИ

Л. Н. Дворецкая¹ ✉, А. М. Можаров¹, С. Д. Комаров³,
Е. А. Вячеславова¹, Э. И. Моисеев³, В. В. Федоров^{2, 1}, И. С. Мухин²

¹ Академический университет им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия;

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия;

³ НИУ «Высшая школа экономики» (Санкт-Петербургский филиал),
Санкт-Петербург, Россия;

✉ Liliyabutler@gmail.com

Аннотация. В статье представлена технология формирования оптических микрорезонаторов, основанных на системе полупроводниковых материалов GaP(NAs) на кремниевой подложке. Впервые разработан режим плазмохимического травления, при котором достигается аспектное соотношение 5:1 при травлении слоев, состоящих из элементов III – V групп, и низкая шероховатость боковых стенок. Предложен технологический подход, обеспечивающий оптическое разделение микрорезонатора с кремниевой подложкой, что важно для эффективной локализации света в фотонной структуре. Проведенные оптические исследования и численный расчет показали наличие модуляций в спектрах микрофотолюминесценции микроструктур; модуляции обусловлены возникновением резонансов Фабри – Перо. Выполненное исследование является важным шагом в развитии технологии создания и применения комбинированных структур с оптическими волноводами на кремниевой основе.

Ключевые слова: оптический микрорезонатор GaP(NAs) на кремнии, плазмохимическое травление, спектр микрофотолюминесценции

Финансирование. Автор статьи Л. Н. Дворецкая благодарна за финансовую поддержку Российского научного фонда (грант № 23-72-01133) при фабрикации микроструктур; автор И. С. Мухин благодарен за финансовую поддержку Санкт-Петербургского научного фонда (грант № 23-РБ-02-08) при выполнении моделирования; автор Э. И. Моисеев благодарен за финансовую поддержку НИУ «Высшая школа экономики» (Санкт-Петербургский филиал, Программа фундаментальных исследований вуза) при выполнении оптических измерений.

Для цитирования: Дворецкая Л. Н., Можаров А. М., Комаров С. Д., Вячеславова Е. А., Моисеев Э. И., Федоров В. В., Мухин И. С. Создание оптических изолированных микрорезонаторов GaP(NAs) на кремнии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 25–35. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17303>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17303>

CREATION OF OPTICAL ISOLATED GaP(NAs) MICROCAVITIES ON SILICON

L. N. Dvoretckaia ¹ ✉, A. M. Mozharov ¹, S. D. Komarov ³,
E. A. Vyacheslavova ¹, E. I. Moiseev ³, V. V. Fedorov ^{2, 1}, I. S. Mukhin ²

¹ Alferov University, St. Petersburg, Russia;

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

³ National Research University Higher School of Economics,
St. Petersburg branch, St. Petersburg, Russia

✉ Liliyabutler@gmail.com

Abstract. This article presents the technology for the formation of optical microcavities based on the GaP(NAs) semiconductor material system on silicon. For the first time, a plasma etching mode which ensures the achievement of an aspect ratio of 5:1 and low roughness of the side walls has been proposed in etching layers of III–V groups. A technological approach was also put forward to ensure optical separation of the microcavity with the Si substrate, that being important for efficient localization of light in the photonic structure. The optical studies and numerical calculation showed the presence of modulations in the micro-photoluminescence spectra of microstructures caused by the appearance of Fabry – Perot resonances. This research is an important step in the development of the technology of creation and application of combined structures with silicon-based optical waveguides.

Keywords: optical GaP(NAs) microcavity on Si, plasma etching, micro-photoluminescence spectrum

Funding: The author of this article, L. N. Dvoretckaia, is grateful for financial support from the Russian Science Foundation (Grant No. 23-72-01133) in fabrication of microstructures; the author I. S. Mukhin is grateful for financial support from the St. Petersburg Science Foundation (Grant No. 23-RB-02-08) in performing simulation; the author E. I. Moiseev is grateful for financial support from Higher School of Economics (St. Petersburg branch, The Higher School of Economics Fundamental Research Program) in performing optical measurements.

For citation: Dvoretckaia L. N., Mozharov A. M., Komarov S. D., Vyacheslavova E. A., Moiseev E. I., Fedorov V. V., Mukhin I. S., Creation of optical isolated GaP(NAs) microcavities on silicon, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 25–35. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17303>

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

Введение

Дальнейшее планомерное развитие вычислительных систем замедляется ограниченностью пропускной способности традиционных систем передачи информации по металлическим проводникам. В связи с этим особый интерес в области микроэлектроники представляют системы, обеспечивающие альтернативный способ передачи информации, например, в виде оптических сигналов. Интеграция фотоники и микроэлектроники обсуждается уже в течение последних 30 лет; за это время показана возможность соединения технологий создания комплементарных МОП-структур (КМОП) и высокоскоростных оптических источников, что позволит увеличить скорость внутрочиповой обработки и передачи информации, а также повысит долговечность и компактность устройств [1].

Использование соединений IV группы (кремний Si и германий Ge) для создания светоизлучающих структур и фотодиодов на кремнии были в основном мотивированы их



совместимостью с КМОП-платформой [2]. При этом ни одна из этих разработок пока не продемонстрировала реализацию эффективного светоизлучающего устройства, что связано с ограниченной возможностью излучения света такими материалами [3, 4]. В свою очередь, большинство химических элементов III – V групп обладают прямозонной полупроводниковой структурой, что обеспечивает создание тонкопленочных светодиодов, эффективных микроскопических фотоэлементов, лазерных структур и др.

Недостатком приборов на основе элементов III – V групп является высокая стоимость материала подложек на основе арсенида галлия GaAs и фосфида индия InP, и при этом значительная его часть теряется в процессе изготовления устройства. Кроме того, диаметры производимых подложек GaAs и InP не превышают 150 и 100 мм, соответственно; тогда как стандартный диаметр подложек из кремния или из кремния на изоляторе составляет на сегодняшний день (для сравнения) 450 мм.

В свою очередь, для снижения стоимости конечных транзисторных, фотонных или оптоэлектронных элементов необходимо увеличивать диаметр используемых подложек, что пока технологически недоступно для пластин, изготавливаемых из материалов на основе элементов III – V групп.

Один из способов реализации оптоэлектронных устройств на кремнии – это прямое формирование полупроводниковой структуры III – V групп на кремниевой подложке. Такое выращивание в принципе обеспечивает низкую стоимость и надежный способ интеграции оптоэлектронных элементов на кремнии [5]. При этом возникает новая проблема: в эпитаксиальном слое возникают дислокации, вызванные различием кристаллических решеток выращиваемой структуры и кремниевой подложки, а это может приводить к отсутствию работоспособности всего оптического элемента.

Чтобы обойти указанное ограничение, разрабатывают технологии по введению различных буферных слоев [6, 7] или текстурированию кремниевой подложки [8 – 11] для эффективной релаксации упругих напряжений; релаксация обеспечивает синтез качественных эпитаксиальных слоев. Так например, в работе [12] удалось добиться снижения плотности дислокаций в слое GaAs до уровня $2,4 \cdot 10^7 \text{ см}^{-2}$ за счет использования комбинации последовательного синтеза буферных слоев и термического отжига. Это позволило создать эффективную светодиодную структуру, работающую в красной спектральной области. В статье [13] представлены результаты успешного создания микродискового резонатора на нитриде галлия GaN, синтезированного на кремнии, и продемонстрирована лазерная генерация в УФ-области спектра при импульсной лазерной накачке полупроводниковой структуры.

Важным частным случаем прямого формирования слоев структур III – V групп на кремнии является использование системы материалов GaP/GaP(NAs), что позволяет полностью решить проблему рассогласования параметров кристаллических решеток между синтезируемыми слоями и кремнием. Вопреки тому, что GaP является непрямозонным полупроводником, добавление всего 0,5 мол.% азота делает данный материал прямозонным [14], а 2%-й состав уже оказывается согласованным с кристаллической решеткой кремния и имеет ширину запрещенной зоны около 2 эВ.

Одновременное добавление атомов азота и мышьяка позволяет контролируемо снижать ширину запрещенной зоны полупроводникового материала вплоть до значения примерно 1,5 эВ, и при этом сохранять решеточное согласование с кремнием.

На сегодняшний день исследователям удалось значительно повысить качество эпитаксиально-синтезированного соединения GaP(NAs) на подложке Si, что позволило создать на его основе светодиодные и фоточувствительные элементы [15, 16] и даже добиться лазерной генерации в структурах с квантовыми ямами [17, 18]. Одним из существенных преимуществ системы материалов GaP/GaP(NAs) является возможность использования непрямозонного полупроводника GaP, что позволяет изготавливать волноводы или резонаторные структуры на его основе [19].

Общей проблемой создания фотонных структур на кремнии считается низкая локализация света в резонаторе и поглощение оптической моды подложкой. Возможное решение данной проблемы – это формирование пустот между ним и фотонными элементами GaP/GaP(NAs), которые можно создавать, например, путем удаления подложки под участками фотонной схемы (через вытравливание).

В данной работе представлены результаты по развитию технологии изготовления микродисковых резонаторов на основе системы материалов GaP(NAs), синтезированных на подложке кремния Si, и изучены оптические свойства полученных структур.

Экспериментальная часть

Исследуемая гетероструктура GaP/GaP(NAs) с толщинами слоев 500/900/200 нм была синтезирована на кремниевой подложке с использованием метода молекулярно-пучковой эпитаксии на установке Veeco GEN III.

Состав твердого раствора	
активной области гетероструктуры, %	
P	82,0
As	14,5
N	$2,6 \pm 3,0$

Выбранный состав соответствует ширине запрещенной зоны 1,83 эВ. Детальное описание процесса синтеза и характеристики эпитаксиальных слоев представлено в работе [20].

Изготовление оптических структур. Процесс изготовления состоял из нескольких этапов.

На первом этапе методом контактной оптической литографии проводилось формирование микрорисунка из фоторезиста AZ1518 с использованием установки контактной фотолитографии SUSS MJB4. Диаметр микроструктур варьировался в диапазоне 6 – 40 мкм.

На втором этапе проводилось плазмохимическое криотравление слоев синтезированной гетероструктуры на установке Oxford Instruments Plasmalabsystem 100 ICP, позволяющей осуществлять независимое управление концентрацией активных ионов за счет формирования индуктивно-связанной плазмы и их направленного перемещения. Для достижения оптимальных условий травления проводилась вариация параметров процесса. Параметры травления указаны в таблице.

На всех этапах изготовления гетероструктур GaP/GaP(NAs)/GaP их видоизменение контролировалось с помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) на оборудовании Zeiss Supra.

Таблица

Исследованные режимы травления гетероструктуры GaP/GaP(NAs)/GaP

Параметр технологии	Значение параметра для структуры			
	I	II	III	IV
Температура, °C	-20		-70	-20
Мощность ICP, Вт	1000			
Вытягивающая мощность, Вт	30	100		
Давление, мТорр	5			
Соотношение потоков BCl_3/Cl_2	40 : 5			
Время процесса, мин	6			

Оптическая характеристика сформированных структур. Эта работа проводилась с использованием метода микрофотолюминесценции (мкФЛ). Измерительная схема включала объектив, используемый как для фокусировки лазерного излучения накачки, так и сбора визуальной и спектральной информации. Для картирования спектров мкФЛ в разных областях образца объектив монтировался на трехкоординатном столе с возможностью перемещения с точностью не хуже 300 нм. В данной схеме образец монтировался неподвижно на медный теплоотвод и размещался в криостате для поддержания постоянной температуры. Для осуществления оптической накачки полупроводниковой структуры был использован непрерывный твердотельный лазер Snioptics с длиной волны 457 нм.

Все измерения мкФЛ проводились при комнатной температуре (300 K).

Результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлены изображения сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) микродисковых структур после травления. Анализ СЭМ-изображений позволяет сделать вывод, что используемые технологические режимы обеспечивают травление слоев гетероструктуры, обладая при этом высоким уровнем селективности к кремниевой подложке. Можно отметить, что травление при выбранных базовых параметрах (см. таблицу, структура I) демонстрирует существенную эрозию боковых стенок полупроводникового материала и фоторезиста (см. рис. 1, *a*), что может быть связано с недостаточной направленностью процесса травления. Повышение вытягивающей мощности (структура II) приводило к уменьшению эрозии боковых стенок резиста и улучшению качества боковых стенок структуры при сохранении их вертикальности (см. рис. 1, *b*). При этом все еще отмечалась существенная шероховатость боковой поверхности полупроводниковой структуры после травления, а также уменьшение остаточной толщины фоторезиста по сравнению со структурой I, что указывало на недостаточную устойчивость фоторезиста. Для оптимизации режимов травления структуру дополнительно охлаждали до -70°C при сохранении остальных параметров (структура III). На рис. 1, *c* видно, что данный шаг обеспечил уменьшение как вертикальной, так и боковой эрозии фоторезиста, а также повышение качества боковой поверхности структуры. В свою очередь, при выбранном режиме травления наблюдалось ухудшение вертикальности боковых стенок, что относится к негативным факторам при изготовлении дисковых резонаторов.

Другим подходом к повышению стойкости фоторезиста является его термическое за-дубливание, при котором происходит сшивка химических связей в резисте и его полимеризация. Для обеспечения сшивки была проведена термическая обработка проявленного резиста при температуре 150°C в течение 2 мин, после чего травление структуры было выполнено по режиму, аналогичному режиму для структуры II. СЭМ-изображение структуры после травления представлено на рис. 1, *d*. Если сравнивать полученный результат с таковым для структуры II, то можно отметить повышение качества боковой поверхности полупроводниковой структуры при сохранении высокой вертикальности стенок. При этом важно отметить уменьшение латеральных размеров структуры, что связано с изменением формы фоторезистивной маски после процедуры отжига.

С учетом возможности коррекции размеров на этапе литографии, а также достижения высокого качества структуры боковой поверхности, образец IV был использован в дальнейшем технологическом процессе.

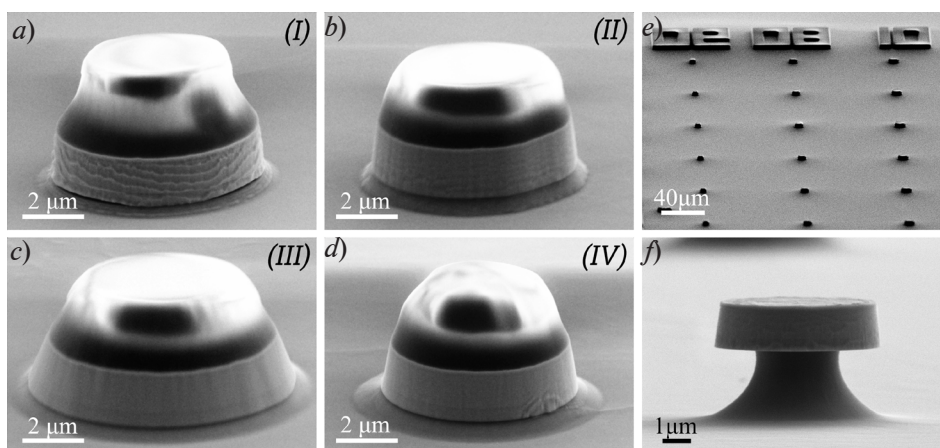


Рис. 1. СЭМ-изображения микродисковых структур I – IV (*a*, *b*, *c*, *d*, соответственно) после травления с фоторезистом на верхней поверхности, а также после травления кремниевой подложки (*e*, *f*). Представлены панорамный вид (*e*) и сформированный микродиск диаметром 6 мкм (*f*)

Для оптической развязки микрорезонаторных структур от кремния, на следующем технологическом этапе проводилось плазмохимическое травление кремниевой подложки с лицевой стороны в газовой смеси SF_6/O_2 с потоками 36 и 4 $см^3/мин$, соответственно, с мощностью ICP 2500 Вт и вытягивающей мощностью 150 Вт. Выбранный режим обеспечивал полную селективность травления кремния, не затрагивал сформированные слои микроструктур на основе элементов III – V групп. На рис. 1, *e, f* представлены СЭМ-изображения микроструктур IV образца после травления кремниевой подложки. Глубина травления кремния составила 2,5 $мкм$ при латеральном травлении под структурой на расстоянии 1,5 $мкм$, что достаточно для поддержания оптических мод на периферии микрорезонаторов.

На рис. 2 представлены результаты измерений мкФЛ при температуре 300 К при непрерывной накачке с использованием высокоапертурного 100-кратного объектива, обеспечивающего фокусировку лазерного луча в пятно диаметром порядка 0,5 $мкм$. На рис. 2, *a* приведено оптическое изображение микродисковой структуры диаметром 40 $мкм$, а также карта интегральной интенсивности сигнала фотолюминесценции, полученная путем растрового сканирования (картирования). Видно, что в области всего диска присутствует сигнал мкФЛ; при этом он усиливается в 1,4 – 1,5 раза на периферии диска, по сравнению с центральной частью, что указывает на более эффективную оптическую накачку полупроводниковой структуры. В спектре излучения (см. рис. 2, *b*) обнаруживается пик мкФЛ с максимумом на длине волны 670 – 680 нм. В отличие от традиционных прямозонных материалов на основе элементов III – V групп, для зарегистрированного сигнала мкФЛ характерна широкая асимметричная полоса излучения, растянутая в длинноволновую область спектра. Такой спектр типичен для полупроводниковых твердых растворов разбавленных нитридов. Полученный вид спектра указывает на неоднородность состава полупроводникового материала, связанную с особенностями встраивания азота в процессе эпитаксиального синтеза, в частности, образования димеризованного азота, а также азотных излучающих уровней в запрещенной зоне. В связи с этим существенная часть сигнала мкФЛ обусловлена излучением через азотные примесные центры, с энергией переходов ниже эффективной ширины запрещенной зоны. Данный эффект наиболее нагляден, если проводить измерения в динамике мкФЛ при существенном понижении общего уровня накачки (см. рис. 2, *c*). Исследование зависимости интенсивности сигнала мкФЛ от длины волны при картировании демонстрирует усиление общей интенсивности сигнала на периферии диска, а также появление явно выраженной модуляции сигнала, обусловленной возникновением стоячих оптических волн (моды Фабри – Перо) вдоль оси роста структуры, в области травления кремния под микродисками. Важно отметить, что резонансов, связанных с появлением мод шепчущей галереи, экспериментально не наблюдалось.

Как было указано выше, усиление интенсивности интегрального сигнала мкФЛ вблизи края микродиска может быть обусловлено как увеличением поглощения лазерного излучения, так и улучшением вывода сигнала мкФЛ. Для разделения вкладов от этих явлений был проведен численный расчет распространения электромагнитного излучения, падающего на микродиск (использована программа Comsol Multiphysics). В расчете были использованы экспериментальные данные о спектральной зависимости коэффициентов преломления и поглощения фосфида галлия и кремниевой подложки [21]. Аналогичные параметры для соединения GaP(NAs) были взяты для близкого по составу твердого раствора, синтезированного на подложке из фосфида галлия [16]. Проведенные расчеты показали, что при оптической накачке полупроводниковой структуры на длине волны 457 нм все излучение, которое не отразилось от границы верхнего слоя фосфида галлия, поглощается в слое GaP(NAs), т. е. наличие кремния под микродиском практически не влияет на уровень накачки полупроводниковой структуры.

Процесс мкФЛ характеризуется генерацией излучения с энергией квантов вблизи края запрещенной зоны полупроводникового материала. Вследствие данного обстоятельства существенно снижается коэффициент поглощения GaP(NAs) на длинах волн мкФЛ. По аналогии с данными работы [16], наша оценка показала, что коэффициент поглощения α принимает значения не более $1,5 мкм^{-1}$, обеспечивая возникновение резонансных оптических эффектов в рассматриваемой геометрии.

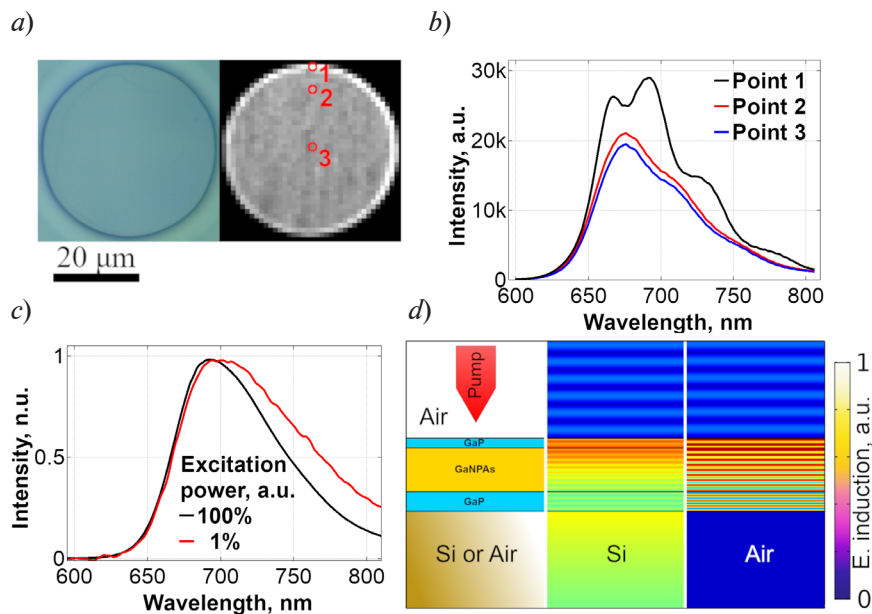


Рис. 2. Основные результаты оптических исследований структуры GaP(NAs):
a – оптическое (слева) и интегральное по спектральному диапазону (справа) изображения микродиска;
b – спектры мкФЛ в трех точках диска (см. рис. 2,*a*); *c* – спектры мкФЛ при двух значениях уровня накачки; *d* – расчетное распределение амплитуды электрической индукции в слоях структуры с Si-подложкой и без нее

Проведенный численный расчет подтвердил возникновение резонансов Фабри – Перо, связанных с появлением стоячих волн вдоль оси роста структуры в отсутствие кремния под слоями резонансной структуры (см. рис. 2,*d*). Амплитуда сигнала на длинах волн резонансов увеличилась в 1,6 раз (максимальное значение), что хорошо согласуется с экспериментальными данными.

В свою очередь средняя дистанция распространения света α^{-1} в полупроводниковой структуре остается существенно меньше периметра рассматриваемых микродисковых резонаторов, что делает невозможным появление резонансных пиков, связанных с модами шепчущей галереи без уменьшения коэффициента поглощения.

Как известно, уменьшение коэффициента поглощения в полупроводниковой структуре возможно путем инжекции носителей заряда и увеличения оптической ширины запрещенной зоны материала [22].

Заключение

В работе представлены результаты исследований по формированию микродисковых резонаторов на основе системы полупроводниковых материалов GaP/GaP(NAs)/GaP, синтезированных на кремниевой подложке, с использованием методов оптической литографии и сухого травления.

Подобран режим травления, обеспечивающий низкий уровень шероховатости боковой стенки при сохранении вертикальности этой стенки. Комбинация режимов травления для системы GaP/GaP(NAs) и Si, обладающих высокой селективностью к выбранной группе материалов, позволила создать микродисковые резонаторы с подвешенной областью вблизи периферии структур.

В результате проведения оптических исследований микрофотолюминесценции объекта установлено, что на периферии микрорезонаторов наблюдается формирование оптических мод Фабри – Перо вдоль оси роста полупроводниковой структуры.

Предложенную в статье технологию можно применять для изготовления не только резонаторов, но и других оптических элементов, таких, например, как волноводы, фильтры, лазерные структуры и т. п.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Cornet C., Léger Y., Robert C.** Integrated lasers on silicon. Amsterdam: ISTE Press –Elsevier, 2016. 166 p.
2. **Zinovyev V. A., Smagina Zh. V., Zinovyeva A. F., Bloshkin A. A., Dvurechenskii A. V., Rodyakina E. E., Stepikhova M. V., Peretokin A. V., Novikov A. V.** Emission enhancement of Ge/Si quantum dots in hybrid structures with subwavelength lattice of Al nanodisks // *Nanomaterials*. 2023. Vol. 13. No. 17. P. 2422.
3. **Iyer S. S., Xie Y.-H.** Light emission from silicon // *Science*. 1993. Vol. 260. No. 5104. Pp. 40–46.
4. **Pavesi L., Gaponenko S., Negro L.** (Eds.). Towards the first silicon laser (NATO Science Series II: Mathematics, Physics and Chemistry, Vol. 93). Dordrecht, the Netherlands: Springer Science + Business Media, 2003. 482 p.
5. **Lee A., Liu H., Seeds A.** Semiconductor III–V lasers monolithically grown on Si substrates // *Semiconductor Science and Technology*. 2012. Vol. 28. No. 1. P. 015027.
6. **Болховитянов Ю. Б., Пчелков О. П.** Эпитаксия GaAs на кремниевых подложках: современное состояние исследований и разработок // *Успехи физических наук*. 2008. Т. 178. № 5. С. 459–480.
7. **Mansor M., Norhaniza R., Shuhaimi A., Hisyam M. I., Omar Al-Z., Williams A., Hussin M. R. M.** Enhancement of gallium nitride on silicon (111) using pulse atomic-layer epitaxy (PALE) AlN with composition-graded AlGaN buffer // *Scientific Reports*. 2023. Vol. 13. 31 May. P. 8793.
8. **Ballabio A., Bietti S., Scaccabarozzi A., et al.** GaAs epilayers grown on patterned (001) silicon substrates via suspended Ge layers // *Scientific Reports*. 2019. Vol. 9. 26 November. P. 17529.
9. **Park J.-S., Tang M., Chen S., Liu H.** Heteroepitaxial growth of III–V semiconductors on silicon // *Crystals*. 2020. Vol. 10. No. 12. Pp. 1163.
10. **Dvoretckaia L., Gridchin V., Mozharov A., Maksimova A., Dragunova A., Melnichenko I., Mitin D., Vinogradov A., Mukhin I., Cirilin G.** Light-emitting diodes based on InGaN/GaN nanowires on microsphere-lithography-patterned Si substrates // *Nanomaterials*. 2022. Vol. 12. No. 12. P. 1993.
11. **Dvoretckaia L. N., Mozharov A. M., Berdnikov Y., Mukhin I. S.** Optimization of microsphere optical lithography for nano-patterning // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2022. Vol. 55. No. 9. P. 09LT01.
12. **Tsai Y. L., Yang H.-H., Fang J.-H., Chang C.-L., Chen M.-H., Wu C.-H., Hong H.-F.** GaAs-based optoelectronics grown on GaAs/Si virtual substrates with multiple spaced thermal-cycle annealing // *Thin Solid Films*. 2021. Vol. 733. 1 September. P. 138817.
13. **Zhu G., Li J., Zhang N., Li X., Dai J., Cui Q., Song Q., Xu Ch., Wang Y.** Whispering-gallery mode lasing in a floating GaN microdisk with a vertical slit // *Scientific Reports*. 2020. Vol. 10. 14 January. P. 253.
14. **Henini M., Razeghi M.** Optoelectronic devices: III nitrides. Amsterdam: Elsevier, 2004. 575 p.
15. **Dvoretckaia L. N., Bolshakov A. D., Mozharov A. M., et al.** GaNP-based photovoltaic device integrated on Si substrate // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2020. Vol. 206. March. P. 110282.
16. **Geisz J. F., Friedman D. J., Kurtz S.** GaNPAs solar cells lattice-matched to GaP // *Proceedings of the 29-th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, 2002. New Orleans, USA. IEEE, 2002. Pp. 864–867.
17. **Hossain N., Sweeney S. J., Rogowsky S., Ostendorf R., Wagner J., Liebich S., Zimprich M., Volz K., Kunert B., Stolz W.** Reduced threshold current dilute nitride Ga(NAsP)/GaP quantum well lasers grown by MOVPE // *Electronics Letters*. 2011. Vol. 47. No. 16. Pp. 931–933.
18. **Liebich S., Zimprich M., Beyer A., et al.** Laser operation of Ga (NAsP) lattice-matched to (001) silicon substrate // *Applied Physics Letters*. 2011. Vol. 99. No. 7. P. 071109.
19. **Mitchell M., Hryciw A. C., Barclay P. E.** Cavity optomechanics in gallium phosphide microdisks // *Applied Physics Letters*. 2014. Vol. 104. No. 14. P. 141104.
20. **Fedorov V. V., Dvoretckaia L. N., Mozharov A. M., Fedina S. V., Kirilenko D. A., Berezovskaya T. N., Faleev N. N., Yunin P. A., Drozdov M. N., Mukhin I. S.** Dual-functional light-emitting and photo-detecting GaAsPN heterostructures on silicon // *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2023. Vol. 168. December. P. 107867.



21. **Aspnes D. E., Studna A. A.** Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV // *Physical Review B*. 1983. Vol. 27. No. 2. P. 985.

22. **Ансельм А. И.** Введение в теорию полупроводников. М.: Наука. Гл. редакция физ.-мат. лит.-ры, 1978. 619 с.

REFERENCES

1. **Cornet C., Léger Y., Robert C.**, Integrated lasers on silicon, ISTE Press –Elsevier, Amsterdam, 2016.

2. **Zinovyev V. A., Smagina Zh. V., Zinovyeva A. F., et al.**, Emission enhancement of Ge/Si quantum dots in hybrid structures with subwavelength lattice of Al nanodisks, *Nanomater.* 13 (17) (2023) 2422.

3. **Iyer S. S., Xie Y.-H.**, Light emission from silicon, *Science*. 260 (5104) (1993) 40–46.

4. **Pavesi L., Gaponenko S., Negro L.** (Eds.), Towards the first silicon laser (NATO Sci. Ser. II: Mathematics, Physics and Chemistry, Vol. 93), Springer Science + Business Media, Dordrecht, 2003.

5. **Lee A., Liu H., Seeds A.**, Semiconductor III–V lasers monolithically grown on Si substrates, *Semicond. Sci. Technol.* 28 (1) (2012) 015027.

6. **Bolkhovityanov Y. B., Pchelyakov O. P.**, GaAs epitaxy on Si substrates: modern status of research and engineering, *Phys.-Usp.* 51 (5) (2008) 437–456.

7. **Mansor M., Norhaniza R., Shuhaimi A., et al.**, Enhancement of gallium nitride on silicon (111) using pulse atomic-layer epitaxy (PALE) AlN with composition-graded AlGaN buffer, *Sci. Rep.* 13 (31 May) (2023) 8793.

8. **Ballabio A., Bietti S., Scaccabarozzi A., et al.**, GaAs epilayers grown on patterned (001) silicon substrates via suspended Ge layers, *Sci. Rep.* 9 (26 Nov) (2019) 17529.

9. **Park J.-S., Tang M., Chen S., Liu H.**, Heteroepitaxial growth of III–V semiconductors on silicon, *Crystals*. 10 (12) (2020) 1163.

10. **Dvoretckaia L., Gridchin V., Mozharov A., et al.**, Light-emitting diodes based on InGaN/GaN nanowires on microsphere-lithography-patterned Si substrates, *Nanomater.* 12 (12) (2022) 1993.

11. **Dvoretckaia L. N., Mozharov A. M., Berdnikov Y., Mukhin I. S.**, Optimization of microsphere optical lithography for nano-patterning, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 55 (9) (2022) 09LT01.

12. **Tsai Y. L., Yang H.-H., Fang J.-H., et al.**, GaAs-based optoelectronics grown on GaAs/Si virtual substrates with multiple spaced thermal-cycle annealing, *Thin Solid Films*. 733 (1 Sept) (2021) 138817.

13. **Zhu G., Li J., Zhang N., et al.**, Whispering-gallery mode lasing in a floating GaN microdisk with a vertical slit, *Sci. Rep.* 10 (14 Jan) (2020) 253.

14. **Henini M., Razeghi M.**, Optoelectronic devices: III nitrides. Elsevier, Amsterdam, 2004.

15. **Dvoretckaia L. N., Bolshakov A. D., Mozharov A. M., et al.**, GaNP-based photovoltaic device integrated on Si substrate, *Sol. Energy Mater.* 206 (March) (2020) 110282.

16. **Geisz J. F., Friedman D. J., Kurtz S.**, GaNPAs solar cells lattice-matched to GaP, *Proc. 29-th IEEE Photovoltaic Specialists Conf.*, 2002. New Orleans, USA. IEEE (2002) 864–867.

17. **Hossain N., Sweeney S. J., Rogowsky S., et al.**, Reduced threshold current dilute nitride Ga(NAsP)/GaP quantum well lasers grown by MOVPE, *Electron. Lett.* 47 (16) (2011) 931–933.

18. **Liebich S., Zimprich M., Beyer A., et al.**, Laser operation of Ga (NAsP) lattice-matched to (001) silicon substrate, *Appl. Phys. Lett.* 99 (7) (2011) 071109.

19. **Mitchell M., Hryciw A. C., Barclay P. E.**, Cavity optomechanics in gallium phosphide microdisks, *Appl. Phys. Lett.* 104 (14) (2014) 141104.

20. **Fedorov V. V., Dvoretckaia L. N., Mozharov A. M., et al.**, Dual-functional light-emitting and photo-detecting GaAsPN heterostructures on silicon, *Mater. Sci. Semicond. Proc.* 168 (Dec) (2023) 107867.

21. **Aspnes D. E., Studna A. A.**, Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV, *Phys. Rev. B*. 27 (2) (1983) 985.

22. **Anselm A.**, Introduction to semiconductor theory, English translation, Mir Publishers, Moscow, 1981.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ДВОРЕЦКАЯ Лилия Николаевна – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3

Liliyabutler@gmail.com

ORCID: 0000-0002-4172-940X

МОЖАРОВ Алексей Михайлович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3

mozharov@spbau.ru

ORCID: 0000-0002-8661-4083

КОМАРОВ Сергей Дмитриевич – аспирант Санкт-Петербургской школы физико-математических и компьютерных наук, а также стажер-исследователь международной лаборатории квантовой оптоэлектроники Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (Санкт-Петербургский филиал), Санкт-Петербург, Россия.

190008, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Союза Печатников, 16

serega.komarow@mail.ru

ORCID: 0000-0002-7025-3527

ВЯЧЕСЛАВОВА Екатерина Александровна – аспирантка лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3

cate.viacheslavova@yandex.ru

ORCID: 0000-0001-6869-1213

МОИСЕЕВ Эдуард Ильмович – научный сотрудник международной лаборатории квантовой оптоэлектроники и старший преподаватель Санкт-Петербургской школы физико-математических и компьютерных наук Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (Санкт-Петербургский филиал), Санкт-Петербург, Россия.

190008, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Союза Печатников, 16

emoiseev@hse.ru

ORCID: 0000-0003-3686-935X

ФЕДОРОВ Владимир Викторович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, старший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

fedorov_vv@spbstu.ru

ORCID: 0000-0001-5547-9387

МУХИН Иван Сергеевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией возобновляемых источников энергии Академического университета им. Ж. И. Алфёрова РАН, директор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3

muhin_is@spbstu.ru

ORCID: 0000-0001-9792-045X

THE AUTHORS**DVORETCKAIA Liliia N.***Alferov University*

8-3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia

Liliyabutler@gmail.com

ORCID: 0000-0002-4172-940X

MOZHAROV Alexey M.*Alferov University*

8-3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia

mozharov@spbau.ru

ORCID: 0000-0002-8661-4083

KOMAROV Sergey D.*National Research University "Higher School of Economics" (St. Petersburg branch)*

16 Soyuz Pechatnikov St., St. Petersburg, 190121, Russia

serega.komarow@mail.ru

ORCID: 0000-0002-7025-3527

VYACHESLAVOVA Ekaterina A.*Alferov University*

8-3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia

cate.viacheslavova@yandex.ru

ORCID: 0000-0001-6869-1213

MOISEEV Eduard I.*National Research University "Higher School of Economics" (St. Petersburg branch)*

16 Soyuz Pechatnikov St., St. Petersburg, 190121, Russia

emoiseev@hse.ru

ORCID: 0000-0003-3686-935X

FEDOROV Vladimir V.*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University;**Alferov University*

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

fedorov_vv@spbstu.ru

ORCID: 0000-0001-5547-9387

MUKHIN Ivan S.*Alferov University**Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

8-3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia

muhin_is@spbstu.ru

ORCID: 0000-0001-9792-045X

*Статья поступила в редакцию 23.04.2024. Одобрена после рецензирования 21.05.2024.
Принята 21.05.2024.*

Received 23.04.2024. Approved after reviewing 21.05.2024. Accepted 21.05.2024.

Original article

UDC 538.9, 539.23

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17304>

RELAXATION OF ELECTRIC CHARGE IN POLYMER BLENDS BASED ON LOW-DENSITY POLYETHYLENE AND COPOLYMER OF ETHYLENE WITH VINYL ACETATE

R. A. Castro¹, E. A. Karulina¹ ✉, M. F. Galikhanov^{2,3},
T. V. Reztsov¹, E. E. Fomicheva⁴

¹ Herzen State Pedagogical University of Russia, St. Petersburg, Russia;

² Institute of Applied Research, Tatarstan Academy of Sciences,
Republic of Tatarstan, Kazan, Russia;

³ Kazan National Research Technological University,
Republic of Tatarstan, Kazan, Russia;

⁴ Military Space Academy named after A. F. Mozhaysky, St. Petersburg, Russia
✉ karulina@mail.ru

Abstract. This paper presents the results of a study of polymer films based on a blend of low-density (high-pressure) polyethylene (LDPE, HPP) with a copolymer of ethylene and vinyl acetate (EVA, sevilen). The use of thermal activation, infrared and dielectric spectroscopy methods made it possible to describe the electric charge relaxation processes in the polymer blends investigated. The data obtained suggested the presence of an α -relaxation process in the samples in the temperature range 250–280 K. An increased value of the activation energy of this process was also found in the LDPE/EVA samples compared to that in the LDPE one. This effect has been interpreted as the appearance of deeper traps of charge carriers in the blends. The dependences obtained by dielectric spectroscopy indicated the presence of hopping conductivity in the subjects of research.

Keywords: polyethylene, copolymer of ethylene with vinyl acetate, thermostimulated depolarization, thermo-activation spectroscopy

Funding: This study was supported by the Ministry of Education of the Russian Federation as a part of the Government Assignment (Project No. VRFY-2023-0005).

For citation: Castro R. A., Karulina E. A., Galikhanov M. F., Reztsov T. V., Fomicheva E. E., Relaxation of electric charge in polymer blends based on low-density polyethylene and copolymer of ethylene with vinyl acetate, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 36–45. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17304>

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 538.9, 539.23

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17304>

РЕЛАКСАЦИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЗАРЯДА В ПОЛИМЕРНЫХ СМЕСЯХ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНА ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ И СОПОЛИМЕРА ЭТИЛЕНА С ВИНИЛАЦЕТАТОМ

Р. А. Кастро¹, Е. А. Карулина¹ ✉, М. Ф. Галиханов^{2,3},
Т. В. Резцов¹, Е. Е. Фомичева⁴

¹ Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена,
Санкт-Петербург, Россия;



² Институт прикладных исследований Академии наук Республики Татарстан,
Республика Татарстан, г. Казань, Россия;

³ Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Республика Татарстан, г. Казань, Россия;

⁴ Военно-космическая академия имени А. Ф. Можайского, Санкт-Петербург, Россия
✉ karulina@mail.ru

Аннотация. В статье представлены результаты исследования полимерных пленок на основе смеси полиэтилена высокого давления (низкой плотности) (ПЭВД) с сополимером этилена и винилацетата (СЭВА, сэвилен). Использование методов термоактивной, инфракрасной и диэлектрической спектроскопии позволило описать процессы релаксации электрического заряда в исследуемых полимерных смесях. Исходя из полученных данных, было сделано предположение о существовании в образцах процесса альфа-релаксации в области 250 – 280 К. Обнаружено повышенное значение энергии активации, соответствующей релаксационному процессу, в образцах ПЭВД/СЭВА, по сравнению с образцом ПЭВД. Этот эффект трактуется как появление в смесях более глубоких ловушек носителей заряда. Зависимости, полученные методом диэлектрической спектроскопии, свидетельствуют о наличии в объектах исследования прыжкового механизма проводимости.

Ключевые слова: полиэтилен, сополимер этилена с винилацетатом, термостимулированная деполяризация, термоактивная спектроскопия, дипольно-сегментальная релаксация

Финансирование: Работа выполнена в рамках государственного задания при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (проект № VRFY-2023-0005).

Для цитирования: Кастро Р. А., Карулина Е. А., Галиханов М. Ф., Резцов Т. В., Фомичева Е. Е. Релаксация электрического заряда в полимерных смесях на основе полиэтилена высокого давления и сополимера этилена с винилацетатом // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 36–45. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17304>

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

Introduction

The electret effect is observed in dielectrics and consists in the ability of a material to maintain a polarized state for a long time in the absence of an external electric field [1]. Today, electrets are successfully used in various fields of science and technology. The most popular fields of application are electronics (microphones, electromechanical transducers, sensors), high-tech industry (electret filters), medicine (applicators, implants), etc. [1 – 3].

Low-density polyethylene (LDPE) is used to produce electrets because it has good dielectric properties and is inexpensive to produce. However, the disadvantage of polyethylene is the relatively short relaxation time of the electret state [1]. One of the most successful ways to improve the electret properties of polymers is the creation of composite materials by introducing chemical additives, foaming, mixing with solid dispersed fillers or with other polymers [4 – 7]. The method of combining one or several layers of polymer films is also promising [9]. These techniques make it possible to improve a set of properties of polymers, including electrical, mechanical and deformation characteristics.

Currently, the attention of researchers is attracted to a material called EVA, which is a copolymer of ethylene and vinyl acetate (EVA, SEVA, sevilen). The properties of EVA are determined by the vinyl acetate content. It is known that elasticity and adhesive properties of material are improved if it contains vinyl acetate. Improving elasticity has practical implications for electret material when it is used for active packaging, electret patches, and also as a component for stretchable bioelectronics [10, 11].

Earlier studies of the electret properties of EVA and its compositions with polyethylene [8, 9] did not provide a clear answer to the question of how the vinyl acetate content affects the dielectric properties and stability of the electret state. Nevertheless, it can be assumed that the EVA content has a positive effect on the electret properties of the composites.

In this connection, the purpose of our work was to identify the features of polarization processes in mixtures of LDPE and EVA using dielectric and thermal activation spectroscopy.

Research methods and materials

Blends of LDPE with EVA copolymer, differing in the ratio of components, were selected as samples for research. The film samples had a thickness of about 300 μm .

The blending of polymers was carried out on laboratory microrollers at a temperature of 130 ± 5 $^{\circ}\text{C}$ for 3 min. The films were prepared by pressing method at a temperature of 170 ± 5 $^{\circ}\text{C}$ for 5 min. Samples of blends of LDPE and EVA were provided by the Kazan National Research Technological University (Republic of Tatarstan, Russia).

The electrical properties were studied using thermal activation, infrared and dielectric spectroscopy methods.

Temperature dependences of thermostimulated depolarization (TSD) currents were recorded in the heating mode at a constant speed on a TSC-II installation (Setaram). Attenuated total internal reflection (ATR) spectra of the samples under study were recorded using an FSM 1202 Fourier spectrometer (an infrared range). Dielectric spectroscopy measurements were carried out using a Concept 41 installation (Novocontrol Technologies GmbH&Co).

Experimental results and discussion

The study of the frequency dependence of the imaginary part of the complex permittivity ϵ'' (the loss factor) revealed the existence of a dispersion maximum of this value in a wide temperature range (253 – 283 K). The shift of the ϵ'' maximum to the region of higher frequencies with increasing temperature was detected (Fig. 1). This shift of the maximum is typical of dipole-segmental losses (α -relaxation). It is observed in the mentioned graphs for nonpolar polymers and is bound up with orientational rotations of the polar units of the macromolecule [12]. Polyethylene contains a small number of polar groups (carbonyl and hydroxyl ones $>\text{C}=\text{O}$, $-\text{O}-\text{H}$, etc.). It also contains methyl groups $-\text{CH}_3$ and $>\text{C}=\text{C}<$ bonds, which have small dipole moments. A rise in the maximum on the frequency dependence curves obtained for a mixture of polymers was also observed with increasing temperature (Fig. 1, b). The maximum value of ϵ'' for the mixture is several times higher than that for the original polymer.

The relaxation process was also observed in the TSD spectra over the temperature range 273 – 283 K (Fig. 2). The course of the process does not depend on the percentage of blend components, and the maximum height escalates with increasing proportion of EVA. This behavior of the TSD peak can be explained by an increase in the number of relaxers in the polymer. It is also known from Ref. [13] that the height of the maximum related to α -relaxation on the frequency dependence of the loss factor ϵ'' is determined by the number of dipoles and their moments.

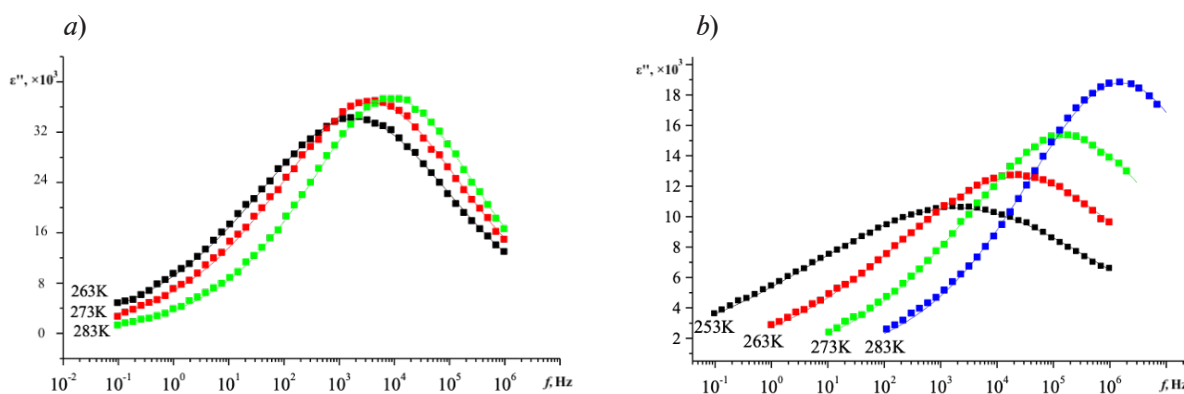


Fig. 1. Frequency dependences of the loss factor for LDPE (a) and LDPE+EVA (b) samples at different temperatures

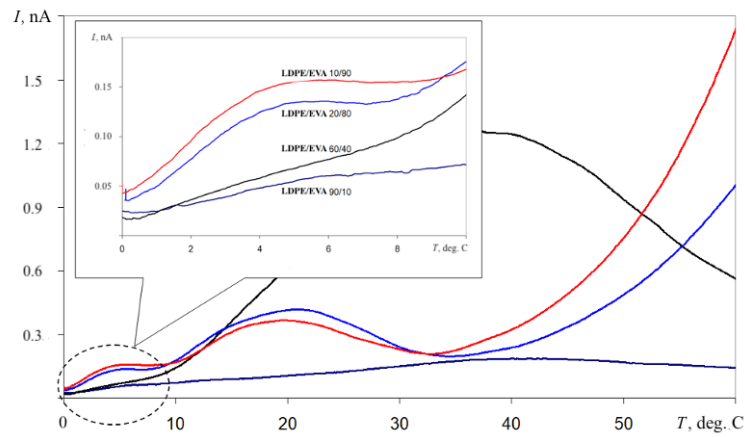


Fig. 2. Temperature dependences of TSD currents for various ratios of LDPE and EVA

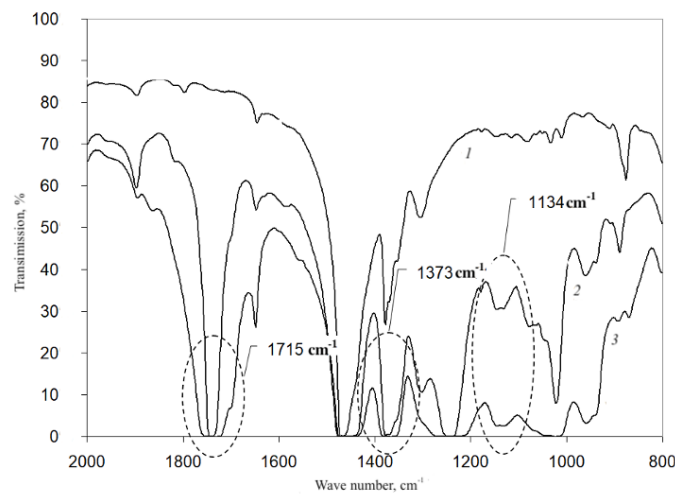


Fig. 3. Infrared transmission spectra for the samples of LDPE (1), LDPE/EVA 90/10 mixtures (2), and EVA (3)

Mixing the LDPE and EVA polymer materials led to the appearance of side polar groups $-\text{O}-(\text{C}=\text{O})-\text{CH}_3$ in the polymer chain. There are a lot of transmission bands in the IR spectra for EVA samples and LDPE/EVA mixtures (Fig. 3). For example, one can observe stretching vibrations of the $>\text{C}=\text{O}$ groups of polyvinyl acetate (1715 cm^{-1}), bending vibrations of the $-\text{CH}_3$ bonds of the acetyl group (1373 cm^{-1}), stretching vibrations of the $\sim\text{C}-\text{O}-\text{C}\sim$ ether groups in the composition of polyvinyl acetate (1134 cm^{-1}). Thus, the number of dipoles that contributed to dipole-segmental relaxation increased with increasing the proportion of EVA in the blend.

Complex dispersion dependences of dielectric parameters and features of the disordered structure of a polymer system suggest that the detected relaxation processes should be bound up with the existence of not only one relaxation time, but with a whole set of them.

The Havriliak – Negami (HN) model was used to study the features of the spectrum of relaxers. The Havriliak – Negami function is an empirical modification of the Debye relaxation model. Nevertheless, unlike the Debye model, the HN model explains the asymmetry and width of the dielectric dispersion curve. It also establishes a relation between the dispersion of permittivity in the polymer systems and relaxation parameters [14 –16]:

$$\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\Delta\varepsilon}{\left[1 + (i\omega\tau)^{\alpha_{\text{HN}}}\right]^{\beta_{\text{HN}}}}, \quad (1)$$

where ϵ_∞ is the high-frequency limit of the real part of the dielectric constant; $\Delta\epsilon$ is the dielectric increment (the difference between the low-frequency limit and high-frequency one); $\omega = 2\pi f$; α_{HN} , β_{HN} are the shape parameters describing, respectively, the asymmetric and symmetric expansions of the relaxation time distribution function (RTDF); in this case $\alpha = 1.00$ is the Cole – Davidson distribution, and $\beta = 1.00$ is the Cole – Cole one.

The HN parameters for the studied relaxation processes were determined according to Eq. (1) using Winfit 3.3 software (Novocontrol Technologies GmbH). The obtained values of relaxation parameters are presented in Table. Taking into account the approximation error, we can conclude that a non-Debye oscillatory process (with a set of relaxation time values) obeying the Cole – Cole model over the studied ranges of frequency and temperature is observed in LDPE samples and LDPE/EVA blends.

Table
Temperature dependences of relaxation parameters for the polymer systems under study

Polymer system	Average temperature, K	α_{max} , μs	β_{HN}
LDPE	263	0.8561	0.33200
	273	0.4185	0.35310
	283	0.1748	0.39110
	293	0.8419	0.35620
LDPE/EVA	253	0.8522	0.22790
	263	0.7116	0.27470
	273	0.9217	0.32050
	283	0.1016	0.34650

Footnote. Parameter $\beta_{HN} = 0.10000$ at all specified temperatures for the both systems.

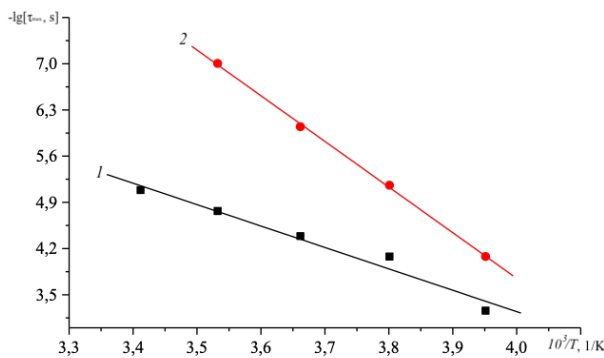


Fig. 4. Temperature dependences of the most probable relaxation time τ_{max} for the samples of LDPE (1) and LDPE/EVA (2); the found values of activation energies E_a are 0.69 eV (1) and 1.37 eV (2)

temperature [20]. This mechanism involves charge carriers jumping through a disordered structure and overcoming energy barriers. It should be noted that the fundamental parameter in this process is the energy required to complete the jump. It is also necessary to take into account the distributions of the energy barriers magnitudes.

The activation energy E_a was determined from the temperature dependence of the most probable relaxation time τ_{max} (Fig. 4) for the samples of the both systems. It turned out to be equal to 0.69 eV and 1.37 eV for the LDPE and LDPE/EVA samples, respectively. An approximately twofold increase in the E_a value for the blend samples may be bound up with the appearance of deeper traps in the energy spectrum. The appearance of these traps may be caused by two reasons. The first one is the rotation of the polar groups of the EVA molecules. The second one is the charge accumulation at the polymer boundary in the blends of LDPE and EVA.

The frequency dependence of the specific conductivity σ' for LDPE sample and the blend of two polymers is characterized by a growth in σ' with an increasing field frequency (Fig. 5). This corresponds to the power-law dependence in the form $\sigma'(\omega) \sim \omega^s$. In this case, the s value increases with increasing temperature (Fig. 6).

When s value becomes greater than 1, the movement of charge carriers is considered localized [17, 18]. These results can be explained within the theory of nonstationary hopping electrical conductivity in disordered systems [19].

In the system in question, there is a hopping mechanism of charge transfer at the indicated values of frequency and temperature. The signs of such a mechanism are the power law of conductivity dispersion and the characteristic change in exponent with

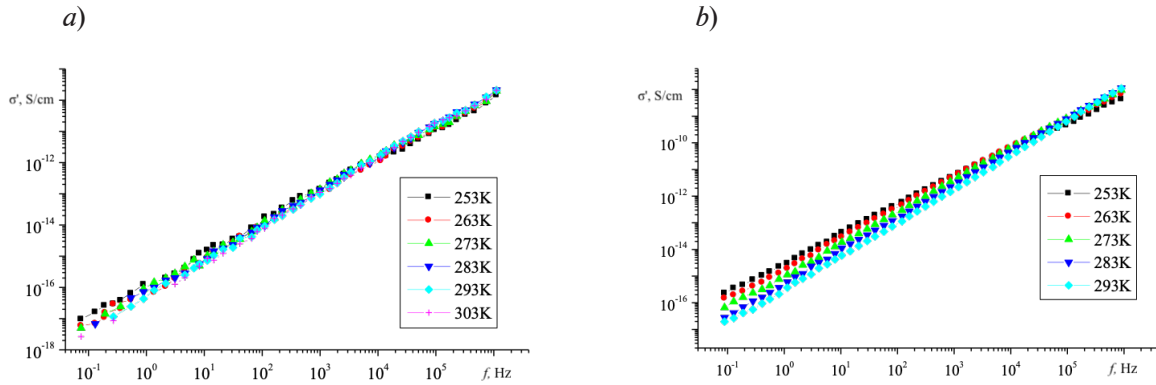


Fig. 5. Frequency dependences of specific conductivity for the samples of LDPE (a) and LDPE/EVA (b) at different temperatures

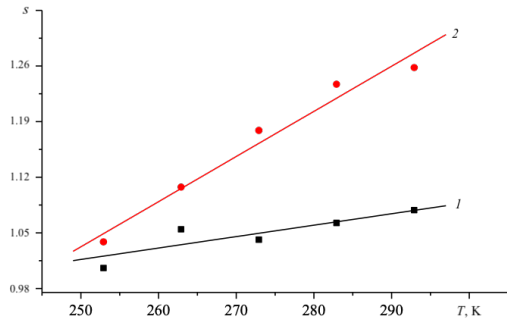


Fig. 6. Temperature dependences of the exponent for the samples of LDPE (1) and LDPE/EVA (2)

In the samples under study, such charge carriers can be negatively and positively charged hydrogen vacancies in the polymer chains [21, 22]. Such vacancies are created during the interaction between water molecules and its ions (H_3O^+ , OH^-) with hydrogen atoms, which are contained in the structural groups of $-CH_2-$, $>CH-$, $-CH_3$ chains. The EVA chains contain side polar groups $-O-(C=O)-CH_3$ and polyethylene molecules contain $>CH-$ groups.

Notice that the specific conductivity of LDPE/EVA blends is more than that of pure polyethylene. This can be explained by the fact that EVA has greater electrical conductivity than LDPE.

To explain the resulting linear frequency dependence of conductivity it is convenient to use the model proposed by the authors of Ref. [20]. According to this model, the frequency versus temperature characteristic of the AC conductivity $\sigma_{ac}(\omega, T)$ forms as a result of tunneling the center-to-center bipolaron transitions. This also assumes that there is no correlation between the potential barrier height and the jump distance.

For the case of the strong spatial correlations, when the pair correlation function

$$f(r) = Ae^{-\beta r} > 1,$$

the expression for the AC conductivity can be written as

$$\sigma_{ac}(\omega) = \frac{A}{48} \frac{e^4 \omega (\omega v_{ph})^{\beta/2\alpha}}{\cos(\beta/2\alpha) \alpha^4 \epsilon \epsilon_0} \left[\ln \left(\frac{v_{ph}}{\omega} \frac{2\alpha - \beta}{2\alpha + \beta} \right) \right]^3 N^2(E), \quad (2)$$

where ω is the cyclic frequency; v_{ph} is the phonon frequency (similar to that in a crystal); ϵ is the static dielectric constant; α^{-1} is the localization radius; r is the center-to-center jump distance; $N(E)$ is the concentration of centers in unit interval energies.

Eq. (2) explains the linear frequency dependence in the region of medium and high frequencies, taking into account that

$$s = 1 + \beta/2\alpha, \quad \beta = 1,6 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^{-1}.$$

It can be concluded that the main contribution to dynamic conductivity is made by spatially correlated pairs of defects, for example, dangling bonds, etc.

Summary

Based on the results of the studies, it can be argued that the process of α -relaxation has been observed in blends of LDPE and EVA in the temperature range 250 – 280 K. The activation energies corresponding to this process in LDPE films and in the films of blends are 0.69 and 1.37 eV, respectively. The increased value of activation energy in the LDPE/EVA samples compared to the LDPE one can be explained by the appearance of deeper traps in the blends. These traps are bound up with the rotation of the polar groups in the EVA molecules or with the charge accumulation at the interface of two polymers.

The frequency dependence of the conductivity of the samples indicated the presence of hopping conductivity. Charge carriers involved in the conductivity can be negatively and positively charged hydrogen vacancies in polymer chains.

REFERENCES

1. Sessler G. M. (Ed.), Electrets (Book Series “Topics in Applied Physics”), Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1987.
2. Hillenbrand J., Habertzettl S., Sessler G. M., Electret microphones with stiff diaphragms, *J. Acoust. Soc. Am.* 134 (6) (2013) 499–505.
3. Goel M., Electret sensors, filters and MEMS devices: New challenges in materials research, *Curr. Sci.* 85 (4) (2005) 443–453.
4. Rychkov D., Altafim R. A. P., Qiu X., Gerhard R., Treatment with orthophosphoric acid enhances the thermal stability of the piezoelectricity in low-density polyethylene ferroelectrets, *J. Appl. Phys.* 111 (12) (2012) 124105.
5. Ismayilova R. S., Kuliev M. M., Features of the charge state of UHMWPE + α -SiO₂ nanocomposites, *Surf. Eng. Appl. Elect.* 56 (3) (2020) 267–271.
6. Moody M. J., Marvin C. W., Hutchison G. R., Molecularly-doped polyurethane foams with massive piezoelectric response, *J. Mater. Chem. C.* 4 (20) (2016) 4387–4392.
7. Galikhanov M., Corona electrets based on filler-loaded polymers: Structure, properties and applications, *IEEE Trans. Dielectric. Elect. Insul.* 29 (3) (2022) 788–793.
8. Galikhanov M. F., Budarina L. A., Koronoelektrety na osnove polietilena i sopolimerov etilena s vinilacetatom [Corona electret based on polyethylene and ethylene/acetate copolymer], *Russian Journal “Plasticheskiye massy”*. (1) (2002) 40–42 (in Russian).
9. Galikhanov M. F., Temnov D. E., Kozlov A. A., et al., Specific features of the electret effect in two-layer polymeric films, *Russ. J. Appl. Chem.* 81 (1) (2008) 86–90.
10. Galikhanov M. F., Deberdeev R. Ya., Corona-poled electrets based on vinyl chloride/vinyl acetate copolymer-zinc white composites, *Russ. J. Appl. Chem.* 78 (3) (2005) 496–499.
11. Galihanov M. F., Izuchenie koronoelektretov na osnove smesey polietilena s sopolimerami etilena s vinilacetatom [Investigation of corona electrets based on cast alloys of polyethylene with copolymers of ethylene and vinyl acetate], *Materialovedenie.* (12) (2006) 30–34 (in Russian).
12. Tager A., Physical chemistry of polymers, 2-nd edition, Mir Publishers, Moscow, 1978.
13. Bartenev G. M., Frenkel' S. Ya., Fizika polimerov [Physics of polymers], Khimiya Publishing, Leningrad, 1990 (in Russian).
14. Sazhin B. I., Lobanov A. M., Romanovskaya A. S., Elektricheskie svoystva polimerov [Electrical properties of polymers], Khimiya Publishing, Leningrad, 1986 (in Russian).
15. Kremer F., Schönhalz A., Broadband dielectric spectroscopy, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2003.
16. Havriliak S., Negami S., A complex plane representation of dielectric and mechanical relaxation processes in some polymers, *Polymer.* 8 (1967) 161–210.
17. Kumari S., Ortega N., Kumar A., et al., Dielectric anomalies due to grain boundary conduction in chemically substituted ViFeO₃, *J. Appl. Phys.* 117 (11) (2015) 114102.
18. Jaiswal A., Das R., Maity T., et al., Temperature-dependent Raman and dielectric spectroscopy of ViFeO₃ nanoparticles: Signatures of spin-phonon and magnetoelectric coupling, *J. Phys. Chem. C.* 114 (29) (2010) 12432–12439.
19. Mott N. F., Devis E. A., Electronic processes in non-crystalline materials, Clarendon-Press, Oxford, UK, 1971.

20. Roizin Ya. O., Tsybeskov L. V., Shumeiko V. R., Dynamic conductivity of amorphous SiN, *Fizika Tverdogo Tela*. 32 (1) (1990) 293–296 (in Russian).

21. Gorohovatskiy Yu., Aniskina L., Viktorovich A., et al., Demonstration of spin-orbital interaction of vibration spectra of polyelectrolyte of fiber and films based electrets on the basis of polypropylene and polyethylene, *Izvestia: Herzen University Journal of Humanities & Sciences. Physics*. (11(79)) (2009) 47–61 (in Russian).

22. Aniskina L., Viktorovich A., Galikhanov M. F., Temnov D. E., Poly-electrolytic model of fiber polymers on the basis of polyethylene and polypropylene, *Izvestia: Herzen University Journal of Humanities & Sciences. Physics*. (135) (2010) 24–36 (in Russian).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Электреты. Под ред. Сесслера Г. Пер. с англ. М.: Мир, 1983. 487 с.
2. Hillenbrand J., Haberzettl S., Sessler G. M. Electret microphones with stiff diaphragms // *Journal of the Acoustical Society of America*. 2013. Vol. 134. No. 6. Pp. 499–505.
3. Goel M. Electret sensors, filters and MEMS devices: New challenges in materials research // *Current Science*. 2005. Vol. 85. No. 4. Pp. 443–453.
4. Rychkov D., Altafim R. A. P., Qiu X., Gerhard R. Treatment with orthophosphoric acid enhances the thermal stability of the piezoelectricity in low-density polyethylene ferroelectrets // *Journal of Applied Physics*. 2012. Vol. 111. No. 12. P. 124105.
5. Ismayilova R. S., Kuliev M. M. Features of the charge state of UHMWPE + α -SiO₂ nanocomposites // *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*. 2020. Vol. 56. No. 3. Pp. 267–271.
6. Moody M. J., Marvin C. W., Hutchison G. R. Molecularly-doped polyurethane foams with massive piezoelectric response // *Journal of Materials Chemistry C*. 2016. Vol. 4. No. 20. Pp. 4387–4392.
7. Galikhanov M. Corona electrets based on filler-loaded polymers: Structure, properties and applications // *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*. 2022. Vol. 29. No. 3. Pp. 788–793.
8. Галиханов М. Ф., Бударина Л. А. Короноэлектреты на основе полиэтилена и сополимеров этилена с винилацетатом // *Пластические массы*. 2002. № 1. С. 40–42.
9. Галиханов М. Ф., Темнов Д. Е., Козлов А. А., Петрова А. А., Гороховатский Ю. А., Дебердеев Р. Я. Изучение особенностей проявления электретного эффекта в двухслойных полимерных пленках // *Журнал прикладной химии*. 2008. Т. 81. № 1. С. 90–94.
10. Галиханов М. Ф., Дебердеев Р. Я. Короноэлектреты на основе композиций сополимера винилхлорида с винилацетатом и цинковых белил // *Журнал прикладной химии*. 2005. Т. 78. № 3. С. 502–505.
11. Галиханов М. Ф. Изучение короноэлектретов на основе смесей полиэтилена с сополимерами этилена с винилацетатом // *Материаловедение*. 2006. № 12. С. 30–34.
12. Тагер А. А. Физико-химия полимеров. Изд. 4-е, перераб. и доп. М.: Научный мир, 2007. 576 с.
13. Бартенев Г. М., Френкель С. Я. Физика полимеров. Ленинград: Химия, 1990. 432 с.
14. Сажин Б. И., Лобанов А. М., Романовская А. С. Электрические свойства полимеров. 3-е изд., перераб. Ленинград: Химия, 1986. 224 с.
15. Kremer F., Schönhals A. Broadband dielectric spectroscopy. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2003. 729 p.
16. Havriliak S., Negami S. A complex plane representation of dielectric and mechanical relaxation processes in some polymers // *Polymer*. 1967. Vol. 8. Pp. 161–210.
17. Kumari S., Ortega N., Kumar A., Pavunny S. P., Hubbard J. W., Rinaldi C., Srinivasan G., Scott J. F., Katiyar R. S. Dielectric anomalies due to grain boundary conduction in chemically substituted ViFeO₃ // *Journal of Applied Physics*. 2015. Vol. 117. No. 11. P. 114102.
18. Jaiswal A., Das R., Maity T., Vivekanand K., Adyanthaya S., Poddar P. Temperature-dependent Raman and dielectric spectroscopy of ViFeO₃ nanoparticles: Signatures of spin-phonon and magnetoelectric coupling // *Journal of Physical Chemistry C*. 2010. Vol. 114. No. 29. Pp. 12432–12439.
19. Мотт Н., Дэвис Е. Электронные процессы в некристаллических веществах в 2 тт. Пер. с англ. М.: Мир, 1982. Т. 1 – 368 с. Т. 2 – 664 с.

20. Ройзин Я. О., Цыбесков Л. В., Шумейко В. Р. Динамическая проводимость аморфного нитрида кремния // Физика твердого тела. 1990. Т. 32. № 1. С. 293–296.

21. Гороховатский Ю. А., Анискина Л. В., Викторovich А. С., Гороховатский И. Ю., Карулина Е. А., Тазенков Б. А., Темнов Д. Э., Чистякова О. В. Проявление спин-орбитального взаимодействия в колебательных спектрах полиэлектролитов – волокнистых и пленочных электретов на основе полипропилена и полиэтилена // Известия Российского государственного педагогического университета имени А. И. Герцена. Естественные и точные науки: Физика. 2009. № 11 (79). С. 47–61.

22. Анискина Л. В., Викторovich А. С., Галиханов М. Ф., Темнов Д. Э. Полиэлектролитная модель волоконитов на основе полиэтилена и полипропилена // Известия Российского государственного педагогического университета имени А. И. Герцена. Естественные и точные науки: Физика. 2010. № 135. С. 24–36.

THE AUTHORS

CASTRO ARATA Rene Alejandro A.

Herzen State Pedagogical University of Russia

48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russia

recastro@mail.ru

ORCID: 0000-0002-1902-5801

KARULINA Elena A.

Herzen State Pedagogical University of Russia

48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russia

karulina@mail.ru

ORCID: 0000-0001-9604-4769

GALIKHANOV Mansur F.

Institute of Applied Research of Tatarstan Academy of Sciences,

Kazan National Research Technological University

20 Bauman St., Kazan, 420111, Russia

mgalikhanov@yandex.ru

ORCID: 0000-0001-5647-1854

REZTSOV Tikhon V.

Herzen State Pedagogical University of Russia

48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russia

sunnyundeajuvati@icloud.com

ORCID: 0000-0003-2025-0579

FOMICHEVA Elena E.

Military Space Academy Named after A. F. Mozhaysky

13 Zhdanovskaya St., St. Petersburg, 197198, Russia

e.e.fomicheva@gmail.com

ORCID: 0000-0002-9402-5246

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КАСТРО АРАТА Рене Алехандро – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института физики Российского государственного педагогического университета им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия.

191186, Россия, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48

recastro@mail.ru

ORCID: 0000-0002-1902-5801



КАРУЛИНА Елена Анатольевна – кандидат физико-математических наук, доцент Института физики Российского государственного педагогического университета им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия.

191186, Россия, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48

karulina@mail.ru

ORCID: 0000-0001-9604-4769

ГАЛИХАНОВ Мансур Флоридович – доктор технических наук, ведущий научный сотрудник Центра новых материалов и перспективных технологий Института прикладных исследований Академии наук Республики Татарстан; профессор кафедры технологии переработки полимеров и композиционных материалов Казанского национального исследовательского технологического университета г. Казань, Республика Татарстан, Россия.

420111, Россия, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Баумана, 20

mgalikhanov@yandex.ru

ORCID: 0000-0001-5647-1854

РЕЗЦОВ Тихон Владимович – студент Института детства Российского государственного педагогического университета им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия.

191186, Россия, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48

sunnyundeadjuvati@icloud.com

ORCID: 0000-0003-2025-0579

ФОМИЧЕВА Елена Егоровна – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель Военно-космической академии имени А. Ф. Можайского, Санкт-Петербург, Россия.

197198, Россия, г. Санкт-Петербург, Ждановская ул., 13

e.e.fomicheva@gmail.com

ORCID: 0000-0002-9402-5246

Received 31.03.2024. Approved after reviewing 03.04.2024. Accepted 03.04.2024.

Статья поступила в редакцию 31.03.2024. Одобрена после рецензирования 03.04.2024. Принята 03.04.2024.

Математическое моделирование физических процессов

Научная статья

УДК 537.9

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17305>

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУННЕЛЬНОГО ЭФФЕКТА В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ НИТРИДА ГАЛЛИЯ НА КРЕМНИИ

Д. А. Барыкин^{1, 2} ✉, К. Ю. Шугуров¹, А. М. Можаров¹, И. С. Мухин²

¹ Академический университет им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия;

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ d.a.barykin02@mail.ru

Аннотация. В работе выполнено численное моделирование туннельного эффекта в системе *n*-GaN на кремнии Si *p*-типа проводимости. Получены вариации зонных диаграмм, вольтамперных характеристик и частот отсечки соответствующих диодных гетероструктур в зависимости от уровней легирования GaN и Si. Установлены значения концентраций легирующей примеси для реализации режимов обращенного и туннельного диодов. В режиме туннельного диода наибольшая плотность туннельного тока и предельная частота генерации составили 24,6 кА/см² и 17 ГГц, соответственно.

Ключевые слова: моделирование туннельного эффекта, нитрид галлия, кремний, нитевидный нанокристалл, туннельный диод

Финансирование: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-01279 (<https://rscf.ru/project/23-79-01279/>).

Для цитирования: Барыкин Д. А., Шугуров К. Ю., Можаров А. М., Мухин И. С. Численное моделирование туннельного эффекта в гетероструктуре нитрида галлия на кремнии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 46–56. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17305>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17305>

NUMERICAL SIMULATION OF THE TUNNEL EFFECT IN THE GALLIUM NITRIDE HETEROSTRUCTURE ON SILICON

D. A. Barykin^{1, 2} ✉, K. Yu. Shugurov¹, A. M. Mozharov¹, I. S. Mukhin²

¹ Alferov University, St. Petersburg, Russia;

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

✉ d.a.barykin02@mail.ru

Abstract. In this study, a numerical simulation of the tunnel effect in the *n*-GaN/*p*-Si heterostructure has been performed. Variations of band diagrams, current-voltage characteristics and cutoff frequencies of the diode heterostructures under study were obtained depending on the doping levels of GaN and Si. The dopant concentration values were found for implementing backward and tunnel diode modes. In the tunnel diode mode, the peak current density and maximal generation frequency were 24.6 kA/cm² and 17 GHz, respectively.

Keywords: tunnel effect simulation, gallium nitride, silicon, nanowire, tunnel diode

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 23-79-01279, <https://rscf.ru/project/23-79-01279/>).

For citation: Barykin D. A., Shugurov K. Yu., Mozharov A. M., Mukhin I. S., Numerical simulation of the tunnel effect in the gallium nitride heterostructure on silicon, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 46–56. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17305>

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

Введение

За последние 70 лет были разработаны различные полупроводниковые приборы СВЧ-диапазона, в частности, $p-i-n$ -диоды, диоды Шоттки, Ганна, а также туннельные и обращенные диоды, работа которых основана на эффекте туннелирования. Данный класс элементов занимает важную нишу, поскольку широко используется в цепях детектирования, смещения, усиления и генерации высокочастотных сигналов.

На текущий момент диоды с туннельным эффектом преимущественно изготавливаются на основе арсенида галлия (GaAs) и германия (Ge), крайне редко – на основе кремния (Si). Использование узкозонных полупроводников (германий) в первую очередь обусловлено тем, что для таких материалов характерна более высокая вероятность туннелирования носителей [1], что повышает эффективность работы прибора. Однако, с другой стороны, из-за малой ширины запрещенной зоны наблюдается температурная нестабильность его характеристик, несмотря на тот факт, что туннельные диоды в этом плане менее чувствительны, чем, например, быстродействующие $p-i-n$ -диоды или диоды Шоттки. Использование кремния, безусловно, целесообразно с экономической и технологической точек зрения, но для непрямозонных полупроводников, к которым также относится и германий, межзонный туннельный ток значительно ограничен вследствие закона сохранения импульса, что сильно сужает потенциал компонентов на базе этих материалов [2]. По сравнению с кремниевыми туннельными диодами, материалы на основе элементов III – V групп (например, GaAs) могут обеспечить гораздо более высокое отношение пикового тока к току впадины ввиду их прямозонной природы, низких значений эффективных масс туннелирования и возможности использования различных вариаций гетероструктур на их основе [3]. При этом арсенид галлия обладает низкой теплопроводностью, характеризуется достаточно сложной технологией фабрикации и, как следствие, высокой стоимостью производства. Кроме того, получение n -GaAs с концентрацией примеси свыше $2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ представляет собой сложную технологическую задачу [4].

Учет вышеописанных негативных особенностей стимулирует продолжение активных исследований в данной области: подыскиваются новые системы материалов, в частности интегрированных с кремниевой платформой [5 – 7].

Перспективной системой материалов считаются гетероструктуры нитрида галлия на кремнии (GaN/Si), которые позволяют совместить преимущества GaN (широкозонный материал, прямозонная структура, высокая термическая, химическая и радиационная стойкость) с развитостью и доступностью кремниевой технологии. Однако эти полупроводники плохо совместимы из-за существенного рассогласования по параметру кристаллической решетки и коэффициенту теплового расширения.

Альтернативным подходом может служить использование нитевидных нанокристаллов (*англ.* nanowires (*NWs*)), главное преимущество которых состоит в высоком кристаллическом совершенстве, практически вне зависимости от выбора ростовой подложки, что значительно расширяет возможности интеграции GaN с другими материалами. Более того, исследования GaN *NWs* показывают, что такие объекты хорошо подходят для создания широкого класса компонентов, например, полевых транзисторов в так называемой конфигурации кольцевого затвора (“gate-all-around”) или структуры ядро – оболочка (“core-shell”) [8, 9], диодов Шоттки [10], фотодиодов [11], пьезогенераторов [12].

Помимо высокого кристаллического качества, применение GaN *NWs*, в том числе в приборах с туннельным эффектом, оправдано еще рядом важных преимуществ:

низкая электрическая емкость структуры ввиду малых поперечных размеров *NW* [10], не превышающих, как правило, 100 – 200 нм (для туннельных переходов характерны относительно высокие значения емкости, что вызвано малой шириной области пространственного заряда);

способность одиночных GaN *NWs* коммутировать токи плотностью до 2 МА/см² [13], что востребовано для создания сильноточных туннельных приборов [14];

возможность синтеза GaN *NWs* с уровнем легирования вплоть до 10²⁰ см⁻³ [15], что позволяет управлять диапазоном рабочих частот и выходными характеристиками структур;

возможность работы электронных компонентов в неблагоприятных условиях и агрессивных средах, благодаря материальным свойствам GaN;

большая величина отношения площади поверхности к объему вследствие высокого значения аспектного соотношения, характерного для *NWs*, что способствует эффективно-му отводу тепла [16].

Значимый потенциал *NWs* и развитие методов их синтеза привлекли внимание многих исследователей, и создание диодов с туннельным эффектом на их основе стало предметом активных разработок на протяжении последних лет, где были рассмотрены *NWs* InAs/InSb, InAs/GaSb, GaAsSb, InGaAs [7, 17 – 20]. Однако сам туннельный эффект в системе GaN *NW*/Si до сих пор остается неизученным.

Данная работа посвящена теоретическому изучению эффекта туннелирования в гетеро-структуре GaN *NW* на кремнии.

Описание модели

Моделирование туннельного эффекта проводилось для системы *n*-GaN/*p*-Si с использованием пакета численного моделирования COMSOL Multiphysics. Поскольку типичный диаметр GaN *NW* составляет 100 – 200 нм, а характерная толщина области пространственного заряда (ОПЗ) в туннельных диодах составляет около 10 нм, можно утверждать, что распределение электрического поля будет в основном направлено поперек гетероинтерфейса и почти не зависеть от положения в плоскости в пределах *NW* (рис. 1). По этой причине для проведения расчета была выбрана одномерная модель системы.

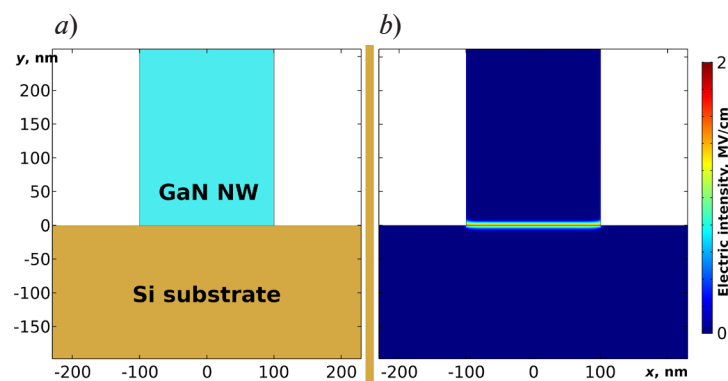


Рис. 1. Схематическая модель системы GaN *NW*/Si (a) и распределение напряженности электростатического поля на гетероинтерфейсе *n*-GaN *NW*/*p*-Si при $n = p = 10^{19}$ см⁻³ (b) (использован программный пакет COMSOL Multiphysics)

Численное моделирование проводилось в рамках модели Русброека [21] с учетом статистики Ферми – Дирака для носителей заряда. Параметры полупроводниковых материалов взяты из монографии [22]. Для корректного описания термоэмиссионного тока в кремнии был учтен процесс рекомбинации носителей по механизму Шокли – Рида – Холла. Расчет туннельного тока проводился в рамках нелокальной модели туннелирования [23] с использованием следующего выражения:

$$J_t = \frac{eK\sqrt{m_e m_h}}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{E_C}^{E_V} T(E) [F_C(E) - F_V(E)] dE, \quad (1)$$

где E – полная энергия носителя заряда; E_C, E_V – энергии дна зоны проводимости в n -слое и потолка валентной зоны в p -слое, соответственно; T – вероятность межзонного туннелирования носителей; F_C, F_V – вероятности нахождения электрона с энергией E в зоне проводимости n -слоя и валентной зоне p -слоя, соответственно; K – кинетическая энергия теплового движения носителей заряда; m_e, m_h – эффективные массы электронов и дырок, соответственно; e – заряд электрона; \hbar – постоянная Планка ($\hbar = h/2\pi$).

Вероятность туннелирования рассчитывалась в приближения Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна с усредненным волновым вектором \mathbf{k} для электронов и дырок:

$$T \approx \exp \left[-2 \int_{x_1}^{x_2} |k(x)| dx \right], \quad (2)$$

$$k = \frac{k_e k_h}{\sqrt{k_e^2 + k_h^2}}, \quad (3)$$

$$k_e = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} (E_C - E)}, \quad (4)$$

$$k_h = \sqrt{\frac{2m_h}{\hbar^2} (E - E_V)}, \quad (5)$$

Величины x_1 и x_2 представляют собой границы энергетического барьера для электронов с полной энергией E и определяются условием равенств $E = E_C$ и $E = E_V$, соответственно.

При синтезе *NWs* полупроводниковые слои в области гетероперехода оказываются напряженными вследствие рассогласования с подложкой по параметру решетки и коэффициенту теплового расширения. Однако в случае нитрида галлия на кремнии, можно получить *NWs*, в которых слои у основания будут полностью релаксированными за счет образования ультратонких интерфейсных слоев (менее 2 нм) [24 – 26]. Поэтому указанный эффект не учитывался в рамках текущего расчета.

Результаты и их обсуждение

В качестве варьируемых параметров в расчете выступали уровни легирования Si и GaN. Для кремния диапазон этих значений составил $(1 - 10) \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, что соответствует концентрации примеси в коммерческих сильнолегированных подложках. Для GaN этот параметр изменялся в более широких пределах: $(5 - 1000) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, что обусловлено, с одной стороны, фоновым легированием синтезируемых *NWs*, а с другой – верхней границей легирования *NWs* при помощи кремния, в соответствии с литературными источниками [15].

На рис. 2 представлены зонные диаграммы без смещения по напряжению для трех структурных конфигураций. При этом первая (рис. 2, *a*) и третья (рис. 2, *c*) соответствуют минимальным и максимальным пределам рассматриваемых концентраций легирующей примеси. Видно, что в случае максимальных концентраций происходит перекрытие валентной зоны Si и зоны проводимости GaN (см. рис. 2, *c*).

Такая картина характерна для туннельных диодов, когда небольшое смещение в любую сторону будет сопровождаться активным туннелированием носителей, поскольку для электронов в зоне проводимости нитрида галлия станут доступны уровни в валентной зоне кремния (прямое смещение) с такой же энергией и наоборот (обратное смещение). Минимальная ширина барьера при этом составляет около 3 нм.

Для минимальных уровней легирования (см. рис. 2, *a*) GaN оказывается невырожденным и перекрытия зон не происходит, следовательно туннельный ток при околонулевых

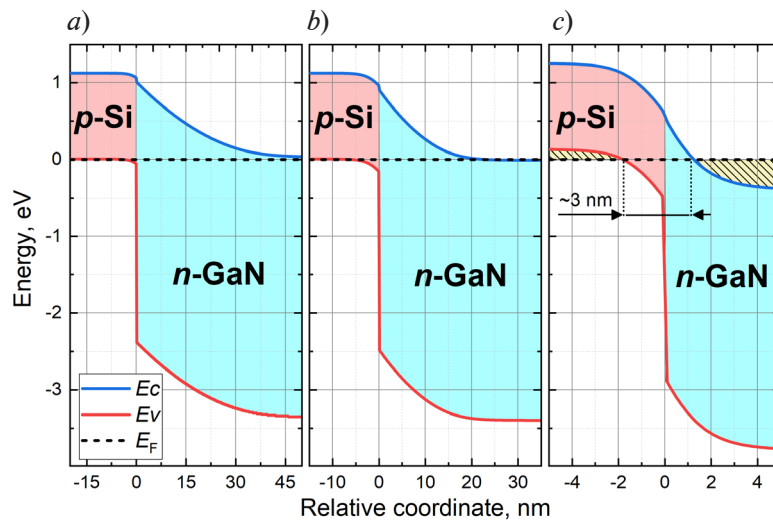


Рис. 2. Зонные диаграммы структур n -GaN/ p -Si для различных конфигураций легирования, см^{-3} : $n = 5 \cdot 10^{17}$, $p = 1 \cdot 10^{19}$ (a); $n = 2 \cdot 10^{18}$, $p = 1 \cdot 10^{19}$ (b); $n = p = 1 \cdot 10^{20}$ (c). Заштрихованная область на рис. 2, c отвечает заполнению дырками в Si и электронами в GaN.

За начала отсчета по горизонтальным осям приняты границы раздела слоев, по вертикальным – уровень Ферми E_F для электронов

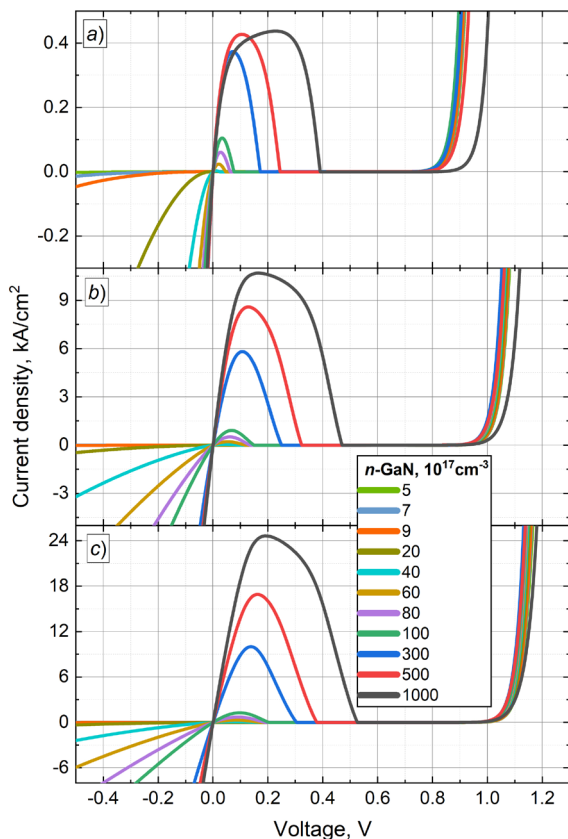


Рис. 3. Рассчитанные вольтамперные характеристики для различных уровней легирования n -GaN (см. легенду) и кремния p , 10^{19} см^{-3} : 1 (a), 5 (b), 10 (c)

смещениях будет отсутствовать. Кроме того, в равновесном состоянии ширина барьера составляет примерно 40 нм, поэтому активное туннелирование станет возможным только в случае значительных обратных смещений, обеспечивающих уменьшение ширины барьера. В целом такая картина свойственна обычным выпрямительным p - n -диодам.

На рис. 2, b можно наблюдать некоторую промежуточную ситуацию, когда потолок валентной зоны Si будет совпадать с дном зоны проводимости GaN. В такой конфигурации прямое смещение структуры будет сопровождаться нарастанием диффузионного тока, а небольшое обратное смещение приведет к появлению туннельного тока. Высота барьера для электронов, движущихся из нитрида галлия в кремний по зоне проводимости, согласно диаграмме, примерно равна ширине запрещенной зоны кремния, а значит структура начнет хорошо проводить ток при напряжениях около +1 В. Обратное смещение будет характеризоваться двумя факторами: увеличением зоны перекрытия и снижением ширины барьера, что в совокупности вызовет резкое нарастание туннельного тока. В результате проводимость структуры в обратном направлении окажется значительно выше, чем в прямом, для диапазона напряжений порядка ± 1 В. Такое поведение относится к обращенным диодам, у которых вольтамперная характеристика (ВАХ) является инвертированной, по сравнению с классическим видом.

Полученные серии ВАХ структур приведены на рис. 3. Видно, что на графиках наблюдаются характерные максимумы, после которых рост напряжения сопровождается

снижением тока. Данный участок называется областью отрицательного дифференциального сопротивления (ОДС) и является отличительной особенностью туннельных диодов. Наличие максимума соответствует ситуации, когда перекрытие валентной зоны кремния выше уровня Ферми и зоны проводимости нитрида галлия ниже уровня Ферми достигает максимального значения. Наибольшее расчетное значение максимальной (пиковой) плотности тока в составило $24,6 \text{ кА/см}^2$ (см. рис. 3,с) при напряжении 190 мВ (для $n = p = 10^{20} \text{ см}^{-3}$).

Этот результат сопоставим с экспериментальными, а также теоретическими [27] данными для диодных структур (в том числе с *NWs*) на основе GaAs [28 – 30], Ge/Si [31], Si [32] и GaSb/InAsSb [33], где пиковая плотность тока лежит в пределах от единиц до десятков кА/см².

Позиции максимумов как по току, так и по напряжению смещаются в сторону нуля по мере уменьшения уровня легирования GaN, так как это приводит к меньшему перекрытию зон. По той же причине напряжение раствора (напряжение, при котором ток через туннельный диод второй раз достигает максимума) смещается в сторону меньших значений. Отметим, что напряжение раствора в нашем случае слабо зависит от концентрации примеси в нитриде галлия в диапазоне $(5 - 500) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, однако достаточно чувствительно к легированию кремния.

В силу того, что моделирование не учитывало дефекты на интерфейсе GaN/Si, на ВАХ после области отрицательного дифференциального сопротивления присутствует горизонтальный участок с нулевым током. В реальных диодных структурах ток во «впадине» не достигает нуля, так как в отсутствие зоны перекрытия соответствующие носители имеют возможность проходить под барьером по энергетическим уровням дефектов. Вследствие этого форма впадины скругляется. В системе GaN *NW*/Si эффективно повлиять на плотность дефектов на гетероинтерфейсе можно при помощи водородной пассивации, что было нами продемонстрировано ранее [34].

С учетом того, что для подобного типа приборов характерна работа на высоких частотах, нами были вычислены зависимости частоты отсечки (для туннельных диодов – предельной частоты генерации) структур от уровня легирования нитрида галлия (рис. 4). Туннельные диоды, как правило, работают на участке ОДС вольтамперной характеристики, следовательно предельная частота работы будет определяться из условия отрицательности действительной части комплексного сопротивления диода [35].

Можно показать, что в таком случае выражение для частоты отсечки f_{cutoff} запишется в следующем виде:

$$f_{cutoff} = \frac{1}{2\pi |R_{min}| C_j}, \quad (6)$$

где $|R_{min}|$ – модуль минимального сопротивления на участке ОДС, C_j – емкость *p-n*-перехода.

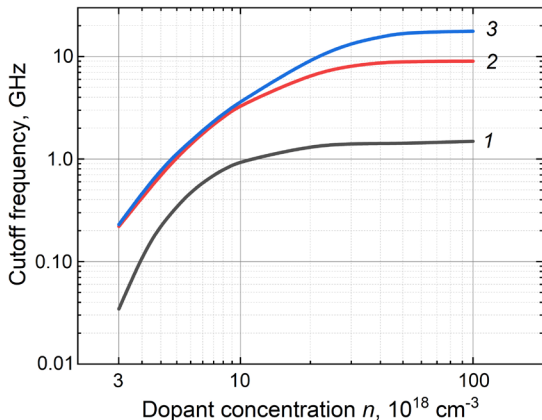


Рис. 4. Рассчитанные зависимости предельной частоты генерации структуры от уровня легирования *n*-GaN для различных уровней легирования *p*-кремния, 10^{19} см^{-3} : 1 (1), 5 (2), 10 (3)

Отметим здесь, что на самом деле в выражении (6) фигурирует дифференциальное сопротивление в соответствующей области, которое не является постоянной величиной. Использование же его минимального значения $|R_{min}|$ – общепринятое.

Анализ данных на рис. 4 показывает, что повышение концентрации легирующей примеси как в GaN, так и в Si сопровождается нелинейным смещением отсечки в более высокочастотную область. При этом потолок частоты отсечки находится в районе 17 ГГц, что соответствует практически предельным уровням легирования GaN и Si. Даже если технологически станет возможным дальнейшее увеличение концентрации, то это все равно не приведет к значимому расширению рабочего частотного диапазона.

Важно также отметить, что для концентраций легирующей примеси в кремнии между $1 \cdot 10^{19}$ и $5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ частота отсечки увеличивается в несколько раз. В то же время кривые для $p = 5 \cdot 10^{19}$ и $1 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ различаются в гораздо меньшей степени. В совокупности с данными для ВАХ можно сделать вывод, что для реализации туннельных диодов с высокой плотностью тока в пике, а также с высоким быстродействием следует выбирать уровень легирования нитрида галлия и кремния не ниже $3 \cdot 10^{19}$ и $5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, соответственно.

Заключение

В настоящей работе проведено численное моделирование туннельного эффекта в гетероструктуре $n\text{-GaN } NW/p\text{-Si}$ в широком диапазоне уровней легирования (в одномерном приближении).

Установлено, что режим обращенного диода будет реализовываться при концентрации легирующей примеси около $2 \cdot 10^{18}$ и $1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ для GaN и Si, соответственно, в то время как для туннельных диодов следует выбирать концентрации не менее $3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ для GaN и $5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ для Si.

По данным вольтамперных характеристик расчетное максимальное значение плотности туннельного тока составило $24,6 \text{ кА/см}^2$, что хорошо согласуется с экспериментальными результатами исследования структур на базе GaAs и Ge как основных промышленных материалов для приборов с туннельным эффектом. Частотный анализ генерации структуры привел к заключению, что ее предельная частота для туннельных диодов системы GaN/Si находится на уровне 17 ГГц.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hopkins J. B. Microwave backward diodes in InAs // Solid-State Electronics. 1970. Vol. 13. No. 5. Pp. 697–705.
2. Tabe M., Tan H. N., Mizuno T., Muruganathan M., Anh L. T., Mizuta H., Nuryadi R., Moraru D. Atomistic nature in band-to-band tunneling in two-dimensional silicon pn tunnel diodes // Applied Physics Letters. 2016. Vol. 108. No. 9. P. 093502.
3. Li Q., Han Y., Lu X., Lau K. M. GaAs-InGaAs-GaAs fin-array tunnel diodes on (001) Si substrates with room-temperature peak-to-valley current ratio of 5.4 // IEEE Electron Device Letters. 2016. Vol. 37. No. 1. Pp. 24–27.
4. Калиновский В. С., Малеев Н. А., Контрош Е. В., Васильев А. П., Прудченко К. К., Толкачев И. А., Малевская А. В., Устинов В. М. Туннельные диоды $n^{++}\text{-GaAs}:(\delta\text{-Si})/p^{++}\text{-Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{As}:(\text{C})$ для соединительных элементов многпереходных лазерных фотопреобразователей // Письма в Журнал технической физики. 2024. Т. 50. № 7. С. 39–42.
5. Jia R., Huang Q., Huang R. Vertical SnS_2/Si heterostructure for tunnel diodes // Science China Information Sciences. 2019. Vol. 63. No. 2. P. 122401.
6. Zhu Y., Lv H., Zhang Y., Jia Z., Sun J., Lyu Z., Lu B. MoS_2/Si tunnel diodes based on comprehensive transfer technique // Chinese Physics B. 2023. Vol. 32. No. 1. P. 018501.
7. Anandan D., Hsu C.-W., Chang E. Y. Growth of III–V antimonide heterostructure nanowires on silicon substrate for Esaki tunnel diode // Materials Science Forum. 2022. Vol. 1055. March. Pp. 1–6.
8. Ajitha D., Lakshmi K. N. V. S., Lakshmi B. K. Nanowire transistors: A next step for the low-power digital technology // IETE Journal of Research. 2021. Vol. 69. No. 11. Pp. 1–17.
9. Im K.-S., Reddy M. S. P., Caulmilone R., Theodorou C. G., Ghibaudo G., Cristoloveanu S., Lee J.-H. Low-frequency noise characteristics of GaN nanowire gate-all-around transistors with/without 2-DEG channel // IEEE Transactions on Electron Devices. 2019. Vol. 66. No. 3. Pp. 1243–1248.
10. Шугуров К. Ю., Можаров А. М., Сапунов Г. А., Фёдоров В. В., Моисеев Э. И., Блохин С. А., Кузьменков А. Г., Мухин И. С. Сверхвысокочастотные диоды Шоттки на основе одиночных нитевидных нанокристаллов GaN // Письма в Журнал технической физики. 2022. Т. 48. № 15. С. 22–25.
11. Han S., Noh S., Kim J.-W., Lee C.-R., Lee S.-K., Kim J. S. Stretchable inorganic GaN-nanowire photosensor with high photocurrent and photoresponsivity // ACS Applied Materials & Interfaces. 2021. Vol. 13. No. 19. Pp. 22728–22737.

12. **Jamond N., Chrétien P., Houzé F., et al.** Piezo-generator integrating a vertical array of GaN nanowires // *Nanotechnology*. 2016. Vol. 27. No. 32. P. 325403.
13. **Shugurov K., Mozharov A., Sapunov G., Fedorov V., Tchernycheva M., Mukhin I.** Single GaN nanowires for extremely high current commutation // *Physica Status Solidi (RRL) – Rapid Research Letters*. 2021. Vol.15. No. 4. P. 2000590.
14. **Zhang H., Xue J., Sun Z., et al.** 1039 kA/cm² peak tunneling current density in GaN-based resonant tunneling diode with a peak-to-valley current ratio of 1.23 at room temperature on sapphire substrate // *Applied Physics Letters*. 2021. Vol. 119. No. 15. P. 153506.
15. **Fang Z., Robin E., Rozas-Jiménez E., Cros A., Donatini F., Mollard N., Pernot J., Daudin B.** Si donor incorporation in GaN nanowires // *Nano Letters*. 2015. Vol. 15. No. 10. Pp. 6794–6801.
16. **Léonard F.** Reduced Joule heating in nanowires // *Applied Physics Letters*. 2011. Vol. 98. No. 10. P. 103101.
17. **Takahashi T., Kawaguchi K., Sato M., Suhara M., Okamoto N.** Highly sensitive *p*-GaAsSb/*n*-InAs nanowire backward diodes for low-power microwaves // *Proceedings of the 49th European Solid-State Device Research Conference (ESSDERC)*. 23–26 September, 2019. Cracow, Poland. 2019. Pp. 214–217.
18. **Shao Y., Pala M., Esseni D., del Alamo J. A.** Scaling of GaSb/InAs vertical nanowire Esaki diodes down to sub-10-nm diameter // *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2022. Vol. 69. No. 4. Pp. 2188–2195.
19. **Anabestani H., Shazzad R., Fattah M. F. A., Therrien J., Ban D.** Review on GaAsSb nanowire potentials for future 1D heterostructures: Properties and applications // *Materials Today Communications*. 2021. Vol. 28. September. P. 102542.
20. **Yoshida A., Gamo H., Motohisa J., Tomioka K.** Creation of unexplored tunnel junction by heterogeneous integration of InGaAs nanowires on germanium // *Scientific Reports*. 2022. Vol. 12. 31 January. P. 1606.
21. **Van Roosbroeck W.** Theory of the flow of electrons and holes in germanium and other semiconductors // *Bell System Technical Journal*. 1950. Vol. 29. No. 4. Pp. 560–607.
22. **Adachi S.** Properties of group-IV, III – V and II – VI semiconductors. Hoboken, New Jersey, USA: John Wiley & Sons, 2005. 408 p.
23. **Liu K.-M., Cheng C.-P.** Investigation on the effects of gate-source overlap/underlap and source doping gradient of *n*-type Si cylindrical gate-all-around tunnel field-effect transistors // *IEEE Transactions on Nanotechnology*. 2020. Vol. 19. 07 May. Pp. 382–389.
24. **Eftychis S., Kruse J. E., Tsagaraki K., Koukoulia T., Kehagias T., Komninou P., Georgakilas A.** Effects of ultrathin AlN prelayers on the spontaneous growth of GaN nanowires by plasma assisted molecular beam epitaxy // *Journal of Crystal Growth*. 2019. Vol. 514. 15 May. Pp. 89–97.
25. **Landré O., Bougerol C., Renevier H., Daudin B.** Nucleation mechanism of GaN nanowires grown on (111) Si by molecular beam epitaxy // *Nanotechnology*. 2009. Vol. 20. No. 41. P. 415602.
26. **Geelhaar L., Chuze C., Jenichen B., et al.** Properties of GaN nanowires grown by molecular beam epitaxy // *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*. 2011. Vol. 17. No. 4. Pp. 878–888.
27. **Kumar M. J., Sharma S.** GaAs tunnel diode with electrostatically doped *n*-region: Proposal and analysis // *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2015. Vol. 62. No. 10. Pp. 3445–3448.
28. **Pan J. L., McManis J. E., Grober L., Woodall J. M.** Gallium-arsenide deep-level tunnel diode with record negative conductance and record peak current density // *Solid-State Electronics*. 2004. Vol. 48. No. 10–11. Pp. 2067–2070.
29. **Ahmed S., Melloch M. R., Harmon E. S., McInturff D. T., Woodall J. M.** Use of nonstoichiometry to form GaAs tunnel junctions // *Applied Physics Letters*. 1997. Vol. 71. No. 25. Pp. 3667–3669.
30. **Darbandi A., Kavanagh K. L., Watkins S. P.** Lithography-free fabrication of core–shell GaAs nanowire tunnel diodes // *Nano Letters*. 2015. Vol. 15. No. 8. Pp. 5408–5413.
31. **Chen L., Fung W. Y., Lu W.** Vertical nanowire heterojunction devices based on a clean Si/Ge interface // *Nano Letters*. 2013. Vol. 13. No. 11. Pp. 5521–5527.
32. **Schmid H., Bessire C., Björk M. T., Schenk A., Riel H.** Silicon nanowire Esaki diodes // *Nano Letters*. 2012. Vol. 12. No. 2. Pp. 699–703.
33. **Ganjipour B., Dey A. W., Borg B. M., Ek M., Pistol M.-E., Dick K. A., Wernersson L.-E., Thelander C.** High current density Esaki tunnel diodes based on GaSb-InAsSb heterostructure nanowires // *Nano Letters*. 2011. Vol. 11. No. 10. Pp. 4222–4226.

34. **Shugurov K. Y., Mozharov A. M., Bolshakov A. D., et al.** Hydrogen passivation of the *n*-GaN nanowire/*p*-Si heterointerface // *Nanotechnology*. 2020. Vol. 31. No. 24. P. 244003.
 35. **Лебедев А. И.** Физика полупроводниковых приборов. М.: Физматлит, 2008. 488 p.

REFERENCES

1. **Hopkins J. B.**, Microwave backward diodes in InAs, *Solid-State Electron*. 13 (5) (1970) 697–705.
2. **Tabe M., Tan H. N., Mizuno T., et al.**, Atomistic nature in band-to-band tunneling in two-dimensional silicon pn tunnel diodes, *Appl. Phys. Lett.* 2016. Vol. 108 (9) (2016) 093502.
3. **Li Q., Han Y., Lu X., Lau K. M.**, GaAs-InGaAs-GaAs fin-array tunnel diodes on (001) Si substrates with room-temperature peak-to-valley current ratio of 5.4, *IEEE Electron. Device Lett.* 37 (1) (2016) 24–27.
4. **Kalinovskiy V. S., Maleyev N. A., Kontrosh E. V., et al.**, Tunnelnyye diody n^{++} -GaAs:(δ -Si)/ p^{++} -Al_{0.4}Ga_{0.6}As:(C) dlya soyedinitelnykh elementov mnogoperekhodnykh lazernykh fotopreobrazovatelye [n^{++} -GaAs:(δ -Si)/ p^{++} -Al_{0.4}Ga_{0.6}As:(C) tunnel diodes for connecting the elements of multijunction laser converters], *Pisma v Zhurnal Tekhnicheskoy Fiziki*. 50 (7) (2024) 39–42 (in Russian)
5. **Jia R., Huang Q., Huang R.**, Vertical SnS₂/Si heterostructure for tunnel diodes, *Sci. China Inf. Sci.* 63 (2) (2019) 122401.
6. **Zhu Y., Lv H., Zhang Y., et al.**, MoS₂/Si tunnel diodes based on comprehensive transfer technique, *Chin. Phys. B*. 32 (1) (2023) 018501.
7. **Anandan D., Hsu C.-W., Chang E. Y.**, Growth of III–V antimonide heterostructure nanowires on silicon substrate for Esaki tunnel diode, *Mater. Sci. Forum*. 1055 (March) (2022) 1–6.
8. **Ajitha D., Lakshmi K. N. V. S., Lakshmi B. K.**, Nanowire transistors: A next step for the low-power digital technology, *IETE J. Res.* 69 (11) (2021) 1–17.
9. **Im K.-S., Reddy M. S. P., Caulmilone R., et al.**, Low-frequency noise characteristics of GaN nanowire gate-all-around transistors with/without 2-DEG channel, *IEEE Trans. Electron Dev.* 66 (3) (2019) 1243–1248.
10. **Shugurov K. Yu., Mozharov A. M., Sapunov G. A., et al.**, Microwave Schottky diodes based on single GaN nanowires, *Techn. Phys. Lett.* 48 (8) (2022) 18–21.
11. **Han S., Noh S., Kim J.-W., et al.**, Stretchable inorganic GaN-nanowire photosensor with high photocurrent and photoresponsivity, *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 13 (19) (2021) 22728–22737.
12. **Jamond N., Chrétien P., Houzé F., et al.**, Piezo-generator integrating a vertical array of GaN nanowires, *Nanotechnol.* 27(32) (2016) 325403.
13. **Shugurov K., Mozharov A., Sapunov G., et al.**, Single GaN nanowires for extremely high current commutation, *Phys. Stat. Solidi (RRL)* 15 (4) (2021) 2000590.
14. **Zhang H., Xue J., Sun Z., et al.**, 1039 kA/cm² peak tunneling current density in GaN-based resonant tunneling diode with a peak-to-valley current ratio of 1.23 at room temperature on sapphire substrate, *Appl. Phys. Lett.* 119 (15) (2021) 153506.
15. **Fang Z., Robin E., Rozas-Jiménez E., et al.**, Si donor incorporation in GaN nanowires, *Nano Lett.* 15 (10) (2015) 6794–6801.
16. **Léonard F.**, Reduced Joule heating in nanowires, *Appl. Phys. Lett.* 98 (10) (2011) 103101.
17. **Takahashi T., Kawaguchi K., Sato M., Suhara M., Okamoto N.**, Highly sensitive *p*-GaAsSb/*n*-InAs nanowire backward diodes for low-power microwaves, *Proc. 49th Europ. Solid-State Device Res. Conf. (ESSDERC)*. 23–26 Sept., 2019. Cracow, Poland. (2019) 214–217.
18. **Shao Y., Pala M., Esseni D., del Alamo J. A.**, Scaling of GaSb/InAs vertical nanowire Esaki diodes down to sub-10-nm diameter, *IEEE Trans. Electron Dev.* 69 (4) (2022) 2188–2195.
19. **Anabestani H., Shazzad R., Fattah M. F. A., et al.**, Review on GaAsSb nanowire potentials for future 1D heterostructures: Properties and applications, *Mater. Today Commun.* 28 (Sept) (2021) 102542.
20. **Yoshida A., Gamo H., Motohisa J., Tomioka K.**, Creation of unexplored tunnel junction by heterogeneous integration of InGaAs nanowires on germanium, *Sci. Rep.* 12 (31 Jan) (2022) 1606.
21. **Van Roosbroeck W.**, Theory of the flow of electrons and holes in germanium and other semiconductors, *Bell Syst. Tech. J.* 29 (4) (1950) 560–607.
22. **Adachi S.**, Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors. John Wiley & Sons, 2005. 408 p.

23. Liu K.-M., Cheng C.-P., Investigation on the effects of gate-source overlap/underlap and source doping gradient of *n*-type Si cylindrical gate-all-around tunnel field-effect transistors, IEEE Trans. Nanotechnol. 19 (07 May) (2020) 382–389.
24. Eftychis S., Kruse J. E., Tsagaraki K., et al., Effects of ultrathin AlN prelayers on the spontaneous growth of GaN nanowires by plasma assisted molecular beam epitaxy, J. Cryst. Growth. 514 (15 May) (2019) 89–97.
25. Landré O., Bougerol C., Renevier H., Daudin B., Nucleation mechanism of GaN nanowires grown on (111) Si by molecular beam epitaxy, Nanotechnol. 20 (41) (2009) 415602.
26. Geelhaar L., Chèze C., Jenichen B., et al., Properties of GaN nanowires grown by molecular beam epitaxy, IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. 17 (4) (2011) 878–888.
27. Kumar M. J., Sharma S., GaAs tunnel diode with electrostatically doped n-region: Proposal and analysis, IEEE Trans. Electron Dev. 62 (10) (2015) 3445–3448.
28. Pan J. L., McManis J. E., Grober L., Woodall J. M., Gallium-arsenide deep-level tunnel diode with record negative conductance and record peak current density, Solid-State Electron. 48 (10–11) (2004) 2067–2070.
29. Ahmed S., Melloch M. R., Harmon E. S., et al., Use of nonstoichiometry to form GaAs tunnel junctions, Appl. Phys. Lett. 71 (25) (1997) 3667–3669.
30. Darbandi A., Kavanagh K. L., Watkins S. P., Lithography-free fabrication of core–shell GaAs nanowire tunnel diodes, Nano Lett. 15 (8) (2015) 5408–5413.
31. Chen L., Fung W. Y., Lu W., Vertical nanowire heterojunction devices based on a clean Si/Ge interface, Nano Lett. 13 (11) (2013) 5521–5527.
32. Schmid H., Bessire C., Björk M. T., et al., Silicon nanowire Esaki diodes, Nano Lett. 12 (2) (2012) 699–703.
33. Ganjipour B., Dey A. W., Borg B. M., et al., High current density Esaki tunnel diodes based on GaSb–InAsSb heterostructure nanowires, Nano Lett. 11 (10) (2011) 4222–4226.
34. Shugurov K. Y., Mozharov A. M., Bolshakov A. D., et al., Hydrogen passivation of the *n*-GaN nanowire/*p*-Si heterointerface, Nanotechnol. 31 (24) (2020) 244003.
35. Lebedev A. I., Fizika poluprovodnikovyykh priborov [Physics of semiconductor devices], Fizmatlit Publishing, Moscow, 2008 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БАРЫКИН Дмитрий Артемович — лаборант центра приоритетных направлений науки и технологий Академического университета им. Ж. И. Алфёрова РАН, студент Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
 d.a.barykin02@mail.ru

ШУГУРОВ Константин Юрьевич — кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
 shugurov17@mail.ru
 ORCID: 0000-0001-8973-3187

МОЖАРОВ Алексей Михайлович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
 mozharov@spbau.ru
 ORCID: 0000-0002-8661-4083

МУХИН Иван Сергеевич – доктор физико-математических наук, профессор, директор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

muhin_is@spbstu.ru

ORCID: 0000-0001-9792-045X

THE AUTHORS

BARYKIN Dmitrii A.

Alferov University;

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

8-3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia

d.a.barykin02@mail.ru

SHUGUROV Konstantin Yu.

Alferov University

8-3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia

shugurov17@mail.ru

ORCID: 0000-0001-8973-3187

MOZHAROV Alexey M.

Alferov University

8-3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia

mozharov@spbau.ru

ORCID: 0000-0002-8661-4083

MUKHIN Ivan S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

muhin_is@spbstu.ru

ORCID: 0000-0001-9792-045X

*Статья поступила в редакцию 17.04.2024. Одобрена после рецензирования 21.05.2024.
Принята 21.05.2024.*

Received 17.04.2024. Approved after reviewing 21.05.2024. Accepted 21.05.2024.

Научная статья

УДК 539.3

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17306>

МОДЕЛЬ НЕСТАЦИОНАРНЫХ МЕХАНОДИФFUЗИОННЫХ КОЛЕБАНИЙ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ОРТОТРОПНОЙ ПЛАСТИНЫ ТИМОШЕНКО СО СМЕШАННЫМ ЗАКРЕПЛЕНИЕМ ПО КРАЯМ

А. В. Земсков^{1,2} ✉, **А. В. Вестяк**¹, **Д. В. Тарлаковский**^{2,1}

¹ Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия;

² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия
✉ azemskov1975@mail.ru

Аннотация. В работе анализируются связанные упругие и диффузионные процессы, возникающие в результате нестационарных изгибных колебаний ортотропной пластины, имеющей консольное закрепление с одной стороны и шарнирное опирание по сторонам, примыкающим к консоли. Для математического описания физико-механических процессов используется модель пластины Тимошенко, дополненная уравнениями массопереноса с учетом конечной скорости распространения диффузионных потоков. Алгоритм решения основан на использовании метода эквивалентных граничных условий, позволяющего выразить решение поставленной задачи через известное решение некоторой вспомогательной задачи данного класса. На примере изгибаемой трехкомпонентной пластины промоделирован характер взаимодействия в ней механического и диффузионного полей.

Ключевые слова: упругая диффузия, консольно-закрепленная пластина, метод эквивалентных граничных условий, пластина Тимошенко

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 20-19-00217, <https://rscf.ru/project/20-19-00217/>).

Для цитирования: Земсков А. В., Вестяк А. В., Тарлаковский Д. В. Модель нестационарных механодиффузионных колебаний прямоугольной ортотропной пластины Тимошенко со смешанным закреплением по краям // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 57–75. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17306>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17306>

A MODEL OF UNSTEADY MECHANODIFFUSION VIBRATIONS OF A RECTANGULAR ORTHOTROPIC TIMOSHENKO PLATE WITH MIXED EDGE FIXING

A. V. Zemskov^{1,2} ✉, **A. V. Vestyak**¹, **D. V. Tarlakovskii**^{2,1}

¹ Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russia;

² Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

✉ azemskov1975@mail.ru

Abstract. In the paper, the coupled elastic-diffusion processes arising as a result of unsteady bending vibrations of an orthotropic plate that has a cantilever fastening on one side and hinged support on the sides adjacent to the cantilever have been analyzed. For a mathematical

description of physical and mechanical processes, the Timoshenko plate model supplemented with mass transfer equations taking into account the finite speed of propagation of diffusion flows was used. The solution algorithm was based on the use of the equivalent boundary conditions method allowing to express the solution to the problem posed through a known solution to some auxiliary problem of a given class. The nature of the interaction between mechanical and diffusion fields was simulated using the example of a bendable three-component plate.

Keywords: elastic diffusion, cantilever plate, method of equivalent boundary conditions, Timoshenko plate

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 20-19-00217, <https://rscf.ru/project/20-19-00217/>).

For citation: Zemskov A. V., Vestyak A. V., Tarlakovskii D. V., A model of unsteady mech-anodiffusion vibrations of a rectangular orthotropic Timoshenko plate with mixed edge fixing, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 57–75. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17306>

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

Введение

В работе рассматривается вопрос о взаимодействии механического и диффузионного полей, возникающий при расчетах тонкостенных элементов конструкций (балок, пластин или оболочек), которые эксплуатируются в условиях нестационарных внешних воздействий, при наличии агрессивных сред и высокой температуры (нефте- и газопроводы, системы отопления и пр.).

Известно, что механодиффузионные процессы проявляются особенно ярко в высокоэластичных полимерах. Однако взаимодействие механических и диффузионных полей в таких материалах носит существенно нелинейный характер, и для их описания требуются модели, основанные на соотношениях, позволяющих рассматривать процессы массопереноса для произвольных упругих деформаций с учетом геометрической и физической нелинейности свойств материала [1].

Экспериментальные исследования в области механодиффузии широко проводятся с середины XX века. Из работ, наиболее близких к рассматриваемой теме, следует отметить статью [2], где анализируется влияние деформаций на массоперенос в пластине из поликристаллического никеля, покрытой медью, к краям которой приложена растягивающая нагрузка. В результате экспериментов было выявлено значительное различие (до 53 %) средних концентраций по толщине пластины при наличии и в отсутствие нагрузок.

Несмотря на стойкий интерес к задачам упругости с учетом диффузии (а также с учетом температурных и прочих полей), отмеченный со второй половины XX века, математическому моделированию механодиффузионных процессов в стержнях, пластинах и оболочках посвящено сравнительно небольшое число работ.

Следует выделить публикации [3 – 6], в которых изучается влияние температурных и диффузионных факторов на напряженно-деформированное пологой трансверсально-изотропной оболочки. При этом в работе [6] дается вариационная постановка термодиффузионной задачи для контактирующих гладких слоистых оболочек. Исследование в квазистатическом приближении осесимметричного напряженного состояния нагретой трансверсально-изотропной сферической оболочки с круговым отверстием при диффузионном насыщении предложено в статьях [7, 8]. Публикации [9 – 16] посвящены решению краевых задач, описывающих термомеханодиффузионные явления в балках Бернулли – Эйлера и пластинах Кирхгофа.

Из приведенного краткого обзора можно сделать вывод, что основное внимание уделялось преимущественно анализу квазистатических термомеханодиффузионных процессов. Нестационарные модели, рассмотренные в работах [11, 14], посвящены лишь решениям задач для пластин Кирхгофа [11] и балок Бернулли – Эйлера [14].

В данной работе предложена модель нестационарных упругодиффузионных колебаний пластины, основанная на гипотезах Тимошенко [17 – 20].

Учитывая известные сложности с решением задач для консольно-закрепленных балок и пластин, предлагается использовать метод эквивалентных граничных условий, основанный на замене рассматриваемой сложной задачи некоторой вспомогательной, которая отличается от исходной только граничными условиями. Эти условия подбираются так, чтобы имелась возможность получить аналитическое решение вспомогательной задачи, которое, в данном случае, находится с помощью рядов Фурье и преобразования Лапласа. Затем строятся соотношения, связывающие между собой правые части граничных условий обеих задач. Решение же исходной задачи выражается через решение вспомогательной.

Предложенный подход ранее применялся при решении задач о нестационарных упругодиффузионных колебаниях консольно-закрепленных балок Бернулли – Эйлера [21, 22] и Тимошенко [23], а также при моделировании механодиффузионных процессов в цилиндрических телах.

В качестве еще одного практического применения следует отметить, что датчики на основе микроконсолей в виде балок и пластинок малого размера (микрорантеливеры) широко используются для физических, химических и биологических измерений [24 – 26]. Принцип их действия основан на том, что форма колебаний этих балок изменяется, когда определенная масса вещества адсорбируется на их поверхности. Такие устройства широко применяются в медицине, в частности для анализа заболеваний, обнаружения точечных мутаций, мониторинга уровня глюкозы в крови и пр.

Постановка основной задачи

Рассматривается задача о нестационарных колебаниях прямоугольной ортотропной многокомпонентной пластины Тимошенко, консольно-закрепленной с одной стороны. Примыкающие к консоли стороны являются шарнирно опертными. Пластина имеет размеры $l_1^* \times l_2^*$ и толщину h^* . Схема нагружения и закрепления краев пластины показана на рис. 1.

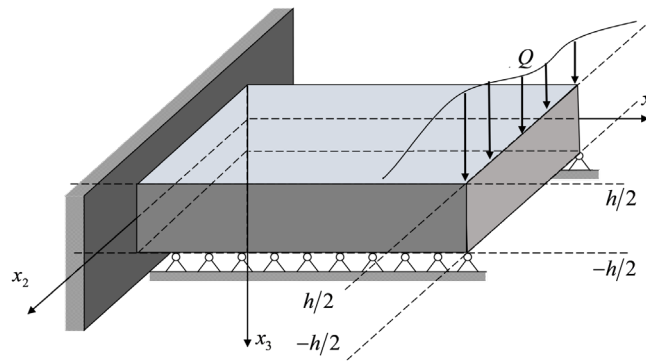


Рис. 1. Иллюстрация к постановке основной задачи:
 h – толщина консольно-закрепленной пластины; Q – поперечная сила, распределенная по свободному краю

Уравнение поперечных колебаний пластины с учетом диффузии имеет следующий вид [17, 18]:

$$\begin{aligned} \ddot{\chi}_1 &= \frac{\partial^2 \chi_1}{\partial x_1^2} + C_{66} \frac{\partial^2 \chi_1}{\partial x_2^2} + \frac{12C_{55}k_T^2}{h^2} \left(\frac{\partial w}{\partial x_1} - \chi_1 \right) + (C_{12} + C_{66}) \frac{\partial^2 \chi_2}{\partial x_1 \partial x_2} + \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} \frac{\partial H_j}{\partial x_1}, \\ \ddot{\chi}_2 &= C_{66} \frac{\partial^2 \chi_2}{\partial x_1^2} + C_{22} \frac{\partial^2 \chi_2}{\partial x_2^2} + \frac{12C_{44}k_T^2}{h^2} \left(\frac{\partial w}{\partial x_2} - \chi_2 \right) + (C_{12} + C_{66}) \frac{\partial^2 \chi_1}{\partial x_1 \partial x_2} + \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} \frac{\partial H_j}{\partial x_2}, \\ \dot{w} &= C_{55}k_T^2 \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x_1^2} - \frac{\partial \chi_1}{\partial x_1} \right) + C_{44}k_T^2 \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x_2^2} - \frac{\partial \chi_2}{\partial x_2} \right), \end{aligned}$$

$$\sum_{k=1}^K \frac{\tau_q^{k-1}}{(k-1)!} \frac{\partial^k H_q}{\partial \tau^k} = D_1^{(q)} \frac{\partial^2 H_q}{\partial x_1^2} + D_2^{(q)} \frac{\partial^2 H_q}{\partial x_2^2} + \Lambda_{11}^{(q)} \frac{\partial^3 \chi_1}{\partial x_1^3} + \Lambda_{12}^{(q)} \frac{\partial^3 \chi_2}{\partial x_1^2 \partial x_2} + \Lambda_{21}^{(q)} \frac{\partial^3 \chi_1}{\partial x_1 \partial x_2^2} + \Lambda_{22}^{(q)} \frac{\partial^3 \chi_2}{\partial x_2^3}. \quad (1)$$

Точки означают производную по времени. Все величины в уравнениях (1) и на рис. 1 являются безразмерными. Для них используются следующие обозначения:

$$x_i = \frac{x_i^*}{l}, \quad w = \frac{w^*}{l}, \quad \tau = \frac{Ct}{l}, \quad C_{\alpha\beta} = \frac{C_{\alpha\alpha\beta\beta}}{C_{1111}}, \quad C_{44} = \frac{C_{2323}}{C_{1111}}, \quad C_{55} = \frac{C_{1313}}{C_{1111}}, \quad C_{66} = \frac{C_{1212}}{C_{1111}},$$

$$l_m = \frac{l_m^*}{l}, \quad m_i = \frac{lm_i^*}{C_{1111}}, \quad z_q = \frac{lz^{(q)}}{C}, \quad C^2 = \frac{C_{1111}}{\rho}, \quad h = \frac{h^*}{l}, \quad C_{11} = C_{22} = C_{12} + 2C_{66},$$

$$\alpha_i^{(q)} = \frac{\alpha_{ii}^{(q)}}{C_{1111}}, \quad D_i^{(q)} = \frac{D_{ii}^{(q)}}{Cl}, \quad \Lambda_{ij}^{(q)} = \frac{m^{(q)} D_{ii}^{(q)} \alpha_{jj}^{(q)} n_0^{(q)}}{\rho RT_0 Cl}, \quad Q = \frac{lQ^*}{C_{1111}}, \quad \tau_q = \frac{C\tau^{(q)}}{l},$$

где t – время; x_i^* – прямоугольные декартовы координаты; w^* – прогиб пластины; χ_i – углы поворота волокна, нормального к срединной поверхности; l – характерный линейный масштаб задачи; H_q – плотность приращения концентрации q -й компоненты вещества в составе $(N+1)$ -компонентной среды; $n_0^{(q)}$ – начальная концентрации q -го вещества; C_{ijkl} – упругие постоянные; ρ – плотность вещества пластины; $\alpha_{ij}^{(q)}$ – коэффициенты, характеризующие связь механического и диффузионного полей; $D_{ij}^{(q)}$ – коэффициенты диффузии; R – универсальная газовая постоянная; T_0 – начальная температура среды; Q – поперечная сила, распределенная по свободному краю $x_1 = l_1$; $\tau^{(q)}$ – время релаксации диффузионных потоков [27]; $k_T = \sqrt{5/6}$ – коэффициент, учитывающий неравномерность распределения касательных напряжений по толщине пластины [19, 28].

Уравнения (1) дополняются нулевыми начальными условиями и краевыми условиями, которые для случая консольного закрепления вдоль края $x_1 = 0$ имеют вид

$$w|_{x_1=0} = 0, \quad \chi_1|_{x_1=0} = 0, \quad H_q|_{x_1=0} = 0, \quad \chi_2|_{x_1=0} = 0, \quad \chi_2|_{x_1=l_1} = 0,$$

$$\left(C_{12} \frac{\partial \chi_1}{\partial x_1} + C_{22} \frac{\partial \chi_2}{\partial x_2} + \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} H_j \right) \Big|_{x_2=0} = 0, \quad \left(\frac{\partial \chi_2}{\partial x_1} + \frac{\partial \chi_1}{\partial x_2} \right) \Big|_{x_1=l_1} = 0,$$

$$\left(D_1^{(q)} \frac{\partial H_q}{\partial x_1} + \Lambda_{11}^{(q)} \frac{\partial^2 \chi_1}{\partial x_1^2} + \Lambda_{12}^{(q)} \frac{\partial^2 \chi_2}{\partial x_1 \partial x_2} \right) \Big|_{x_1=l_1} = 0, \quad \left(\frac{\partial w}{\partial x_1} - \chi_1 \right) \Big|_{x_1=l_1} = \frac{Q}{hC_{55}},$$

$$\left(C_{12} \frac{\partial \chi_1}{\partial x_1} + C_{22} \frac{\partial \chi_2}{\partial x_2} + \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} H_j \right) \Big|_{x_2=l_2} = 0, \quad \left(\frac{\partial \chi_1}{\partial x_1} + C_{12} \frac{\partial \chi_2}{\partial x_2} + \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} H_j \right) \Big|_{x_1=l_1} = 0, \quad (2)$$

$$\chi_1|_{x_2=0} = 0, \quad w|_{x_2=0} = 0, \quad H_q|_{x_2=0} = 0, \quad \chi_1|_{x_2=l_2} = 0, \quad w|_{x_2=l_2} = 0, \quad H_q|_{x_2=l_2} = 0.$$

Формулировка и решение вспомогательной задачи

Для решения сформулированной задачи используется метод эквивалентных граничных условий [21 – 23], в соответствии с которым вместо задачи (1), (2) вначале рассматривается вспомогательная задача, описываемая теми же уравнениями (1), но с другими граничными условиями (геометрия рассматриваемой области при этом сохраняется). Эти граничные условия имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
 w|_{x_1=0} = 0, \quad \chi_1|_{x_2=0} = 0, \quad w|_{x_2=0} = 0, \quad H_q|_{x_2=0} = 0, \quad H_q|_{x_1=0} = 0, \quad \chi_2|_{x_1=0} = 0, \\
 \left(C_{12} \frac{\partial \chi_1}{\partial x_1} + C_{22} \frac{\partial \chi_2}{\partial x_2} + \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} H_j \right) \Big|_{x_2=0} = 0, \quad \left(\frac{\partial \chi_1}{\partial x_1} + C_{12} \frac{\partial \chi_2}{\partial x_2} + \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} H_j \right) \Big|_{x_1=0} = f_2, \\
 \left(D_1^{(q)} \frac{\partial H_q}{\partial x_1} + \Lambda_{11}^{(q)} \frac{\partial^2 \chi_1}{\partial x_1^2} + \Lambda_{12}^{(q)} \frac{\partial^2 \chi_2}{\partial x_1 \partial x_2} \right) \Big|_{x_1=l_1} = 0, \quad \left(\frac{\partial w}{\partial x_1} - \chi_1 \right) \Big|_{x_1=l_1} = f_3 = \frac{Q}{hC_{55}}, \\
 \left(\frac{\partial \chi_2}{\partial x_1} + \frac{\partial \chi_1}{\partial x_2} \right) \Big|_{x_1=l_1} = 0, \quad \left(C_{12} \frac{\partial \chi_1}{\partial x_1} + C_{22} \frac{\partial \chi_2}{\partial x_2} + \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} H_j \right) \Big|_{x_2=l_2} = 0, \\
 \chi_1|_{x_1=l_1} = f_1, \quad \chi_1|_{x_2=l_2} = 0, \quad w|_{x_2=l_2} = 0, \quad H_q|_{x_2=l_2} = 0.
 \end{aligned} \tag{3}$$

Здесь $f_1(x_2, \tau)$, $f_2(x_2, \tau)$ – неизвестные функции, в дальнейшем подлежащие определению. Начальные условия остаются нулевыми.

Решение задачи (1), (2) ищется в интегральной форме ($i = 1, 2$):

$$\begin{bmatrix} \chi_i(x_1, x_2, \tau) \\ w(x_1, x_2, \tau) \\ H_q(x_1, x_2, \tau) \end{bmatrix} = \int_0^\tau \int_0^{l_2} \sum_{k=1}^3 \begin{bmatrix} G_{ik}(x_1, x_2, \xi, \tau - t) \\ G_{3k}(x_1, x_2, \xi, \tau - t) \\ G_{q+3,k}(x_1, x_2, \xi, \tau - t) \end{bmatrix} f_k(\xi, t) d\xi dt, \tag{4}$$

где G_{ik} – функции Грина, удовлетворяющие начально-краевой задаче:

$$\begin{aligned}
 \ddot{G}_{1k} &= \frac{\partial^2 G_{1k}}{\partial x_1^2} + C_{66} \frac{\partial^2 G_{1k}}{\partial x_2^2} + \frac{12C_{55}k_T^2}{h^2} \left(\frac{\partial G_{3k}}{\partial x_1} - G_{1k} \right) + \\
 &+ (C_{12} + C_{66}) \frac{\partial^2 G_{2k}}{\partial x_1 \partial x_2} + \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} \frac{\partial G_{j+3,k}}{\partial x_1}, \\
 \ddot{G}_{3k} &= C_{55}k_T^2 \left(\frac{\partial^2 G_{3k}}{\partial x_1^2} - \frac{\partial G_{1k}}{\partial x_1} \right) + C_{44}k_T^2 \left(\frac{\partial^2 G_{3k}}{\partial x_2^2} - \frac{\partial G_{2k}}{\partial x_2} \right), \\
 \ddot{G}_{2k} &= C_{66} \frac{\partial^2 G_{2k}}{\partial x_1^2} + C_{22} \frac{\partial^2 G_{2k}}{\partial x_2^2} + \frac{12C_{44}k_T^2}{h^2} \left(\frac{\partial G_{3k}}{\partial x_2} - G_{2k} \right) + \\
 &+ (C_{12} + C_{66}) \frac{\partial^2 G_{1k}}{\partial x_1 \partial x_2} + \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} \frac{\partial G_{j+3,k}}{\partial x_2},
 \end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}
 \sum_{k=1}^K \frac{\tau^{k-1}}{(k-1)!} \frac{\partial^k G_{q+3,k}}{\partial \tau^k} &= D_1^{(q)} \frac{\partial^2 G_{q+3,k}}{\partial x_1^2} + D_2^{(q)} \frac{\partial^2 G_{q+3,k}}{\partial x_2^2} + \\
 &+ \Lambda_{11}^{(q)} \frac{\partial^3 G_{1k}}{\partial x_1^3} + \Lambda_{12}^{(q)} \frac{\partial^3 G_{2k}}{\partial x_1^2 \partial x_2} + \Lambda_{21}^{(q)} \frac{\partial^3 G_{1k}}{\partial x_1 \partial x_2^2} + \Lambda_{22}^{(q)} \frac{\partial^3 G_{2k}}{\partial x_2^3}; \\
 \left(\frac{\partial G_{1k}}{\partial x_1} + C_{12} \frac{\partial G_{2k}}{\partial x_2} + \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} G_{j+3,k} \right) \Big|_{x_1=0} &= \delta_{2k} \delta(\tau) \delta(x_2 - \xi), \quad G_{3k}|_{x_1=0} = 0, \\
 G_{1k}|_{x_2=0} = 0, \quad G_{2k}|_{x_1=0} = 0, \quad G_{q+3,k}|_{x_1=0} = 0, \quad G_{q+3,k}|_{x_2=0} = 0, \quad G_{q+3,k}|_{x_2=l_2} = 0,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left(C_{12} \frac{\partial G_{1k}}{\partial x_1} + C_{22} \frac{\partial G_{2k}}{\partial x_2} + \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} G_{j+3,k} \right) \Big|_{x_2=0} = 0, \quad G_{3k} \Big|_{x_2=0} = 0, \quad G_{3k} \Big|_{x_2=l_2} = 0, \\
 & \left(C_{12} \frac{\partial G_{1k}}{\partial x_1} + C_{22} \frac{\partial G_{2k}}{\partial x_2} + \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} G_{j+3,k} \right) \Big|_{x_2=l_2} = 0, \quad G_{1k} \Big|_{x_2=l_2} = 0, \\
 & \left(\frac{\partial G_{3k}}{\partial x_1} - G_{1k} \right) \Big|_{x_1=l_1} = \delta_{3k} \delta(\tau) \delta(x_2 - \xi), \quad G_{1k} \Big|_{x_1=l_1} = \delta_{1k} \delta(\tau) \delta(x_2 - \xi), \\
 & \left(D_1^{(q)} \frac{\partial G_{q+3,k}}{\partial x_1} + \Lambda_{11}^{(q)} \frac{\partial^2 G_{1k}}{\partial x_1^2} + \Lambda_{12}^{(q)} \frac{\partial^2 G_{2k}}{\partial x_1 \partial x_2} \right) \Big|_{x_1=l_1} = 0, \quad \left(\frac{\partial G_{1k}}{\partial x_2} + \frac{\partial G_{2k}}{\partial x_1} \right) \Big|_{x_1=l_1} = 0.
 \end{aligned} \tag{6}$$

С помощью преобразования Лапласа и разложения в ряды Фурье задача (5), (6) приводится к системе линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned}
 & k_{1nm}(s) G_{1knm}^L(\xi, s) + K_{nm} G_{2knm}^L(\xi, s) - C_{55} k_T^2 \lambda_n G_{3knm}^L(\xi, s) - \\
 & \quad - \lambda_n \sum_{q=1}^N \alpha_1^{(q)} G_{q+3, knm}^L(\xi, s) = F_{1knm}(\xi), \\
 & K_{nm} G_{1knm}^L(\xi, s) + k_{2nm}(s) G_{2knm}^L(\xi, s) - C_{44} k_T^2 \mu_m G_{3knm}^L(\xi, s) - \\
 & \quad - \mu_m \sum_{q=1}^N \alpha_2^{(q)} G_{q+3, knm}^L(\xi, s) = F_{2knm}(\xi), \\
 & -C_{55} k_T^2 \lambda_n G_{1knm}^L(\xi, s) - C_{44} k_T^2 \mu_m G_{2knm}^L(\xi, s) + k_3(s) G_{3knm}^L(\xi, s) = F_{3knm}(\xi), \\
 & k_{q+3, nm}(s) G_{q+3, knm}^L(\xi, s) - M_{1qnm} G_{1knm}^L(\xi, s) - M_{2qnm} G_{2knm}^L(\xi, s) = F_{q+3, knm}(\xi),
 \end{aligned} \tag{7}$$

где использованы следующие обозначения:

$$\begin{aligned}
 k_{1nm}(s) &= s^2 + \frac{12}{h^2} C_{55} k_T^2 + \lambda_n^2 + C_{66} \mu_m^2, \quad k_{2nm}(s) = s^2 + \frac{12}{h^2} C_{44} k_T^2 + C_{66} \lambda_n^2 + C_{22} \mu_m^2, \\
 k_{3nm}(s) &= s^2 + C_{55} k_T^2 \lambda_n^2 + C_{44} k_T^2 \mu_m^2, \quad K_{nm} = (C_{12} + C_{66}) \lambda_n \mu_m, \\
 M_{1qnm} &= \lambda_n \left(\Lambda_{11}^{(q)} \lambda_n^2 + \Lambda_{21}^{(q)} \mu_m^2 \right), \quad M_{2qnm} = \mu_m \left(\Lambda_{12}^{(q)} \lambda_n^2 + \Lambda_{22}^{(q)} \mu_m^2 \right), \\
 F_{1knm}(\xi) &= \frac{4}{l_1 l_2} \left[\lambda_n (-1)^n \delta_{1k} - \delta_{2k} \right] \sin \mu_m \xi, \quad k_{q+3, nm}(s) = \sum_{k=0}^{K-1} \frac{\tau^k}{k!} s^{k+1} + D_1^{(q)} \lambda_n^2 + D_2^{(q)} \mu_m^2, \\
 F_{2knm}(\xi) &= \frac{4}{l_1 l_2} C_{12} \mu_m (-1)^n \delta_{1k} \sin \mu_m \xi, \quad F_{3knm}(\xi) = \frac{4}{l_1 l_2} C_{55} k_T^2 (-1)^n \delta_{3k} \sin \mu_m \xi, \\
 F_{q+3, knm}(\xi) &= \frac{4}{l_1 l_2} \Lambda_{11}^{(q)} \lambda_n \left[\delta_{2k} - \lambda_n (-1)^n \delta_{1k} \right] \sin \mu_m \xi, \quad \lambda_n = \frac{\pi}{l_1} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \mu_m = \frac{\pi m}{l_2};
 \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} G_{1k}^L(x_1, x_2, \xi, s) \\ G_{2k}^L(x_1, x_2, \xi, s) \\ G_{pk}^L(x_1, x_2, \xi, s) \end{bmatrix} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \begin{bmatrix} G_{1knm}^L(\xi, s) \cos \lambda_n x_1 \sin \mu_m x_2 \\ G_{2knm}^L(\xi, s) \sin \lambda_n x_1 \cos \mu_m x_2 \\ G_{pknm}^L(\xi, s) \sin \lambda_n x_1 \sin \mu_m x_2 \end{bmatrix}, \quad p \geq 3. \tag{8}$$

В результате решения системы (7) получаем:

$$\begin{aligned}
 G_{iknm}^L(\xi, s) &= G_{iknm}^{Ls}(s) \sin \mu_m \xi, \quad G_{iknm}^{Ls}(s) = \frac{P_{iknm}(s)}{P_{nm}(s)} \quad (i = 1, 2), \\
 G_{3knm}^L(\xi, s) &= \frac{F_{3knm}(\xi)}{k_{3nm}(s)} + G_{3knm}^{Ls}(s) \sin \mu_m \xi, \quad G_{3knm}^{Ls}(s) = \frac{P_{3knm}(s)}{Q_{0nm}(s)}, \\
 G_{q+3, knm}^L(\xi, s) &= \frac{F_{q+3, knm}(\xi)}{k_{q+3, nm}(s)} + G_{q+3, knm}^{Ls}(s) \sin \mu_m \xi, \quad G_{q+3, knm}^{Ls}(s) = \frac{P_{q+3, knm}(s)}{Q_{qnm}(s)}.
 \end{aligned} \tag{9}$$

Здесь $P_{iknm}(s)$, $P_{nm}(s)$, и $Q_{pnm}(s)$ – многочлены от s , имеющие вид

$$\begin{aligned}
 P_{nm}(s) &= [k_{1nm}(s)S_{1nm}(s) + k_{2nm}(s)S_{2nm}(s) - K_{nm}S_{3nm}(s)]\Pi_{nm}(s) + \\
 &+ \left[\frac{12}{h^2} K_{nm} C_{44} C_{55} k_T^4 \mu_m \lambda_n - k_{1nm}(s)k_{2nm}(s)k_{3nm}(s) \right] \Pi_{nm}(s) - \\
 &- \mu_m S_{2nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} M_{2jnm} \Pi_{jnm}(s) - \lambda_n S_{1nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} M_{1jnm} \Pi_{jnm}(s) + \\
 &+ S_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N (\mu_m \alpha_2^{(j)} M_{1j} + \lambda_n \alpha_1^{(j)} M_{2j}) \Pi_{jnm}(s) + \\
 &+ \lambda_n \mu_m k_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N M_{1i} M_{2j} A_{ij} \Pi_{ijnm}(s),
 \end{aligned} \tag{10}$$

$$\Pi_{nm}(s) = \prod_{q=1}^n k_{q+3, nm}(s), \quad \Pi_{inm}(s) = \prod_{q=1, q \neq i}^n k_{q+3, nm}(s),$$

$$\Pi_{ijnm}(s) = \prod_{q=1, q \neq i, j}^n k_{q+3, nm}(s), \quad \Pi_{ijnm}(s) = \Pi_{jinm}(s),$$

$$Q_{0nm}(s) = k_{3nm}(s)P_{nm}(s), \quad Q_{qnm}(s) = k_{q+3, nm}(s)P_{nm}(s),$$

$$P_{3knm}(\xi, s) = C_{55} k_T^2 \lambda_n P_{1knm}(\xi, s) + C_{44} k_T^2 \mu_m P_{2knm}(\xi, s),$$

$$P_{q+3, knm}(\xi, s) = M_{1qnm} P_{1knm}(\xi, s) + M_{2qnm} P_{2knm}(\xi, s),$$

$$\begin{aligned}
 P_{11nm}(s) &= \frac{4}{l_1 l_2} \lambda_n (-1)^n \left[S_{1nm}(s) \Pi_{nm}(s) - \mu_m k_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} M_{2jnm} \Pi_{jnm}(s) \right] - \\
 &- \frac{4}{l_1 l_2} C_{12} \mu_m (-1)^n \left[S_{3nm}(s) \Pi_{nm}(s) - \lambda_n k_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} M_{2jnm} \Pi_{jnm}(s) \right] - \\
 &- \frac{4}{l_1 l_2} \lambda_n^2 (-1)^n \left[\lambda_n S_{1nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} \Lambda_{11}^{(j)} \Pi_{jnm}(s) - \mu_m S_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} \Lambda_{11}^{(j)} \Pi_{jnm}(s) \right] + \\
 &+ \frac{4}{l_1 l_2} (-1)^n \lambda_n^3 \mu_m k_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N A_{ji} \Lambda_{11}^{(j)} M_{2j} \Pi_{jinm}(s),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_{12nm}(\xi, s) &= -\frac{4}{l_1 l_2} \left[S_{1nm}(s) \Pi_{nm}(s) - \mu_m k_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} M_{2jnm} \Pi_{jnm}(s) \right] + \\
 &+ \frac{4}{l_1 l_2} \lambda_n \left[\lambda_n S_{1nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} \Lambda_{11}^{(j)} \Pi_{jnm}(s) - \mu_m S_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} \Lambda_{11}^{(j)} \Pi_{jnm}(s) \right] + \\
 &+ \frac{4}{l_1 l_2} \lambda_n^2 \mu_m k_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N A_{ij} \Lambda_{11}^{(j)} M_{2jnm} \Pi_{ijnm}(s), \\
 P_{13nm}(s) &= \frac{4}{l_1 l_2} \frac{12}{h^2} C_{55} k_T^2 (-1)^n \left[S_{4nm}(s) \Pi_{nm}(s) - \lambda_n \mu_m \sum_{j=1}^N A_j M_{2jnm} \Pi_{jnm}(s) \right], \\
 P_{21nm}(s) &= -\frac{4}{l_1 l_2} \lambda_n (-1)^n \left[S_{3nm}(s) \Pi_{nm}(s) - \mu_m k_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} M_{1jnm} \Pi_{jnm}(s) \right] + \\
 &+ \frac{4}{l_1 l_2} C_{12} \mu_m (-1)^n \left[S_{2nm}(s) \Pi_{nm}(s) - \lambda_n k_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} M_{1jnm} \Pi_{jnm}(s) \right] - \\
 &- \frac{4}{l_1 l_2} \lambda_n^2 (-1)^n \left[\mu_m S_{2nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} \Lambda_{11}^{(j)} \Pi_{jnm}(s) - \lambda_n S_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} \Lambda_{11}^{(j)} \Pi_{jnm}(s) \right] - \\
 &- \frac{4}{l_1 l_2} (-1)^n \lambda_n^3 \mu_m k_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N A_{ji} \Lambda_{11}^{(j)} M_{1jnm} \Pi_{jinm}(s), \\
 P_{23nm}(s) &= \frac{4}{l_1 l_2} \frac{12}{h^2} C_{55} k_T^2 (-1)^n \left[S_{5nm}(s) \Pi_{nm}(s) + \lambda_n \mu_m \sum_{j=1}^N A_j M_{1j} \Pi_{jnm}(s) \right], \\
 P_{22nm}(s) &= \frac{4}{l_1 l_2} \left[S_{3nm}(s) \Pi_{nm}(s) - \mu_m k_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} M_{1j} \Pi_{jnm}(s) \right] + \\
 &+ \frac{4}{l_1 l_2} \lambda_n \left[\mu_m S_{2nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_2^{(j)} \Lambda_{11}^{(j)} \Pi_{jnm}(s) - \lambda_n S_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} \Lambda_{11}^{(j)} \Pi_{jnm}(s) \right] + \\
 &+ \frac{4}{l_1 l_2} \lambda_n^2 \mu_m k_{3nm}(s) \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N A_{ji} \Lambda_{11}^{(j)} M_{1jnm} \Pi_{jinm}(s), \\
 S_{1nm}(s) &= k_{2nm}(s) k_{3nm}(s) - \frac{12}{h^2} C_{44} k_T^4 \mu_m^2, \quad A_{ji} = \alpha_1^{(j)} \alpha_2^{(i)} - \alpha_2^{(j)} \alpha_1^{(i)}, \\
 S_{2nm}(s) &= k_{1nm}(s) k_{3nm}(s) - \frac{12}{h^2} C_{55} k_T^4 \lambda_n^2, \quad A_j = k_T^2 (C_{55} \alpha_2^{(j)} - C_{44} \alpha_1^{(j)}), \\
 S_{3nm}(s) &= K_{nm} k_{3nm}(s) - \frac{12}{h^2} C_{44} C_{55} k_T^4 \mu_m \lambda_n, \\
 S_{4nm}(s) &= k_T^2 [C_{55} \lambda_n k_{2nm}(s) - K_{nm} C_{44} \mu_m], \quad S_{5nm}(s) = k_T^2 [k_{1nm}(s) C_{44} \mu_m - K_{nm} C_{55} \lambda_n].
 \end{aligned}$$

Переход в пространство оригиналов по Лапласу для рациональных функций $G_{pknm}^{Ls}(s)$, определенных равенствами (9), осуществляется с помощью вычетов и таблиц операционного исчисления [29]. Численный анализ показывает, что эти функции имеют только простые полюсы. Таким образом, их оригиналы запишутся следующим образом:

$$\begin{aligned}
 G_{iknm}^s(\tau) &= \sum_{j=1}^{\Sigma} A_{iknm}^{(j)} e^{s_{jnm} \tau} \quad (\Sigma = (K+1)N + K + 5, \quad i = \overline{1,2}, \quad q = \overline{1,N}, \quad k = \overline{1,3}), \\
 G_{3knm}^s(\tau) &= \sum_{j=1}^{\Sigma+2} A_{3knm}^{(j)} e^{s_{jnm} \tau} + \frac{4C_{55}k_T^2(-1)^n \delta_{3k}}{l_1 l_2} \sum_{j=\Sigma+1}^{\Sigma+2} \frac{e^{s_{jnm} \tau}}{k'_{3nm}(s_{jnm})}, \\
 G_{q+3,knm}^s(\tau) &= \sum_{j=1}^{\Sigma} A_{q+3,knm}^{(j)} e^{s_{jnm} \tau} + \sum_{j=1}^{K+1} A_{q+3,knm}^{(\Sigma+j)} e^{\gamma_{jnm}^{(q)} \tau} + \frac{4\Lambda^{(q)} \lambda_n [\delta_{2k} - \lambda_n (-1)^n \delta_{1k}]}{l_1 l_2} \sum_{j=1}^2 \frac{e^{\gamma_{jnm}^{(q)} \tau}}{k'_{j+3,nm}(\gamma_{jnm}^{(q)})}, \\
 A_{iknm}^{(j)} &= \frac{P_{iknm}(s_{jnm})}{P'_{nm}(s_{jnm})}, \quad A_{3knm}^{(r)} = \frac{P_{iknm}(s_{rnm})}{Q'_{0nm}(s_{rnm})} \quad (j = \overline{1,\Sigma}, \quad r = \overline{1,\Sigma+2}), \\
 A_{q+3,kl}^{(j)} &= \frac{P_{q+3,knm}(s_{jnm})}{Q'_{qnm}(s_{jnm})}, \quad A_{q+3,knm}^{(\Sigma+i)} = \frac{P_{q+3,knm}(\gamma_{jnm}^{(q)})}{Q'_{qnm}(\gamma_{jnm}^{(q)})},
 \end{aligned} \tag{11}$$

где s_{jnm} , $j = \overline{1,\Sigma}$ – нули полинома $P_{nm}(s)$; $\gamma_{jnm}^{(q)}$ – нули многочлена $k_{q+3,nm}(s)$; $s_{\Sigma+i,nm}$ – нули многочлена $k_{3nm}(s)$, определяемые по формулам

$$s_{\Sigma+1,nm} = -ik_T \sqrt{C_{55}\lambda_n^2 + C_{44}\mu_m^2}, \quad s_{\Sigma+2,nm} = ik_T \sqrt{C_{55}\lambda_n^2 + C_{44}\mu_m^2}.$$

Таким образом, с учетом решения (8) и (9) функции Грина вспомогательной задачи (1), (2) имеют вид

$$\begin{aligned}
 G_{1k}(x_1, x_2, \xi, \tau) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} G_{1knm}^s(\tau) \cos \lambda_n x_1 \sin \mu_m x_2 \sin \mu_m \xi, \quad \lambda_n = \frac{\pi}{l_1} \left(n + \frac{1}{2} \right), \\
 G_{2k}(x_1, x_2, \xi, \tau) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} G_{2knm}^s(\tau) \sin \lambda_n x_1 \cos \mu_m x_2 \sin \mu_m \xi, \quad \mu_m = \frac{\pi m}{l_2}, \\
 G_{pk}(x_1, x_2, \xi, \tau) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} G_{pknm}^s(\tau) \sin \lambda_n x_1 \sin \mu_m x_2 \sin \mu_m \xi, \quad p \geq 3,
 \end{aligned} \tag{13}$$

где функции $G_{iknm}^s(\tau)$ находятся по формулам (11) и (12).

Полагая в формулах (10) $\alpha_i^{(q)} = 0$, получаем функции Грина для упругой пластины Тимошенко.

Решение основной задачи

Далее, решение задачи (1), (3) подставляем в граничные условия (2). В результате приходим к системе интегральных уравнений относительно функций $f_1(x_2, \tau)$ и $f_2(x_2, \tau)$, введенных в граничные условия (3):

$$\begin{aligned}
 \int_0^{\tau} \int_0^{l_2} \sum_{k=1}^2 G_{1k}(0, x_2, \xi, \tau-t) f_k(\xi, t) d\xi dt &= - \int_0^{\tau} \int_0^{l_2} G_{13}(0, x_2, \xi, \tau-t) f_3(\xi, t) d\xi dt, \\
 \int_0^{\tau} \int_0^{l_2} \sum_{k=1}^2 \left[\frac{\partial G_{1k}(l_1, x_2, \xi, \tau-t)}{\partial x_1} + C_{12} \frac{\partial G_{2k}(l_1, x_2, \xi, \tau-t)}{\partial x_2} \right] f_k(\xi, t) d\xi dt &+ \\
 + \int_0^{\tau} \int_0^{l_2} \sum_{k=1}^2 \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} G_{j+3,k}(l_1, x_2, \xi, \tau-t) f_k(\xi, t) d\xi dt &=
 \end{aligned} \tag{14}$$

$$= - \int_0^{\tau} \int_0^{l_2} \left[\frac{\partial G_{13}(l_1, x_2, \xi, \tau - t)}{\partial x_1} + C_{12} \frac{\partial G_{23}(l_1, x_2, \xi, \tau - t)}{\partial x_2} \right] f_3(\xi, t) d\xi dt - \int_0^{\tau} \int_0^{l_2} \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} G_{j+3,3}(l_1, x_2, \xi, \tau - t) f_3(\xi, t) d\xi dt. \quad (14)$$

Исходя из вида функций Грина (13), внешнюю нагрузку $f_3(x_2, \tau)$ представляем в виде ряда

$$f_3(x_2, \tau) = \sum_{m=1}^{\infty} f_{3m}(\tau) \sin \mu_m x_2. \quad (15)$$

В аналогичной форме будем искать функции $f_k(x_2, \tau)$ ($k = 1, 2$):

$$f_k(x_2, \tau) = \sum_{m=1}^{\infty} f_{km}(\tau) \sin \mu_m x_2. \quad (16)$$

Если подставить ряд (15) и функции (16) в систему (14), то приходим к системе интегральных уравнений Вольтерры 1-го рода:

$$\sum_{j=1}^2 \int_0^{\tau} a_{ijm}(\tau - t) f_{jm}(t) dt = \varphi_{im}(\tau), \quad (17)$$

где использованы следующие обозначения:

$$a_{11m}(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} G_{11mn}^s(\tau), \quad a_{12m}(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} G_{12mn}^s(\tau),$$

$$a_{21m}(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left[-C_{12} \mu_m G_{21mn}^s(\tau) - \lambda_n G_{11mn}^s(\tau) + \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} G_{j+3,1mn}^s(\tau) \right],$$

$$a_{22m}(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left[-C_{12} \mu_m G_{22mn}^s(\tau) - \lambda_n G_{12mn}^s(\tau) + \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} G_{j+3,2mn}^s(\tau) \right],$$

$$\varphi_{1m}(\tau) = - \int_0^{\tau} \sum_{n=0}^{\infty} G_{13mn}^s(\tau - t) f_{3m}(t) dt,$$

$$\varphi_{2m}(\tau) = \int_0^{\tau} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left[C_{12} \mu_m G_{23mn}^s(\tau - t) + \lambda_n G_{13mn}^s(\tau - t) \right] f_{3m}(t) dt - \int_0^{\tau} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} G_{j+3,3mn}^s(\tau - t) f_{3m}(t) dt. \quad (18)$$

Путем интегрирования по частям система (17) приводится к виду

$$\sum_{j=1}^2 \int_0^{\tau} A_{ijm}(\tau - t) \frac{\partial f_{jm}^*(t)}{\partial t} dt = \varphi_{im}(\tau), \quad A_{ijm}(\tau) = \int_0^{\tau} a_{ijm}(t) dt \quad (19)$$

и далее решается численно. Для аппроксимации интегралов в системе (19) используется формула средних прямоугольников [21 – 23]:

$$\int_0^{t_k} A_{ijm}(t_k - t) \frac{\partial f_{jm}^*(t)}{\partial t} dt = h_t A_{ij}^{(1/2)} y_{jm}^{(k-1/2)} + h_t S_{ijm}^{(k-1/2)},$$

где $h_t = \tau / N_t$ – шаг разбиения, N_t – количество точек разбиения отрезка $[0, \tau]$. Остальные величины определяются как

$$t_k = kh_t, \quad t_{k-1/2} = \left(k - \frac{1}{2}\right) h_t, \quad S_{ijm}^{(k-1/2)} = \sum_{r=1}^{k-1} A_{ij}^{(k-r+1/2)} y_{jm}^{(r-1/2)},$$

$$y_{jm}^{(k)} = \frac{\partial f_{jm}^*(t_k)}{\partial \tau}, \quad y_{jm}^{(k-1/2)} = \frac{\partial f_{jm}^*(t_k - t_{1/2})}{\partial \tau}, \quad A_{ijm}^{(k)} = A_{ijm}(t_k) \quad (k = \overline{0, N_t}). \quad (20)$$

Таким образом, система интегральных уравнений (19) сводится к последовательности систем линейных алгебраических уравнений

$$\mathbf{A}_m \mathbf{y}_m^{(k-1/2)} = \mathbf{b}_m^{(k-1/2)}, \quad \mathbf{A}_m = \begin{pmatrix} A_{11m}^{(1/2)} & A_{12m}^{(1/2)} \\ A_{21m}^{(1/2)} & A_{22m}^{(1/2)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y}_m^{(k-1/2)} = \begin{pmatrix} y_{1m}^{(k-1/2)} \\ y_{2m}^{(k-1/2)} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{b}_m^{(k-1/2)} = \begin{pmatrix} b_{1m}^{(k-1/2)} \\ b_{2m}^{(k-1/2)} \end{pmatrix}, \quad b_{im}^{(k-1/2)} = \frac{1}{h_t} \left[\varphi_{im}(t_k) - h_t S_{i1m}^{(k-1/2)} - h_t S_{i2m}^{(k-1/2)} \right],$$

решения которых находятся по правилу Крамера:

$$y_{1m}^{(k-1/2)} = \frac{b_{1m}^{(k-1/2)} A_{22m}^{(1/2)} - b_{2m}^{(k-1/2)} A_{12m}^{(1/2)}}{A_{11m}^{(1/2)} A_{22m}^{(1/2)} - A_{12m}^{(1/2)} A_{21m}^{(1/2)}}, \quad y_{2m}^{(k-1/2)} = \frac{b_{2m}^{(k-1/2)} A_{11m}^{(1/2)} - b_{1m}^{(k-1/2)} A_{21m}^{(1/2)}}{A_{11m}^{(1/2)} A_{22m}^{(1/2)} - A_{12m}^{(1/2)} A_{21m}^{(1/2)}}. \quad (21)$$

Теперь, если представить свертки (4) в виде

$$\begin{bmatrix} \chi_i(x_1, x_2, t_j) \\ w(x_1, x_2, t_j) \\ H_q(x_1, x_2, t_j) \end{bmatrix} = \int_0^{t_j} \int_0^{t_j} \begin{bmatrix} G_{i3}(x_1, x_2, \xi, t_j - t) \\ G_{33}(x_1, x_2, \xi, t_j - t) \\ G_{q+3,3}(x_1, x_2, \xi, t_j - t) \end{bmatrix} f_3(\xi, t) d\xi dt +$$

$$+ h_t \int_0^{t_j} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=1}^2 \sum_{l=1}^j \begin{bmatrix} \tilde{G}_{iknm}(t_{j-l+1/2}) \cos \lambda_n x_1 \sin \mu_m x_2 \\ \tilde{G}_{3knm}(t_{j-l+1/2}) \sin \lambda_n x_1 \cos \mu_m x_2 \\ \tilde{G}_{q+3,knm}(t_{j-l+1/2}) \sin \lambda_n x_1 \sin \mu_m x_2 \end{bmatrix} y_{km}^{(l-1/2)} \sin \mu_m \xi d\xi,$$

$$\tilde{G}_{pknm}(\tau) = \int_0^{\tau} G_{pknm}^s(t) dt$$

и подставить туда равенства (21), то получаем решение исходной задачи (1), (2) об изгибе консольно-закрепленной пластины Тимошенко.

Предельный переход к статической задаче

Если положить в граничных условиях (3), что

$$f_k(\tau) = \tilde{f}_k H(\tau) \quad (k=1, 2), \quad f_3(\tau) = \tilde{f}_3 H(\tau),$$

($H(\tau)$ – функция Хевисайда), и перейти к пределу при $\tau \rightarrow \infty$, то получим решение задачи об изгибе пластины под действием статической нагрузки, приложенной к свободному краю.

Функции Грина статической задачи $G_{mk}^{(st)}(x_1, x_2, \xi)$ выражаются через функции Грина $G_{mk}(x_1, x_2, \xi, \tau)$ динамической задачи с помощью соотношений, приведенных в работах [22, 30]:

$$G_{mk}^{(st)}(x_1, x_2, \xi) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} [G_{mk}(x_1, x_2, \xi, \tau) * H(\tau)] =$$

$$= \lim_{s \rightarrow 0} \left[s G_{mk}^L(x_1, x_2, \xi, s) \frac{1}{s} \right] = \lim_{s \rightarrow 0} G_{mk}^L(x_1, x_2, \xi, s), \quad (23)$$

где звездочкой обозначена свертка по времени.

Выполняя этот предельный переход в свертках (4), получаем решение статической задачи в виде

$$\begin{bmatrix} \chi_i^{(st)}(x_1, x_2, \tau) \\ w^{(st)}(x_1, x_2, \tau) \\ H_q^{(st)}(x_1, x_2, \tau) \end{bmatrix} = \int_0^{t_j} \sum_{k=1}^3 \begin{bmatrix} G_{ik}^{(st)}(x_1, x_2, \xi) \\ G_{3k}^{(st)}(x_1, x_2, \xi) \\ G_{q+3,k}^{(st)}(x_1, x_2, \xi) \end{bmatrix} \tilde{f}_k(\xi) d\xi, \quad (24)$$

где

$$\begin{aligned}
 G_{1k}^{(st)}(x_1, x_2, \xi) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} G_{1knm}^{Ls}(0) \cos \lambda_n x_1 \sin \mu_m x_2 \sin \mu_m \xi, \quad \lambda_n = \frac{\pi}{l_1} \left(n + \frac{1}{2} \right), \\
 G_{2k}^{(st)}(x_1, x_2, \xi) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} G_{2knm}^{Ls}(0) \sin \lambda_n x_1 \cos \mu_m x_2 \sin \mu_m \xi, \quad \mu_m = \frac{\pi m}{l_2}, \\
 G_{pk}^{(st)}(x_1, x_2, \xi) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} G_{pknm}^{Ls}(0) \sin \lambda_n x_1 \sin \mu_m x_2 \sin \mu_m \xi, \quad p \geq 3.
 \end{aligned} \tag{25}$$

Здесь учтены соотношения (8) и решение (9).

Статический аналог системы уравнений (17) запишется как

$$\sum_{j=1}^2 \tilde{a}_{ijm} \tilde{f}_{jm} = \tilde{\varphi}_{im}. \tag{26}$$

В формуле (26), по аналогии с обозначениями (18), введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned}
 \tilde{a}_{11m} &= \sum_{n=0}^{\infty} G_{11nm}^{Ls}(0), \quad \tilde{a}_{12m} = \sum_{n=0}^{\infty} G_{12nm}^{Ls}(0), \\
 \tilde{a}_{21m} &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left[-C_{12} \mu_m G_{21nm}^{Ls}(0) - \lambda_n G_{11nm}^{Ls}(0) + \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} G_{q+3,1nm}^{Ls}(0) \right], \\
 \tilde{a}_{22m} &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left[-C_{12} \mu_m G_{22nm}^{Ls}(0) - \lambda_n G_{12nm}^{Ls}(0) + \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} G_{q+3,2nm}^{Ls}(0) \right], \\
 \tilde{\varphi}_{1m} &= -\sum_{n=0}^{\infty} G_{13mn}^{Ls}(0) f_{3m}, \quad \tilde{f}_k(\xi) = \sum_{m=1}^{\infty} \tilde{f}_{km} \sin \mu_m \xi, \\
 \tilde{\varphi}_{2m} &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left[C_{12} \mu_m G_{23mn}^{Ls}(0) + \lambda_n G_{13mn}^{Ls}(0) - \sum_{j=1}^N \alpha_1^{(j)} G_{j+3,3mn}^{Ls}(0) \right] \tilde{f}_{3m}.
 \end{aligned}$$

Решение системы (26) находится по формулам (21). При этом используются следующие соответствия:

$$y_{im}^{(k-1/2)} \leftrightarrow \tilde{f}_{jm}, \quad A_{ijm}^{(1/2)} \leftrightarrow \tilde{a}_{ijm}, \quad b_{im}^{(k-1/2)} \leftrightarrow \tilde{\varphi}_{im}.$$

Расчетный пример

Для моделирования физико-механических процессов возьмем трехкомпонентную пластину ($N = 2$), состоящую из сплава алюминия, цинка и меди (предполагается, что цинк и медь диффундируют в дюралюминии). Характеристики пластины и требуемые внешние условия представлены в таблице.

Полагаем, что пластина имеет размеры: $l_1^* = 0,01$ м, $l_2^* = 0,01$ м, $h^* = 0,0005$ м. Нагрузку на свободный край $x_1 = l_1$ задаем в следующем виде:

$$f_3(x_2, \tau) = -\varepsilon H(\tau) \sin x_2, \quad \varepsilon = 10^{-3}. \tag{27}$$

Подставив данные (27) в равенство (22), с учетом найденных функций Грина (13) и функций $\partial f_{km}(\tau)/\partial \tau$ из решений (21), получаем прогибы пластины, повороты нормальных волокон и плотности приращений концентраций цинка и меди. Результаты вычислений представлены на рис. 2–4.

Для расчета нестационарных механических полей используется 40 членов ряда Фурье и 40 точек разбиения для решения интегрального уравнения (19). Численные расчеты показывают, что увеличение указанных параметров не приводит к видимым изменениям полученных результатов. Так например, для прогибов пластины разница между 20-м и 40-м членами ряда составляет менее 1 %, для поворотов нормальных

Таблица

Расчетные параметры и их значения [30]

Параметр	Обозначение	Единица измерения	Значение		
Упругие постоянные	C_{1122}	Н/м ²	$6,93 \cdot 10^{10}$		
	$C_{1313} = C_{2323} = C_{1212}$		$2,56 \cdot 10^{10}$		
Плотность материала	ρ	кг/м ³	2700		
Линейный масштаб задачи	$l = h^*$	м	$5,0 \cdot 10^4$		
Начальная концентрация		–	цинка	$n_0^{(1)}$	0,0084
			меди	$n_0^{(2)}$	0,0450
Начальная температура среды	T_0	К	700		
Коэффициенты диффузии	$D_{11}^{*(1)} = D_{22}^{*(1)}$	м ² /с	$2,62 \cdot 10^{-12}$		
	$D_{11}^{*(2)} = D_{22}^{*(2)}$		$2,89 \cdot 10^{-15}$		
Молярная масса		кг/моль	цинка	$m^{(1)}$	0,027
			меди	$m^{(2)}$	0,064
Коэффициенты связанности полей	$\alpha_{11}^{*(1)} = \alpha_{22}^{*(1)}$	Дж/кг	$1,55 \cdot 10^7$		
	$\alpha_{11}^{*(2)} = \alpha_{22}^{*(2)}$		$6,14 \cdot 10^7$		

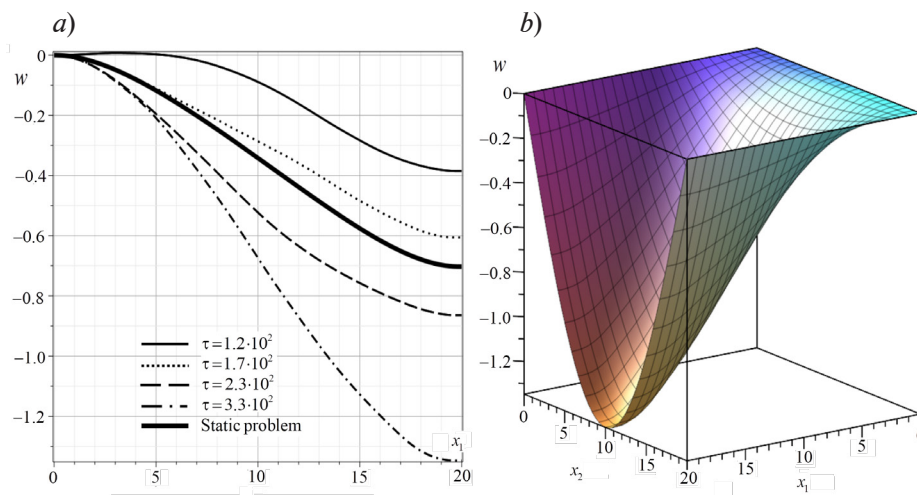


Рис. 2. Расчетные распределения прогиба пластины w на плоскости (a) и в пространстве (b): a – от закрепленного конца ($x_1 = 0$) к свободному ($x_1 = l_1$ – место приложения нагрузки) в разные моменты времени; b – в момент $\tau = 3,3 \cdot 10^2$ ($2,66 \cdot 10^{-5}$ с)

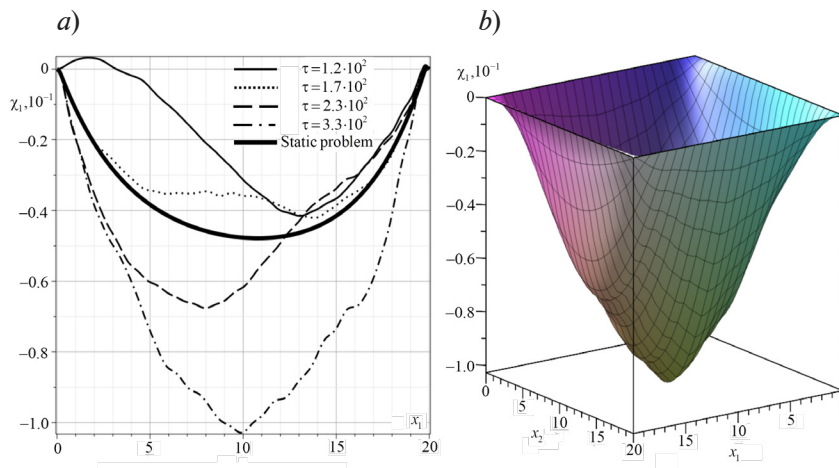


Рис. 3. Расчетные распределения поворотов χ_1 нормального волокна на плоскости (a) и в пространстве (b): a – от закрепленного конца ($x_1 = 0$) к свободному ($x_1 = 11$) в разные моменты времени; b – в момент $\tau = 3,3 \cdot 10^2$ ($2,66 \cdot 10^{-5}$ с)

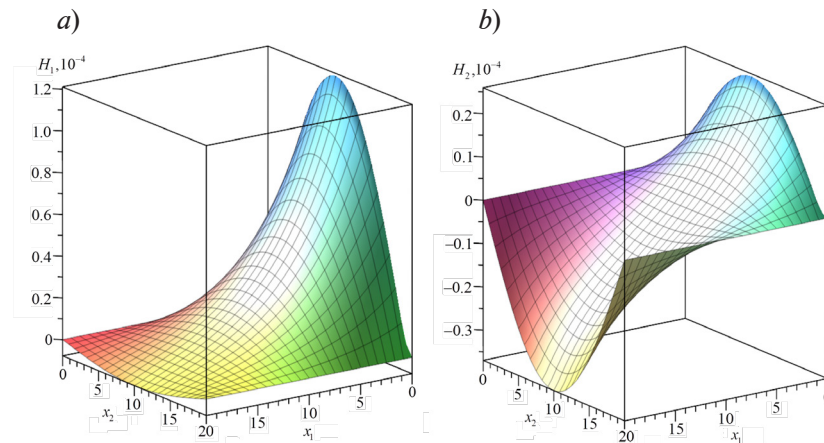


Рис. 4. Расчетные статические диффузионные поля, отражающие пространственные распределения плотности приращения концентраций цинка (a) и меди (b)

волокон – около 3 %. При расчете статических диффузионных полей использовалось 100 членов ряда Фурье.

Сравнение результатов для упругодиффузионной модели и упругой (при $\alpha_{ij}^{*(q)} = 0$) для расчетов изгиба консольно-закрепленной пластины Тимошенко показывает, что влияние массопереноса на механическое поле пластины на рассматриваемом промежутке времени пренебрежимо мало. Таким образом, графики на рис. 2 и 3 одинаково применимы как для упругой, так и упругодиффузионной задач. С другой стороны, можно видеть, что прогибы и повороты нормальных волокон при нестационарных нагрузках примерно вдвое больше, чем при статических (выделены жирными линиями на рис. 2 и 3).

Исследованные предельные переходы к упругой и статической моделям, помимо прочего, служат для верификации предложенного в работе алгоритма решения нестационарной задачи для консольно-закрепленной пластины Тимошенко. При этом решение статической задачи является аналитическим, что тоже очень важно при оценке корректности выполненного расчета.

На рис. 4 показаны статические диффузионные поля цинка и меди в составе рассматриваемого сплава, инициированные изгибными деформациями пластины. При заданной нестационарной нагрузке (27) эти значения являются предельными для плотностей приращения концентраций диффузанта при $\tau \rightarrow \infty$.

Найденные приращения концентраций имеют весьма небольшие значения, что подтверждается экспериментальными исследованиями [31], согласно которым влияние



механических нагрузок на диффузионное поле начинает существенно проявляться в основном при пластических деформациях. Таким образом, упругие деформации слабо влияют на кинетику массопереноса.

Ранее проводившиеся численные исследования на примере шарнирно-опертых балок [32] показали, что влияние диффузии на поле перемещений начинает сказываться по истечении определенного промежутка времени и проявляется, в основном, в виде фазовых сдвигов упругих и упругодиффузионных колебаний друг относительно друга. Однако эти различия наблюдаются на временном интервале, существенно превышающем указанный на рис. 2 и 3. В этом случае для расчетов требуется многократное увеличение количества точек разбиения при решении интегрального уравнения (19), что существенно увеличивает вычислительную емкость алгоритма и реально осуществимо только в тех случаях, когда задача может быть решена аналитически, как, например, в работе [32].

Заключение

Предложена модель нестационарных механодиффузионных колебаний консольно-закрепленной пластины Тимошенко с шарнирным опиранием по бокам, примыкающим к консоли. Разработан комплексный алгоритм, сочетающий метод разделения переменных и метод эквивалентных граничных условий, позволяющий найти решение соответствующей начально-краевой задачи. Верификация предложенного алгоритма основана на исследовании предельного перехода к упругой задаче для изгибаемой пластины Тимошенко, а также на сравнении с решением статической упругодиффузионной задачи.

Выполненный на примере трехкомпонентной пластины расчет позволяет промоделировать характер взаимодействия механического и диффузионного полей в изгибаемой пластине. Отмечено, что нестационарный изгиб консоли инициирует диффузионные потоки каждого из компонентов. При этом интенсивность возникающего массопереноса крайне невелика и фактически не оказывает обратного влияния на механические поля в изгибаемой пластине, что проверено путем сравнения полученного решения с решением упругой задачи для пластины Тимошенко.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Денисюк Е. Я., Терешатов В. В. Нелинейная теория процессов набухания эластомеров в низкомолекулярных жидкостях // Высокомолекулярные соединения А. 2000. Т. 42. № 1. С. 71–83.
2. Миколайчук М. А., Князева А. Г., Грабовецкая Г. П., Мишин И. П. Изучение влияния механических напряжений на диффузию в пластине с покрытием // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета (ПНИПУ). 2012. № 3. С. 120–134.
3. Флячок В. М., Швец Р. Н. Некоторые теоремы теории механодиффузии анизотропных оболочек // Математические методы и физико-механические поля. 1985. № 21. С. 32–37.
4. Швец Р. Н., Флячок В. М. Уравнения механодиффузии анизотропных оболочек с учетом поперечных деформаций // Математические методы и физико-механические поля. 1984. № 20. С. 54–61.
5. Швец Р. Н., Флячок В. М. Вариационный подход к решению динамических задач механотермодиффузии анизотропных оболочек // Математическая физика и нелинейная механика. 1991. № 16. С. 39–43.
6. Раврик М. С. Об одной вариационной формуле смешанного типа для контактных задач термодиффузионной теории деформации слоистых оболочек // Математические методы и физико-механические поля. 1985. № 22. С. 40–44.
7. Bhattacharya D., Kanoria M. The influence of two temperature generalized thermoelastic diffusion inside a spherical shell // International Journal of Engineering and Technical Research. 2014. Vol. 2. No. 5. Pp. 151–159.
8. Раврик М. С., Бичуя А. Л. Осесимметричное напряженное состояние нагретой трансверсально-изотропной сферической оболочки с круговым отверстием при диффузионном насыщении // Математические методы и физико-механические поля. 1983. № 17. С. 51–54.

9. **Aouadi M., Copetti M. I. M.** A dynamic contact problem for a thermoelastic diffusion beam with the rotational inertia // *Applied Numerical Mathematics*. 2018. Vol. 126. April. Pp. 113–137.
10. **Aouadi M., Copetti M. I. M.** Exponential stability and numerical analysis of a thermoelastic diffusion beam with rotational inertia and second sound // *Mathematics and Computers in Simulation*. 2021. Vol. 187. September. Pp. 586–613.
11. **Aouadi M., Miranville A.** Smooth attractor for a nonlinear thermoelastic diffusion thin plate based on Gurtin – Pipkin’s model // *Asymptotic Analysis*. 2015. Vol. 95. No.1–2. Pp. 129–160.
12. **Шевчук П. Р., Шевчук В. А.** Механодиффузионный эффект при изгибе двухслойного бруса // *Физико-химическая механика материалов*. 1987. Т. 23. № 6. С. 75–79.
13. **Huang M., Wei P., Zhao L., Li Y.** Multiple fields coupled elastic flexural waves in the thermoelastic semiconductor microbeam with consideration of small scale effects // *Composite Structures*. 2021. Vol. 270. 15 August. P. 114104.
14. **Kumar R., Devi S., Sharma V.** Resonance of nanoscale beam due to various sources in modified couple stress thermoelastic diffusion with phase lags // *Mechanical and Mechanics Engineering*. 2019. Vol. 23. July. Pp. 36–49.
15. **Aouadi M.** On thermoelastic diffusion thin plate theory // *Applied Mathematics and Mechanics (English Edition)*. 2015. Vol. 36. No. 5. Pp. 619–632.
16. **Aouadi M., Miranville A.** Quasi-stability and global attractor in nonlinear thermoelastic diffusion plate with memory // *Evolution Equations and Control Theory*. 2015. Vol. 4. No. 3. Pp. 241–263.
17. **Zemskov A. V., Tarlakovskii D. V., Grigorevskiy N. V.** Modeling an unsteady elastic diffusion processes in a Timoshenko plate // *Proceedings of the IX International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering (Coupled Problems 2021)*. 13–16 June 2021, Chia Laguna, Italy. DOI: 10.23967/coupled.2021.034.
18. **Vestyak V. A., Zemskov A. V., Tarlakovskii D. V.** Modeling of unsteady elastic diffusion transverse vibrations of the isotropic simply supported Timoshenko plate // *Materials Physics and Mechanics*. 2022. Vol. 50. No. 1. Pp. 141–157.
19. **Le K. C.** *Vibrations of shells and rods*. Berlin: Springer-Verlag, 1999. 425 p.
20. **Le K. C.** An asymptotically exact theory of functionally graded piezoelectric shells // *International Journal of Engineering Science*. 2017. Vol. 112. March. Pp. 42–62.
21. **Земсков А. В., Тарлаковский Д. В., Файкин Г. М.** Нестационарный изгиб консольно-закрепленной балки Бернулли – Эйлера с учетом диффузии // *Вычислительная механика сплошных сред*. 2021. Т. 14. № 1. С. 40–50.
22. **Zemskov A. V., Tarlakovskii D. V., Faykin G. M.** Unsteady bending of the orthotropic cantilever Bernoulli – Euler beam with the relaxation of diffusion fluxes // *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*. 2022. Vol. 102. No. 10. P. e202100107.
23. **Земсков А. В., Тарлаковский Д. В.** Нестационарный изгиб ортотропной консольно-закрепленной балки Тимошенко с учетом релаксации диффузионных потоков // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2022. Т. 62. № 11. С. 1895–1911.
24. **Kim B. H., Mader O., Weimar U., Brock R., Kern D. P.** Detection of antibody peptide interaction using microcantilevers as surface stress sensors // *Journal of Vacuum Science & Technology B*. 2003. Vol. 21. No. 4. Pp. 1472–1475.
25. **Alvarez M., Calle A., Tamayo J., Lechuga L. M., Abad A., Montoya A.** Development of nanomechanical biosensors for detection of the pesticide DDT // *Biosensors and Bioelectronics*. 2003. Vol. 18. No. 5–6. Pp. 649–653.
26. **Chen G.Y., Thundat T., Wachter E. A., Warmack R. J.** Adsorption-induced surface stress and its effects on resonance frequency of microcantilevers // *Journal of Applied Physics*. 1995. Vol. 77. No. 8. Pp. 3618–3622.
27. **Келлер И. Э., Дудин Д. С.** *Механика сплошной среды. Законы сохранения*. Пермь: Изд-во Пермского национального исследовательского политехнического университета, 2022. 142 с.
28. **Михайлова Е. Ю., Тарлаковский Д. В., Федотенков Г. В.** *Общая теория упругих оболочек*. М.: Изд-во МАИ, 2018. 112 с.
29. **Диткин В. А., Прудников А. П.** *Справочник по операционному исчислению*. М.: Высшая школа, 1965. 568 с.
30. **Бабичев А. П., Бабушкина Н. А., Братковский А. М.** *Физические величины: Справочник*. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.



31. Nirano K., Cohen M., Averbach V., Ujiye N. Self-diffusion in alpha iron during compressive plastic flow // Transactions of the Metallurgical Society of AIME. 1963. Vol. 227. P. 950.

32. Земсков А. В., Ле В. X. Нестационарные термоупругодиффузионные колебания балки Бернулли – Эйлера под действием распределенной поперечной нагрузки // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета (ПНИПУ). Механика. 2023. № 3. С. 75–85.

REFERENCES

1. Denisjuk E. Ya., Tereshatov V. V., A nonlinear theory of the process of elastomer swelling in low molecular-mass liquids, *Polymer Sci. Ser. A.* 42 (1) (2000) 56–67.

2. Mikolajchuk M. A., Knyazeva A. G., Grabovetskaya G. P., Mishin I. P., Research of the stress influence on the diffusion in the coating plate, *Bulletin of Perm National Research Polytechnic University. Mechanics.* (3) (2012) 120–134 (in Russian).

3. Flyachok V. M., Shvets R. N., Nekotoryye teoremy teorii mekhanodiffuzii anizotropnykh obolochek [Some theorems of the theory of mechanodiffusion of anisotropic shells], *Math. Meth. & Phys. Mech. Fields.* (21) (1985) 32–37 (in Russian).

4. Shvets R. N., Flyachok V. M., Uravneniya mekhanodiffuzii anizotropnykh obolochek s uchetom poperechnykh deformatsiy [Mechanodiffusion equations of taking into account the transverse strains], *Math. Meth. & Phys. Mech. Fields.* (20) (1984) 54–61 (in Russian).

5. Shvets R. N., Flyachok V. M., Variatsionnyy podkhod k resheniyu dinamicheskikh zadach mekhanotermodiffuzii anizotropnykh obolochek [A variational approach to solving dynamic problems of mechanothermal diffusion of anisotropic shells], *Math. Phys. & Nonlinear Mech.* (16) (1991) 54–6. 39–43 (in Russian).

6. Ravrik M. S., Ob odnoy variatsionnoy formule smeshannogo tipa dlya kontaktnykh zadach termodiffuzionnoy teorii deformatsii sloistykh obolochek [On one variational formula of mixed type for contact problems in the thermal diffusion theory of deformation of layered shells], *Math. Meth. & Phys. Mech. Fields.* (22) (1985) 40–44 (in Russian).

7. Bhattacharya D., Kanoria M., The influence of two temperature generalized thermoelastic diffusion inside a spherical shell, *Int. J. Eng. Tech. Res.* 2 (5) (2014) 151–159.

8. Ravrik M. S., Bichuya A. L., Osesimmetrichnoye napryazhennoye sostoyaniye nagretoy transversalno-izotropnoy sfericheskoy obolochki s krugovym otverstiyem pri diffuzionnom nasyshchenii [Axisymmetric stressed state of the heated transversally isotropic spherical shell with a circular hole under diffusion saturation], *Math. Meth. & Phys. Mech. Fields.* (17) (1983) 51–54 (in Russian).

9. Aouadi M., Copetti M. I. M., A dynamic contact problem for a thermoelastic diffusion beam with the rotational inertia, *Appl. Numer. Math.* 126 (April) (2018) 113–137.

10. Aouadi M., Copetti M. I. M., Exponential stability and numerical analysis of a thermoelastic diffusion beam with rotational inertia and second sound, *Math. Comput. Simulat.* 187 (Sept) (2021) 586–613.

11. Aouadi M., Miranville A., Smooth attractor for a nonlinear thermoelastic diffusion thin plate based on Gurtin – Pipkin’s model, *Asymptot. Anal.* 95 (1–2) (2015) 129–160.

12. Shevchuk P. R., Shevchuk V. A., Mekhanodiffuzionnyy effekt pri izgibe dvukhsloynogo brusa [Mechanodiffusion effect under bending of a double-layer beam], *Phys. Chem. Mech. Mater.* 23 (6) (1987) 75–79 (in Russian).

13. Huang M., Wei P., Zhao L., Li Y., Multiple fields coupled elastic flexural waves in the thermoelastic semiconductor microbeam with consideration of small scale effects, *Compos. Struct.* 270 (15 Aug) (2021) 114104.

14. Kumar R., Devi S., Sharma V., Resonance of nanoscale beam due to various sources in modified couple stress thermoelastic diffusion with phase lags, *Mech. Eng.* 23 (July) (2019) 36–49.

15. Aouadi M., On thermoelastic diffusion thin plate theory, *Appl. Math. Mech. (Eng. Ed.)*. 36 (5) (2015) 619–632.

16. Aouadi M., Miranville A., Quasi-stability and global attractor in nonlinear thermoelastic diffusion plate with memory, *Evol. Equ. Control Theory.* 4 (3) (2015) 241–263.

17. Zemskov A. V., Tarlakovskii D. V., Grigorevskiy N. V., Modeling an unsteady elastic diffusion processes in a Timoshenko plate, *Proc. IX Int. Conf. on Comput. Meth. Coupl. Probl. Sci. Eng. (Coupled Problems 2021)*, Chia Laguna, Italy, 13–16 June 2021, DOI: 10.23967/coupled.2021.034.

18. Vestyak V. A., Zemskov A. V., Tarlakovskii D. V., Modeling of unsteady elastic diffusion transverse vibrations of the isotropic simply supported Timoshenko plate, Mater. Phys. Mech. 50 (1) (2022) 141–157.
19. Le K. C., Vibrations of shells and rods, Springer-Verlag, Berlin, 1999.
20. Le K. C., An asymptotically exact theory of functionally graded piezoelectric shells, Int. J. Eng. Sci. 112 (March) (2017) 42–62.
21. Zemskov A. V., Tarlakovskii D. V., Faykin G. M., Unsteady bending of a cantilevered Euler – Bernoulli beam with diffusion, Comput. Continuum Mech. 14 (1) (2021) 40–50.
22. Zemskov A. V., Tarlakovskii D. V., Faykin G. M., Unsteady bending of the orthotropic cantilever Bernoulli – Euler beam with the relaxation of diffusion fluxes, Z. Angew. Math. Mech. 102 (10) (2022) e202100107.
23. Zemskov A. V., Tarlakovskii D. V., Unsteady bending of an orthotropic cantilever Timoshenko beam with allowance for diffusion flux relaxation, Comput. Math. Math. Phys. 62 (11) (2022) 1895–1911.
24. Kim B. H., Mader O., Weimar U., et al., Detection of antibody peptide interaction using microcantilevers as surface stress sensors, J. Vac. Sci. Technol. B. 21 (4) (2003) 1472–1475.
25. Alvarez M., Calle A., Tamayo J., et al., Development of nanomechanical biosensors for detection of the pesticide DDT, Biosens. Bioelectron. 18 (5–6) (2003) 649–653.
26. Chen G. Y., Thundat T., Wachter E. A., Warmack R. J., Adsorption-induced surface stress and its effects on resonance frequency of microcantilevers, J. Appl. Phys. 77 (8) (1995) 3618–3622.
27. Keller I. E., Dudin D. S., Механика сплошной среды. Законы сохранения [Continuum mechanics. Conservation laws], Perm National Research Polytechnic University Publishing, Perm, 2022 (in Russian).
28. Mikhaylova E. Yu., Tarlakovskii D. V., Fedotenkov G. V., Obshchaya teoriya uprugikh obolochek [General theory of elastic shells], MAI Publishing, Moscow, 2018 (in Russian).
29. Ditkin V. A., Prudnikov A. P., Spravochnik po operatsionnomu ischisleniyu [Operational calculus handbook], Vysshaya Shkola Publishing, Moscow, 1965 (in Russian).
30. Babichev A. P., Babushkina N. A., Bratkovskiy A. M., et al., Fizicheskiye velichiny: Spravochnik [Physical quantities: Handbook], Energoatomizdat Publishing, Moscow, 1991 (in Russian).
31. Nirano K., Cohen M., Averbach V., Ujiye N., Self-diffusion in alpha iron during compressive plastic flow, Trans. Metallurg. Soc. AIME. 227 (1963) 950.
32. Zemskov A. V., Le V. H., Unsteady thermoelastic diffusion vibrations of the Bernoulli – Euler beam under the action of a distributed transverse load, Bulletin of Perm National Research Polytechnic University. Mechanics. (3) (2023) 75–85.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЗЕМСКОВ Андрей Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник научно-исследовательского отдела кафедры 311 «Прикладные программные средства и математические методы» Московского авиационного института (национальный исследовательский университет), ведущий научный сотрудник лаборатории динамических испытаний Научно-исследовательского института механики Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия.

125993, Россия, г. Москва, Волоколамское шоссе, 4

azemskov1975@mail.ru

ORCID: 0000-0002-2653-6378

ВЕСТЯК Анатолий Васильевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры 311 «Прикладные программные средства и математические методы» Московского авиационного института (национальный исследовательский университет), Москва, Россия.

125993, Россия, г. Москва, Волоколамское шоссе, 4

kaf311@yandex.ru

ORCID: 0000-0002-1905-9438



ТАРЛАКОВСКИЙ Дмитрий Валентинович – доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией динамических испытаний Научно-исследовательского института механики Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова, профессор кафедры 902 «Сопротивление материалов, динамика и прочность машин» Московского авиационного института (национальный исследовательский университет), Москва, Россия.

119991, Россия, г. Москва, Ленинские Горы, 1
tdvhome@mail.ru

ORCID: 0000-0002-5694-9253

THE AUTHORS

ZEMSKOV Andrei V.

Moscow Aviation Institute (National Research University)
Institute of Mechanics, Lomonosov Moscow State University
4 Volokolamskoe Ave., Moscow, 125993, Russia
azemskov1975@mail.ru

ORCID: 0000-0002-2653-6378

VESTYAK Anatoly V.

Moscow Aviation Institute (National Research University)
4 Volokolamskoe Ave., Moscow, 125993, Russia
kaf311@yandex.ru

ORCID: 0000-0002-1905-9438

TARLAKOVSKII Dmitry V.

Institute of Mechanics, Lomonosov Moscow State University
Moscow Aviation Institute (National Research University)
1 Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia
tdvhome@mail.ru

ORCID: 0000-0002-5694-9253

Статья поступила в редакцию 27.03.2024. Одобрена после рецензирования 21.05.2024.
Принята 21.05.2024.

Received 27.03.2024. Approved after reviewing 21.05.2024. Accepted 21.05.2024.

Физическое материаловедение

Научная статья

УДК 564.163.2, 539.199

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17307>

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТНОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА И ФУЛЛЕРЕНОЛА

Е. А. Никитина ✉, В. М. Капралова, Н. Т. Сударь,
В. М. Студзинский, В. И. Герасимов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ eanikitina26@icloud.com

Аннотация. В работе представлены результаты сравнения оптических свойств при комнатной температуре и электрических характеристик пленок поливинилового спирта (ПВС) и нанокompозита на основе ПВС с малыми добавками фуллеренола $C_{60}(OH)_{44}$ в широком частотном диапазоне (25 Гц – 1 МГц) при температурах от 294 до 398 К. Установлено, что добавка 2 масс.% фуллеренола приводит к значительному поглощению такой пленкой света в УФ-области спектра (ИК-спектры обоих образцов пленок оказались идентичными), а также к снижению диэлектрической проницаемости ϵ' . На частотных зависимостях ϵ'' обеих пленок наблюдались пики в низкочастотной области, которые смещались в сторону высоких частот при нагреве пленок. Найденные значения энергии активации проводимости на постоянном токе для ПВС и полимерного нанокompозита составили около 1,5 эВ. Предложено объяснение наблюдаемых эффектов.

Ключевые слова: поливиниловый спирт, фуллеренол, нанокompозит, диэлектрическая проницаемость, диэлектрические потери

Финансирование: Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2023-0016).

Для цитирования: Никитина Е. А., Капралова В. М., Сударь Н. Т., Студзинский В. М., Герасимов В. И. Электрические и оптические свойства нанокompозитного материала на основе поливинилового спирта и фуллеренола // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 76–86. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17307>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17307>

ELECTRICAL AND OPTICAL PROPERTIES OF A NANOCOMPOSITE BASED ON POLYVINYL ALCOHOL AND FULLERENOL

E. A. Nikitina ✉, V. M. Kapralova, N. T. Sudar,
V. M. Studzinskii, V. I. Gerasimov

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

✉ eanikitina26@icloud.com

Abstract. This work presents the results of comparison of optical properties at room temperature and electrical characteristics of films of polyvinyl alcohol (PVA) and nanocompos-



ite based on PVA with small additives of fullereneol $C_{60}(OH)_{44}$ in a wide frequency range (25 Hz – 1 MHz) at temperatures from 294 to 398 K. The addition of 2 wt.% fullereneol leads to a significant absorption of light by such a film in the UV region of the spectrum (IR spectra of both film samples were identical), as well as to a decrease in dielectric permittivity ϵ' . The ϵ'' frequency dependences of both films showed peaks in the low-frequency region, which shifted towards higher frequencies when the films were heated. The values of the activation energy of conduction at direct current for PVA and polymer nanocomposite were found to be about 1.5 eV. An explanation of the observed effects is proposed.

Keywords: polyvinyl alcohol, fullereneol, nanocomposite, dielectric constant, dielectric loss

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2023-0016).

For citation: Nikitina E. A., Kapralova V. M., Sudar N. T., Studzinskii V. M., Gerasimov V. I., Electrical and optical properties of a nanocomposite based on polyvinyl alcohol and fullereneol, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 76–86. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17307>

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

Введение

В настоящее время в органических полевых транзисторах в качестве подзатворного диэлектрика чаще всего используются неорганические оксиды металлов и полупроводников [1], что существенно усложняет технологию их изготовления и ограничивает возможности применения принтерных технологий при производстве указанных органических транзисторов. Поэтому замена в этих транзисторах неорганических диэлектрических пленок полимерными диэлектриками, которые можно было бы наносить из растворов, представляется практически важной и актуальной задачей [2].

Полагают, что таким требованиям могут удовлетворять полимерные нанокомпозитные материалы [3 – 5]. При всем их многообразии особый интерес представляют водорастворимые полимерные нанокомпозиты. В частности, поливиниловый спирт (ПВС) и композиты на его основе рассматриваются сегодня как перспективные материалы органической электроники [6 – 9].

Поливиниловый спирт, формула мономерного звена которого имеет вид $-(CH(OH)-CH_2)_n-$, представляет собой водорастворимый термопластичный полимер с хорошими пленкообразующими характеристиками. Температура стеклования данного полимера $T_g \approx 358$ К, однако он является и кристаллизующимся полимером (температура плавления в азотной среде – 503 К). Вследствие большого числа водородных связей молекулы ПВС образуют плотные кристаллиты, беспорядочно ориентированные внутри аморфных областей [10].

Диэлектрические свойства ПВС изучены достаточно хорошо [11 – 15]. Их особенностью является значительная дисперсия диэлектрической проницаемости, которая проявляется в низкочастотной области спектра при нагреве полимера. В ПВС низкочастотная диэлектрическая проницаемость ϵ при температуре $T \geq T_g$ достигает значений порядка 10^2 , в то время как на высокой частоте $\epsilon \approx 6$ [11]. Частотная зависимость тангенса угла диэлектрических потерь $\text{tg}\delta$ ПВС характеризуется наличием на ней пика в низкочастотной области спектра, причем расположение его максимума зависит от температуры и смещается в область более высоких частот по мере нагрева образца.

Полагают, что причиной возникновения указанных особенностей диэлектрических свойств ПВС является эффект межфазной поляризации. Авторы статьи [11] считают, что она возникает вследствие блокировки носителей заряда на электродах, приводящей к образованию двойного электрического слоя на границе электрод – полимер. В работе [12] рассматривается более сложная картина. По мнению ее авторов, двумя структурными фазами с различающимися электрическими характеристиками в ПВС являются макромолекулярные глобулы и границы между ними. Фактически авторы этой работы приходят к

выводу о возможности реализации в ПВС структур типа зерно-прослойка (модель Купса [16]). Совокупность таких одинаковых структур, выполняющих роль макрорелаксаторов, определяет свойства образца в целом. Следует отметить, что каких-либо количественных оценок, подтверждающих данные выводы, авторы цитируемых работ не приводят.

Известно, что добавление небольшого количества углеродных наночастиц в полимерные матрицы (до 1 – 3 масс. %) может приводить к значительным изменениям свойств материала матрицы (см., например, статьи [17, 18]). Подобные полимерные нанокompозиты могут найти применение в различных устройствах органической электроники [19].

В данной работе изучались свойства пленок полимерного нанокompозита на основе ПВС и полигидроксилированного фуллерена (фуллеренола) $C_{60}(OH)_{44}$ в качестве наполнителя (композит ПВС + $C_{60}(OH)_{44}$). Подобно ПВС, фуллеренол $C_{60}(OH)_{44}$ хорошо растворим в воде, что позволяет использовать данную модификацию фуллерена в качестве одного из компонентов водорастворимых нанокompозитных диэлектриков. Варьируя его концентрацию в матрице из ПВС, можно целенаправленно модифицировать электрические характеристики получаемого композитного материала.

В литературе отсутствуют сведения об электрофизических и диэлектрических свойствах подобных композитов. Для изучения диэлектрических характеристик в широких температурном и частотном интервалах обычно используют метод диэлектрической спектроскопии, который способен предоставлять информацию и о морфологической структуре вещества через его релаксационные свойства, связанные с молекулярной динамикой [20].

Цель настоящей работы – получить характеристики проводимости и диэлектрических свойств композита ПВС + $C_{60}(OH)_{44}$, проанализировать их особенности и на этой основе выявить формы взаимодействия матрицы с наполнителем в изучаемом материале.

Методика эксперимента

Объектами исследования служили пленки ПВС и нанокompозита ПВС + $C_{60}(OH)_{44}$ толщиной 60 – 70 мкм. Для изготовления пленок был использован ПВС марки 16/1 (ГОСТ 10779-78).

5 %-й (по массе) раствор ПВС заливали на дно чашек Петри, высушивали при комнатной температуре в течение четырех суток, после чего пленки отделяли от подложки. При изготовлении пленок нанокompозита ПВС + $C_{60}(OH)_{44}$ в раствор ПВС постепенно добавляли водный раствор фуллеренола, с тем чтобы в пленках ПВС + $C_{60}(OH)_{44}$ концентрация $C_{60}(OH)_{44}$ составляла 2 масс.%. Технология получения фуллеренола следовала методике, изложенной в работе [21].

Изучение оптических свойств пленок проводили при комнатной температуре. Для измерения коэффициента пропускания пленок использовали спектрофотометр СФ-56. ИК-спектры образцов были зарегистрированы на ИК-Фурье-спектрометре Shimadzu IRSpirit QATR-S.

Для проведения электрических измерений на обе стороны пленки через трафарет наносили графитовые электроды диаметром 37 мм, для чего использовали аэрозоль токопроводящего лака на основе коллоидного графита марки SOLINS@GRAPHITE. Поверхностное сопротивление углеродного покрытия составляло примерно 1500 Ом/квadrat.

Далее образцы пленок выдерживали в термостате в течение 5 ч при температуре 398 К и давлении около 14 Па. В результате термообработки из них удалялись остатки воды и аэрозоля. Отметим, что, согласно данным статьи [22], степень кристалличности пленок ПВС, полученных из водного раствора, достигает примерно 46%, если их отжиг проводить при температуре 393 К.

Частотные зависимости емкости и тангенса угла диэлектрических потерь $\text{tg}\delta$ измеряли с помощью прибора-измерителя иммитанса E7-20 в диапазоне частот от 25 Гц до 1 МГц при температуре от 294 до 398 К. Поскольку отжиг пленки выполняли при 398 К перед измерениями, считали, что процесс измерения при значениях температуры ниже 398 К не должен влиять на результаты и степень кристалличности пленки не должна изменяться.

Величины диэлектрической проницаемости ϵ и фактора диэлектрических потерь ϵ'' ($\epsilon'' = \epsilon \cdot \text{tg}\delta$) рассчитывали по формуле плоского конденсатора на основе экспериментальных значений емкости и тангенса угла диэлектрических потерь $\text{tg}\delta$, измеренных при различных температурах и частотах.

Измерения сопротивления пленок при постоянном напряжении в указанном выше температурном диапазоне осуществляли с помощью электрометра KEITHLEY 610.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

Пленки ПВХ, изготовленные по описанной выше методике, были прозрачными в видимой и ближних ИК- и УФ- областях спектра (рис. 1). На длине волны $\lambda = 380$ нм пропускание пленки ПВХ составляло около 90 % и далее оставалось практически неизменным.

Добавка фуллеренола в ПВХ приводила к окрашиванию пленок в желто-коричневый цвет и появлению значительного уровня поглощения света этим компонентом в УФ-области спектра. Пленка композита ПВХ + $C_{60}(OH)_{44}$ оказывалась практически непрозрачной на длине волны λ менее 350 нм. При больших значениях длины волны ее пропускание монотонно возрастало, достигая величины около 80 % лишь на границе диапазона – на длине волны $\lambda = 1100$ нм.

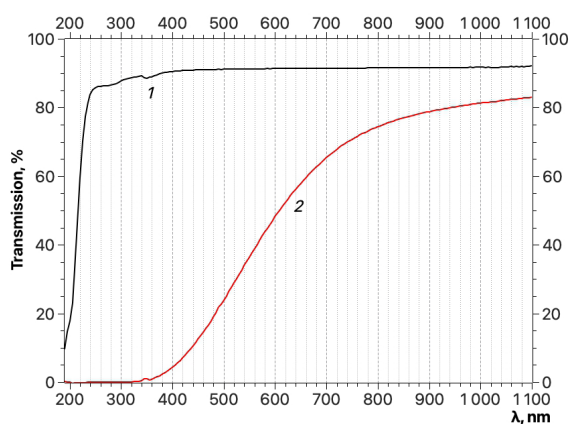


Рис. 1. Спектры оптического пропускания пленок ПВХ (1) и ПВХ + $C_{60}(OH)_{44}$ (2) при комнатной температуре

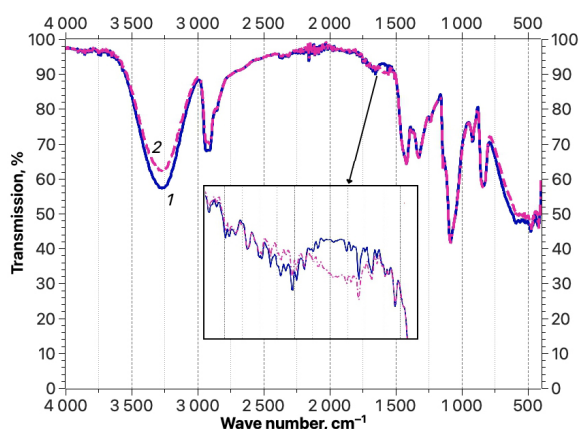


Рис. 2. ИК-спектры образцов ПВХ (1) и ПВХ + $C_{60}(OH)_{44}$ (2) при комнатной температуре (на вставке показана разница спектров в области 1600 см^{-1} при большом увеличении)

Вид полученных нами ИК-спектров образцов хорошо согласуется с уже известными литературными данными [23 – 25]. На рис. 2 видно, что добавление фуллеренола не приводит к каким-либо существенным изменениям формы и положения пиков, однако важно отметить уменьшение интенсивности полосы 3280 см^{-1} , соответствующей растяжению валентной связи O–H, и полосы 2917 см^{-1} , соответствующей асимметричному растяжению группы $=CH_2$. Малоинтенсивная полоса поглощения при 1590 см^{-1} (см. вставку на рис. 2), наблюдаемая для образца, содержащего фуллеренол $C_{60}(OH)_{44}$, может быть приписана наличию связей $C=C$ в фуллереноле [26 – 28].

На рис. 3 представлены частотные зависимости диэлектрической проницаемости пленки ПВХ (кривые 1 – 4) и композита ПВХ + $C_{60}(OH)_{44}$ (кривые 1' – 4') при различных температурах в диапазоне 294 – 384 К. Видно, что при 294 К значения ϵ как для пленки ПВХ, так и для композитной пленки невелики и слабо зависят от частоты. Нагрев пленок до температуры, близкой к температуре стеклования ПВХ, приводит к значительному возрастанию ϵ в низкочастотной области спектра на частотах f ниже 10 кГц. Формы кривых $\epsilon(f)$ для обоих образцов пленок оказываются подобными. Зависимости $\epsilon(f)$ характеризуются монотонным снижением величины ϵ с повышением частоты при всех температурах измерения. При этом во всем частотном диапазоне, при температурах, не превышающих температуру стеклования ПВХ, величина ϵ у ПВХ всегда несколько выше таковой для композита ПВХ + $C_{60}(OH)_{44}$.

На рис. 4 показаны температурные зависимости диэлектрической проницаемости исследуемых пленок на частоте 25 Гц. При температуре ниже 340 К значения ϵ пленок ПВХ и композита ПВХ + $C_{60}(OH)_{44}$ равны примерно 10 и практически совпадают. В температурном диапазоне 340 – 375 К, т. е. в области температуры T_g ПВХ, наблюдается такой быстрый рост диэлектрической проницаемости, что при $T = 375\text{ К}$ $\epsilon \approx 400$ для пленки

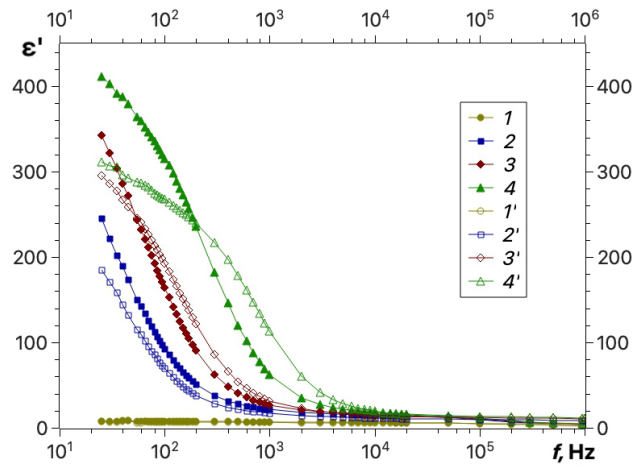


Рис. 3. Частотные зависимости диэлектрической проницаемости пленки ПВХ при температурах 294 (1), 368 (2), 375 (3) и 384 (4) К и пленки композита ПВХ + $C_{60}(OH)_{44}$ при температурах 294 (1'), 363 (2'), 371 (3') и 384 (4') К

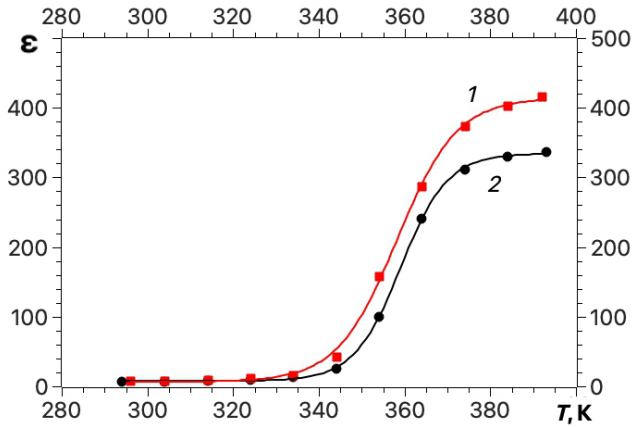


Рис. 4. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости пленок ПВХ (1) и композита ПВХ + $C_{60}(OH)_{44}$ (2) на частоте 25 Гц

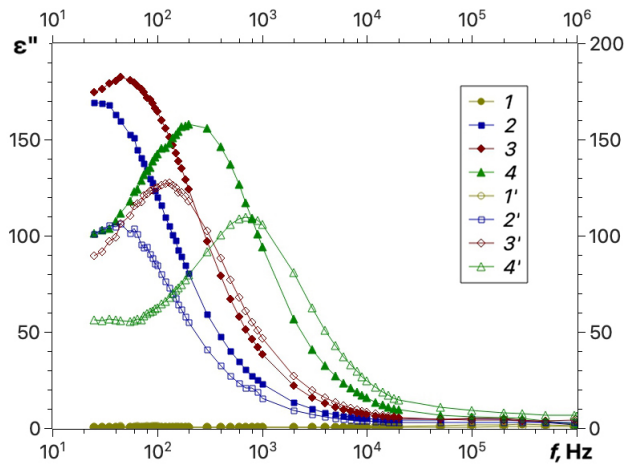


Рис. 5. Частотные зависимости фактора диэлектрических потерь пленки ПВХ при температурах 294 (1), 368 (2), 375 (3) и 384 (4) К и пленки ПВХ + $C_{60}(OH)_{44}$ при температурах 294 (1'), 363 (2'), 371 (3') и 384 (4') К

ПВС и $\epsilon \approx 300$ для пленки композита ПВС + $C_{60}(OH)_{44}$. При дальнейшем повышении температуры оба образца пленок демонстрируют существенное снижение скорости роста величины ϵ (кривые выходят на насыщение).

Частотные зависимости фактора диэлектрических потерь представлены на рис. 5. Анализ этих данных показывает, что при повышенных температурах на кривых наблюдаются пики (f_{max}), расположение которых смещается в сторону высоких частот с повышением температуры измерения.

Следует отметить, что согласно литературным данным (см., например, статью [12]), при более низких температурах такие максимумы тоже наблюдаются, но они расположены в области инфранизких частот. В частности, авторы указанной работы регистрировали для ПВС максимум $tg\delta$ при температуре 300 К на частоте в несколько герц.

Следовательно, наблюдение нами при комнатной температуре малых значений ϵ'' объясняется тем, что измерение этой величины выполнено на правом (высокочастотном) склоне кривой с максимумом, который не достигнут при наших измерениях.

В исследованной температурной области зависимость $\lg[f_{max}^{max}(1/T)]$ (рис. 6) близка к линейной как для ПВС, так и для композита ПВС + $C_{60}(OH)_{44}$, т. е. можно считать, что положение максимума описывается уравнением Аррениуса с энергией активации E_a . Значения последней для ПВС и полимерного нанокompозита практически одинаковы и равны около 1,5 эВ, однако значение величины f_{max} у ПВС оказывается несколько меньше. Отметим также, что указанную величину E_a обычно связывают с крупномасштабным движением, например с сегментальной подвижностью в цепях макромолекул [29].

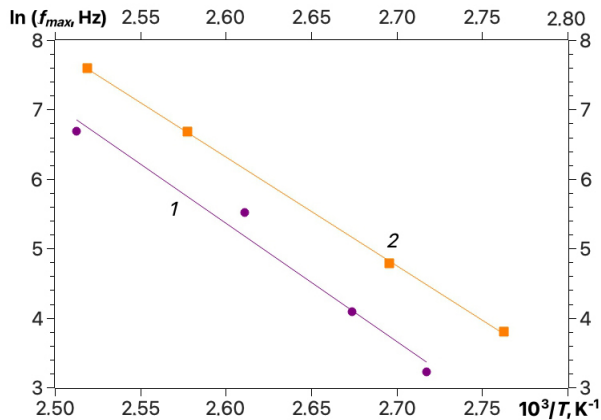


Рис. 6. Температурные зависимости логарифма частоты, на которой расположен максимум ϵ'' в ПВС (1) и в композите ПВС+ $C_{60}(OH)_{44}$ (2)

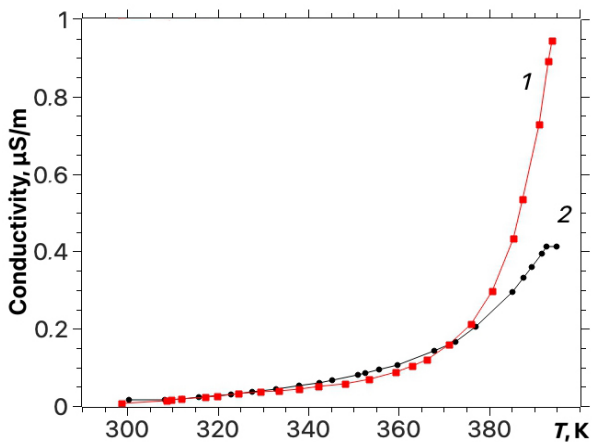


Рис. 7. Температурные зависимости проводимости пленок ПВС (1) и ПВС + $C_{60}(OH)_{44}$ (2) на постоянном токе

На рис. 7 представлены температурные зависимости проводимости исследуемых пленок на постоянном токе. С ростом температуры проводимость обоих материалов возрастает экспоненциально. Видно, что значения проводимости пленки из нанокompозита и пленки ПВС вплоть до температуры примерно 370 К приблизительно одинаковы. При температуре выше 370 К проводимость пленки ПВС начинает преобладать над проводимостью пленки нанокompозита, и это различие возрастает по мере нагревания пленок.

Обращает на себя внимание тот факт, что различия в электрических характеристиках пленок ПВС и нанокompозита заметно проявляются только при температурах, которые принадлежат области температуры стеклования ПВС или лежат выше нее. Причины различий, по нашему мнению, состоят в следующем. Как отмечалось выше, ПВС представляет собой кристаллизующийся полимер, а в рассматриваемых условиях примерно половину объема исследуемых образцов ПВС занимают аморфные области. Логично предположить, что это характерно и для пленок нанокompозита. Поскольку размеры молекул фуллеренола $C_{60}(OH)_{44}$ довольно велики (их диаметр

оценивается равным $1,5 \pm 0,4$ нм [11]), накопление молекул фуллеренола происходит преимущественно в наименее упорядоченных аморфных областях полимера. Указанная особенность может препятствовать формированию двойного электрического слоя на межфазной границе, а также миграции носителей заряда сквозь прослойки. В итоге наблюдается уменьшение как емкости материала, так и его проводимости.

Заключение

В настоящей работе представлены результаты исследования оптических и электрических свойств пленок поливинилового спирта (ПВС) и нанокompозитного материала на его основе с добавлением фуллеренола $C_{60}(OH)_{44}$ (ПВС + $C_{60}(OH)_{44}$).

Установлено, что даже небольшая добавка фуллеренола в ПВС приводит к изменению его окраски и значительному поглощению света в УФ-области спектра.

Заметное различие диэлектрической проницаемости, фактора диэлектрических потерь и проводимости исследованных пленок наблюдалось только при значениях температуры выше температуры стеклования ПВС. При повышенной температуре проводимость композиционной пленки на постоянном токе и ее диэлектрическая проницаемость на низких частотах оказываются меньше, чем соответствующие величины для пленки ПВС. Есть основания полагать, что причиной наблюдаемого различия является накопление молекул фуллеренола в аморфных прослойках между кристаллитами ПВС, которое препятствует формированию двойного электрического слоя между прослойками и кристаллитами, а также препятствует миграции носителей заряда сквозь эти прослойки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Caruso M. M., Davis D. A., Shen Q., Odom S. A., Sottos N. R., White S. R., Moore J. S. Mechanically-induced chemical changes in polymeric materials // *Chemical Reviews*. 2009. Vol. 109. No. 11. Pp. 5755–5798.
2. Туев В. И., Малютин Н. Д., Лошилов А. Г., Артищев С. А., Здрок А. Е., Аллануров А. М., Убайчин А. В. Исследование возможностей применения аддитивной принтерной технологии формирования пленок органических и неорганических материалов электроники // *Доклады ТУСУР (Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники)*. 2015. № 4 (38). С. 52–63.
3. Козлов Г. В. Структура и свойства дисперсно-наполненных полимерных нанокompозитов // *Успехи физических наук*. 2015. Т. 185. № 1. С. 35–64.
4. Pleshakov I. V., Prokof'ev A. V., Bibik E. E., Nepomnyashchaya E. K., Velichko E. N., Kostitsyna T. A., Seliutin D. M. Spectral characteristics of composite obtained by embedding of magnetic nanoparticles into polymer matrix // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. 2021. Vol. 12. No. 3. Pp. 279 – 282.
5. Колосова А. С., Сокольская М. К., Виткалова И. А., Торлова А. С., Пикалов Е. С. Современные полимерные композиционные материалы и их применение // *Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований*. 2018. № 5. Часть 1. С. 245–256.
6. Van Etten E. A., Ximenes E. S., Tarasconi L. T., Garcia I. T., Forte M. M., Boudinov H. Insulating characteristics of polyvinyl alcohol for integrated electronics // *Thin Solid Films*. 2014. Vol. 568. 1 October. Pp. 111–116.
7. Aziz S. B. Modifying poly (vinyl alcohol) (PVA) from insulator to small-bandgap polymer: A novel approach for organic solar cells and optoelectronic devices // *Journal of Electronic Materials*. 2016. Vol. 45. No. 1. Pp. 736–745.
8. Nawaz A., Hümmelgen I. A. Poly (vinyl alcohol) gate dielectric in organic field-effect transistors // *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 2019. Vol. 30. No. 6. Pp. 5299–5326.
9. Гематдинова В. М., Сидоров Ю. Д., Поливанов М. А., Василенко С. В. Регулирование растворимости композиционных материалов на основе поливинилового спирта // *Вестник Казанского технологического университета*. 2016. Т. 19. № 6. С. 96–99.
10. Розенберг М. Э. Полимеры на основе винилацетата. Ленинград: Химия, 1983. 176 с.
11. Shekar B. C., Veeravazhuthi V., Sakthivel S., Mangalaraj D., Narayandass S. K. Growth, structure, dielectric and AC conduction properties of solution grown PVA films // *Thin Solid Films*. 1999. Vol. 348. No. 1–2. Pp. 122–129.



12. Просанов И. Ю., Уваров Н. Ф. Электрические свойства дегидратированного поливинилового спирта // Физика твердого тела. 2012. Т. 54. № 2. С. 393–396.
13. Benvenho A. R., Machado W. S., Cruz-Cruz I., Hümmelgen I. A. Study of poly (3-hexylthiophene)/cross-linked poly (vinyl alcohol) as semiconductor/insulator for application in low voltage organic field effect transistors // Journal of Applied Physics. 2013. Vol. 113. No. 21. P. 214509.
14. Мурадов М. Б., Эйвазова Г. М., Гаджимамедов Р. Г., Нуриев М. А. Диэлектрическая релаксация в нанокompозитах CdS/ПВС // Прикладная физика. 2008. № 4. С. 135–138.
15. Aziz S. B., Marif R. B., Brza M. A., Hamsan M. H., Kadir M. F. Z. Employing of Trukhan model to estimate ion transport parameters in PVA based solid polymer electrolyte // Polymers. 2019. Vol. 11. No. 10. P. 1694.
16. Koops C. G. On the dispersion of resistivity and dielectric constant of some semiconductors at audiofrequencies // Physical Review. 1951. Vol. 83. No. 1. Pp. 121–124.
17. Валенков А. М., Гофман И. В., Носов К. С., Шаповалов В. М., Юдин В. Е. Полимерные композиционные системы, модифицированные аллотропными соединениями углерода (Обзор) // Журнал прикладной химии. 2011. Т. 84. № 5. С. 705–720.
18. Мурадян В. Е., Арбузов А. А., Смирнов Ю. Н., Лесничая В. А. Механохимический синтез производных фуллерена и их свойства // Журнал общей химии. 2011. Т. 81. № 8. С. 1326–1330.
19. Пенькова А. В., Пиотровский Л. Б., Маркелов Д. А., Семисалова А. С., Kroto H. W. Производные фуллерена как нанодобавки для полимерных композитов // Успехи химии. 2017. Т. 86. № 6. С. 530–566.
20. Шадрин Е. Б., Ильинский А. В., Кастро Р. А., Капралова В. М., Кононов А. А., Пашкевич М. Э. Модификация диэлектрического отклика нанокристаллических пленок диоксида ванадия путем легирования никелем и вольфрамом // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 4. С. 7–31.
21. Мазур А. С., Карпунин А. Е., Проскурина О. В., Герасимов В. И., Плешаков И. В., Матвеев В. В., Кузьмин Ю. И. Особенности спектров ядерного магнитного резонанса полигидроксилированного фуллерена $C_{60}(OH)_n$ // Физика твердого тела. 2018. Т. 60. № 7. С. 1451–1453.
22. Третинников О. Н., Загорская С. А. Определение степени кристалличности поливинилового спирта методом ИК-Фурье-спектроскопии // Журнал прикладной спектроскопии. 2012. Т. 79. № 4. С. 538–543.
23. Jipa I. M., Stoica A., Stroescu M., Dobre L.-M., Dobre T., Jinga S., Tardei C. Potassium sorbate release from poly (vinyl alcohol)-bacterial cellulose films // Chemical Papers. 2012. Vol. 66. No. 2. Pp. 138–143.
24. Soltani S., Asempour P. H., Jamshidi H. Investigation of reaction conditions for preparation of medium molecular weight poly (vinyl alcohol) as emulsifier // Iranian Polymer Journal. 2007. Vol. 16. No. 7. Pp. 439–447.
25. Bhat N. V., Nate M. M., Kurup M. B., Bambole V. A., Sabharwal S. Effect of γ -radiation on the structure and morphology of polyvinyl alcohol films // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2005. Vol. 237. No. 3–4. Pp. 585–592.
26. Xing G., Zhang J., Zhao Y., et al. Influences of structural properties on stability of fullerenols // The Journal of Physical Chemistry B. 2004. Vol. 108. No. 31. Pp. 11473–11479.
27. Djordjevic A., Ignjatovic N., Seke M., Jovic D., Uskokovic D., Rakocevic Z. Synthesis and characterization of hydroxyapatite/fullerenol nanocomposites // Journal of Nanoscience and Nanotechnology. 2015. Vol. 15. No. 2. Pp. 1538–1542.
28. Kokubo K. Water soluble single-nano carbon particles: Fullerenol and its derivatives // The delivery of nanoparticles. Edited by A. A. Hashin. London: InTechOpen, 2012. Pp. 317–332.
29. Блайт Э. Р., Блур Д. Электрические свойства полимеров. Пер. с англ. М.: Физматлит, 2008. 376 с.

REFERENCES

1. Caruso M. M., Davis D. A., Shen Q., et al., Mechanically-induced chemical changes in polymeric materials, Chem. Rev. 109 (11) (2009) 5755–5798.
2. Tuyev V. I., Malyutin N. D., Loshchilov A. G., et al., Application of the additive printer (plotter) technology in electronics to form films from organic and inorganic materials, Proceedings of TUSUR University. (4 (38)) (2015) 52–63 (in Russian).

3. **Kozlov G. V.**, Structure and properties of particulate-filled polymer nanocomposites, *Phys. Usp.* 58 (1) (2015) 33–60.
4. **Pleshakov I. V., Prokof'ev A. V., Bibik E. E., et al.**, Spectral characteristics of composite obtained by embedding of magnetic nanoparticles into polymer matrix, *Nanosyst.: Phys. Chem. Math.* 12 (3) (2021) 279–282.
5. **Kolosova A. S., Sokolskaya M. K., Vitkalova I. A., et al.**, Modern polymer composite materials and their application, *Mezhdunarodnyy zhurnal prikladnykh i fundamentalnykh issledovaniy [International Journal of Applied and Fundamental Research]*. (5–1) (2018) 245–256 (in Russian).
6. **Van Etten E. A., Ximenes E. S., Tarasconi L. T., et al.**, Insulating characteristics of polyvinyl alcohol for integrated electronics, *Thin Solid Films.* 568 (1 Oct) (2014) 111–116.
7. **Aziz S. B.**, Modifying poly (vinyl alcohol) (PVA) from insulator to small-bandgap polymer: A novel approach for organic solar cells and optoelectronic devices, *J. Electron. Mater.* 45 (1) (2016) 736–745.
8. **Nawaz A., Hümmelgen I. A.**, Poly (vinyl alcohol) gate dielectric in organic field-effect transistors, *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* 30 (6) (2019) 5299–5326.
9. **Gematdinova V. M., Sidorov Yu. D., Polivanov M. A., Vasilenko S. V.**, Regulirovaniye rastvorimosti kompozitsionnykh materialov na osnove polivinilovogo spirta [Regulation of solubility of composites based on polyvinyl alcohol], *Herald of Kazan Technological University.* 19 (6) (2016) 96–99 (in Russian).
10. **Rosenberg M. E.**, *Polymers based on vinyl acetate*, Khimiya Publishing, Leningrad, 1983 (in Russian).
11. **Shekar B. C., Veeravazhuthi V., Sakthivel S., et al.**, Growth, structure, dielectric and AC conduction properties of solution grown PVA films, *Thin Solid Films.* 348 (1–2) (1999) 122–129.
12. **Prosanov I. Yu., Uvarov N. F.**, Electrical properties of dehydrated polyvinyl alcohol, *Phys. Solid State.* 54 (2) (2012) 421–424.
13. **Benvenho A. R., Machado W. S., Cruz-Cruz I., Hümmelgen I. A.**, Study of poly (3-hexylthiophene)/cross-linked poly (vinyl alcohol) as semiconductor/insulator for application in low voltage organic field effect transistors, *J. Appl. Phys.* 113 (21) (2013) 214509.
14. **Muradov M. B., Eyvazova G. M., Hajimamedov R. H., Nuriyev M. A.**, Dielectrical relaxation in CdS/PVA nanocomposites, *Prikladnaya fizika [Applied Physics]*. (4) (2008) 135–138 (in Russian).
15. **Aziz S. B., Marif R. B., Brza M. A., et al.**, Employing of Trukhan model to estimate ion transport parameters in PVA based solid polymer electrolyte, *Polymers.* 11 (10) (2019) 1694.
16. **Koops C. G.**, On the dispersion of resistivity and dielectric constant of some semiconductors at audiofrequencies, *Phys. Rev.* 83 (1) (1951) 121–124.
17. **Valenkov A. M., Gofman I. V., Nosov K. S., et al.**, Polymeric composite systems modified with allotropic forms of carbon (review), *Russ. J. Appl. Chem.* 84 (5) (2011) 735–750.
18. **Muradyan V. E., Arbuzov A. A., Smirnov Yu. N., Lesnichaya V. A.**, Mechanochemical synthesis and properties of fullerene, *Russ. J. Gen. Chem.* 81 (8) (2011) 1671–1675.
19. **Penkova A. V., Acquah S. F. A., Piotrovskiy L. B., et al.**, Fullerene derivatives as nano-additives in polymer composites, *Russ. Chem. Rev.* 86 (6) (2017) 530–566.
20. **Shadrin E. B., Ilinskiy A. V., Kastro R. A., et al.**, The dielectric response modification of nanocrystalline vanadium dioxide films by doping with nickel and tungsten, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics.* 15 (4) (2022) 7–31 (in Russian).
21. **Mazur A. C., Karpunin A. E., Proskurina O. V., et al.**, Nuclear magnetic resonance spectra of polyhydroxylated fullerene $C_{60}(OH)_n$, *Phys. Solid State.* 60 (7) (2018) 1468–1470.
22. **Tretinnikov O. N., Zagorskaya S. A.**, Determination of the degree of crystallinity of poly (vinyl alcohol) by FTIR spectroscopy, *J. Appl. Spectrosc.* 79 (4) (2012) 521–526.
23. **Jipa I. M., Stoica A., Stroescu M., et al.**, Potassium sorbate release from poly (vinyl alcohol)-bacterial cellulose films, *Chem. Pap.* 66 (2) (2012) 138–143.
24. **Soltani S., Asempour P. H., Jamshidi H.**, Investigation of reaction conditions for preparation of medium molecular weight poly (vinyl alcohol) as emulsifier, *Iran. Polym. J.* 16 (7) (2007) 439–447.
25. **Bhat N. V., Nate M. M., Kurup M. B., et al.**, Effect of γ -radiation on the structure and morphology of polyvinyl alcohol films, *Nucl. Instrum. Meth. B.* 237 (3–4) (2005) 585–592.
26. **Xing G., Zhang J., Zhao Y., et al.**, Influences of structural properties on stability of fullerenols, *J. Phys. Chem. B.* 108 (31) (2004) 11473–11479.



27. Djordjevic A., Ignjatovic N., Seke M., et al., Synthesis and characterization of hydroxyapatite/fullerenol nanocomposites, *J. Nanosci. Nanotechnol.* 15 (2) (2015) 1538–1542.

28. Kokubo K., Water soluble single-nano carbon particles: Fullerenol and its derivatives, In book: *The delivery of nanoparticles*. Ed. by A. A. Hashin, InTechOpen, London (2012) 317–332.

29. Blythe A. R., Bloor D., *Electrical properties of polymers*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2005.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

НИКИТИНА Елизавета Александровна – аспирантка, инженер Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

eanikitina26@icloud.com

ORCID: 0000-0003-1394-2681

КАПРАЛОВА Виктория Маратовна – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

kapralova2006@yandex.ru

ORCID: 0000-0001-9050-4453

СУДАРЬ Николай Тобисович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

sudar53@mail.ru

ORCID: 0000-0001-7380-7727

СТУДЗИНСКИЙ Виталий Михайлович – аспирант, инженер Высшей школы высоковольтной энергетики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

svm.fl@mail.ru

ORCID: 0000-0002-2149-2978

ГЕРАСИМОВ Виктор Иванович – кандидат технических наук, доцент Высшей школы механики и процессов управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

viger53@rambler.ru

ORCID: 0009-0004-2167-0019

THE AUTHORS

NIKITINA Elizaveta A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

eanikitina26@icloud.com

ORCID: 0000-0003-1394-2681

KAPRALOVA Viktoria M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kapralova2006@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-9050-4453

SUDAR Nicolay T.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
sudar53@mail.ru
ORCID: 0000-0001-7380-7727

STUDZINSKII Vitalii M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
svm.fl@mail.ru
ORCID: 0000-0002-2149-2978

GERASIMOV Victor I.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
viger53@rambler.ru
ORCID: 0009-0004-2167-0019

*Статья поступила в редакцию 01.04.2024. Одобрена после рецензирования 25.04.2024.
Принята 25.04.2024.*

Received 01.04.2024. Approved after reviewing 25.04.2024. Accepted 25.04.2024.

Original article

UDC 544.227

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17308>

**EFFECT OF ARGON ION BOMBARDMENT
ON THE COMPOSITION, ELECTRONIC STRUCTURE
AND PHYSICAL PROPERTIES OF CADMIUM FLUORIDE**

**A. A. Abduvayitov¹, D. A. Tashmukhamedova¹, B. E. Umirzakov¹,
J. B. Khujaniyozov¹, I. R. Bekpulatov² ✉, V. V. Loboda³**

¹ Tashkent State Technical University Named after Islam Karimov, Tashkent, Uzbekistan;

² Karshi State University, Tashkent, Uzbekistan;

³ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ bekpulatov85@rambler.ru

Abstract. In the paper, the effect of bombardment with Ar⁺ ions on the composition, electronic and crystal structure of the surface layers of bulk single crystal samples and CdF₂(111) films has been studied using the methods of Auger electron and ultraviolet photoelectron spectroscopy, high-energy electron diffraction and recording the angular dependences of the reflectance factor of inelastically reflected electrons. The effect of this bombardment on the density of states of valence electrons and energy band parameters of CdF₂ was investigated for the first time. The degree of disorder of CdF₂ into components and evaporation of fluorine from the surface layers was established to depend on the energy and dose of Ar⁺ ions. The complete evaporation of F in the form of a diatomic gas was shown for the first time to be observed in the energy range of 1 – 2 keV at a saturation dose.

Keywords: epitaxial layer, heterostructures, ion bombardment, Auger spectrum, photoelectron spectrum, disordered layer, electron density of state

Funding: The studies are being done within the Fundamental Scientific Project No. F-OT-2021-422 of The Republic of Uzbekistan and The Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation. The research is funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the framework of the program “The World-Class Research Centre: Advanced Digital Technologies” (Contract No. 075-15-2022-311 dated April 20, 2022).

For citation: Abduvayitov A. A., Tashmukhamedova D. A., Umirzakov B. E., Khujaniyozov J. B., Bekpulatov I. R., Loboda V. V., Effect of argon ion bombardment on the composition, electronic structure and physical properties of cadmium fluoride, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 87–96. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17308>

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

Научная статья

УДК 544.227

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17308>

**ВЛИЯНИЕ БОМБАРДИРОВКИ ИОНАМИ АРГОНА НА СОСТАВ,
ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ФТОРИДА КАДМИЯ**

**А. А. Абдувайитов¹, Д. А. Ташмухамедова¹, Б. Е. Умирзаков¹,
Д. Б. Хужаниёзов¹, И. Р. Бекпулатов² ✉, В. В. Лобода³**

¹ Ташкентский государственный технический университет им. Ислама Каримова,

г. Ташкент, Узбекистан;

² Каршинский государственный университет, г. Карши, Узбекистан;

³ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

✉ bekpulatov85@rambler.ru

Аннотация. В работе изучено влияние бомбардировки ионами аргона Ar^+ на состав, электронную и кристаллическую структуру поверхностных слоев объемных монокристаллических образцов и пленок фторида кадмия $\text{CdF}_2(111)$. Для этого использованы методы оже-электронной и ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии, дифракции быстрых электронов и регистрация угловой зависимости коэффициента отражения неупругоотраженных электронов. Впервые изучено влияние указанной бомбардировки на плотность состояния валентных электронов и энергетические зонные параметры $\text{CdF}_2(111)$. Установлено, что степень разупорядочения CdF_2 на составляющие и испарение фтора с поверхностных слоев зависит от энергии и дозы ионов Ar^+ . Впервые показано, что полное испарение фтора в виде двухатомного газа наблюдается в области энергий 1 – 2 кэВ при дозе насыщения.

Ключевые слова: эпитаксиальный слой, гетероструктуры, ионная бомбардировка, оже-спектр, фотоэлектронный спектр, неупорядоченный слой, плотность электронных состояний

Финансирование: Работа осуществляется в рамках Фундаментального научного проекта № Ф-ОТ-2021-422 Республики Узбекистан и Министерства науки и образования Российской Федерации. Исследование финансируется Министерством науки и образования Российской Федерации в рамках программы «Исследовательский класс мирового уровня: передовые цифровые технологии» (контракт № 075-15-2022-311 от 20 апреля 2022 года).

Для цитирования: Абдувайитов А. А., Ташмухамедова Д. А., Умирзаков Б. Е., Хужаниёзов Д. Б., Бекпулатов И. Р., Лобода В. В. Влияние бомбардировки ионами аргона на состав, электронную структуру и физические свойства фторида кадмия // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 87–96. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17308>

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

Introduction

The great interest in epitaxial fluoride layers is associated both with the unique properties of the latter and with the wide potential possibilities of their application in opto- and microelectronics [1 – 13]. In particular, metal fluorides are widely used in the creation of special semiconductor – dielectric – semiconductor (SDS) structures in the three-dimensional integrated circuits. Of particular interest are $\text{CdF}_2/\text{Si}(111)$ heterostructures with a CaF_2 buffer layer [9, 14, 15]. The minimum thickness of the CaF_2 buffer layer was 0.9 nm [5]. In this case, CaF_2 plays the role of a barrier layer for the chemical reaction between CdF_2 and Si substrates [9]. At the same time, trivalent germanium turned out to be the most promising for doping CdF_2 [16].

Single-crystalline cadmium fluoride is a solid dielectric that can be converted into a semiconductor by doping with donor impurities and subsequent heating in a reducing atmosphere [16 – 18].

In Refs. [19, 20], the energy position of the levels of rare earth (RE) elements in the band diagram of BaF_2 and CdF_2 crystals was determined. The role of RE^{3+} and RE^{2+} ions in the carrier capture, luminescence, and the formation of radiation defects was assessed. It was shown that the significant difference in the luminescent properties of $\text{BaF}_2:\text{RE}$ and $\text{CdF}_2:\text{RE}$ was due to the position of excited energy levels in the band diagram of the crystals. In Ref. [21], Shubnikov – de Haas oscillations and a quantum staircase of the Hall resistance were discovered in a $p\text{-CdF}_2$ quantum well limited by $\text{CdB}_x\text{F}_{2-x}$ δ barriers on the $n\text{-CdF}_2$ surface. Thanks to the low effective



mass of two-dimensional holes, the observation of the quantum Hall effect became possible at room temperature.

Studying the influence of various external influences, especially ion bombardment, on the composition, structure and physical properties of fluorides is of both fundamental and applied interest. In recent years, we have thoroughly studied the effect of ion bombardment on the composition, electronic and crystal structure, emission and optical properties of dielectric films and samples [12 – 27]. However, to date, the effect of low-energy ion bombardment on the composition and properties of CdF_2 films has been practically unstudied.

In this work, changes in the composition, electronic and crystal structure of CdF_2 (111) upon bombardment with Ar^+ ions were studied for the first time.

Experimental methods

The subject of research was a single-crystal sample of CdF_2 (111) with a thickness of about 0.5 mm and molecular beam epitaxial (MBE) films of $\text{CdF}_2/\text{Si}(111)$ with a thickness of about 500 Å. Before ion bombardment, the samples under study were degassed at $T \approx 1000$ K for 3 hours in a vacuum (pressure $P \approx 10^{-7}$ Pa). The elemental and chemical compositions of the samples were determined by Auger electron spectroscopy (AES). The degree of amorphization of the CdF_2 film upon bombardment with Ar^+ ions and its crystallization during annealing, the type and parameters of the lattice were studied by high-energy electron diffraction (HEED) method and by measuring the angular dependences of the reflectance factor η of inelastically reflected electrons. To study the density of state of valence electrons and determine the parameters of energy bands, the method of ultraviolet photoelectron spectroscopy (UPS) was used. All measurements were carried out after the target was cooled to room temperature, in a vacuum with a pressure of at least 10^{-7} Pa. The choice of the (111) plane has been due to the fact that the $\text{CdF}_2(111)$ surface has the lowest free energy ($E_{\text{CdF}_2} \approx 5 \cdot 10^{-7} \text{ J} \cdot \text{cm}^{-2}$, $E_{\text{Si}} \approx 1.35 \cdot 10^{-4} \text{ J} \cdot \text{cm}^{-2}$ and is atomically smooth.

Experimental results and their discussion

The Auger spectrum of a well-cleaned $\text{CdF}_2(111)$ surface is shown in Fig. 1. It can be seen that the CdF_2 surface contains mainly an impurity of oxygen atoms with a concentration of no more than 1 at.%. The CdF_2 film surface has high crystalline perfection and an atomically smooth surface with a (1×1) structure reflection high-energy electron diffraction (RHEED) image (see inset in Fig. 1).

An analysis of the dependence of the intensity I_F of the Auger peak from fluorine at an energy of 646 eV on the irradiation dose to the $\text{CdF}_2(111)$ surface bombarded by Ar^+ ions with different energies E_0 (see Fig. 2) allows us to conclude the following. The intensive desorption of fluorine from the surface of CdF_2 occurs, starting from the irradiation dose $D = (1 - 5) \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ and up to $D = 10^{16} \text{ cm}^{-2}$; the rate of decrease in the intensity I_F depending on the energy E_0 . In particular, for $E_0 = 0.5$ keV at $D = 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, the intensity of the Auger peak corresponds to a minimum, but I_F is not equal to zero even at $D = 10^{17} \text{ cm}^{-2}$, and thus $D = (4 - 5) \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ is the saturation dose D_s for $E_0 = 0.5$ keV. For $E_0 = 1.0$ keV, a decrease in I_F to zero is observed at $D = (6 - 8) \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$. A decrease in I_F to zero occurred up to $E_0 = 2$ keV. At E_0 more than 2 – 3 keV, the I_F value, even at dose D more than 10^{17} cm^{-2} , was above zero. Apparently, at high energies of Ar^+ ions, the decomposition of CdF_2 predominantly occurs in the surface layer and complete evaporation of fluorine atoms from these layers does not occur. Or, the evaporation of Cd and CdF_2 as a whole may begin simultaneously with the evaporation of fluorine atoms.

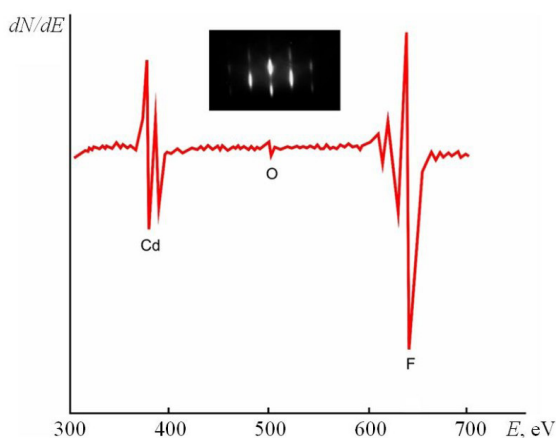


Fig. 1. The Auger spectrum and RHEED images (inset) of the pure $\text{CdF}_2(111)$ surface

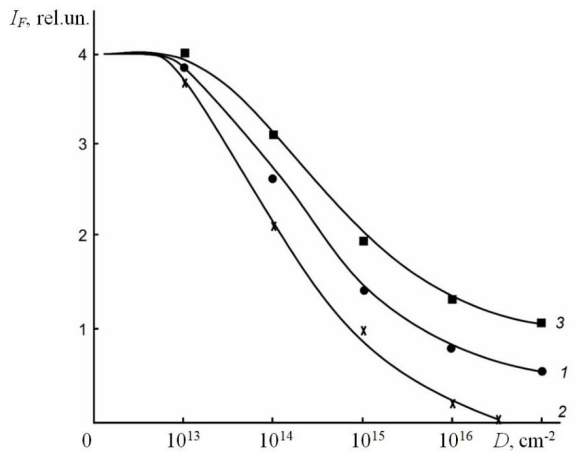


Fig. 2. Plots of the Auger F peak intensity (at $E = 646$ eV) versus the Ar⁺ irradiation dose D for CdF₂ bombarded by Ar⁺ ions with different energy values; E_0 , keV: 0.5 (1), 1.0 (2), 2.5 (3)

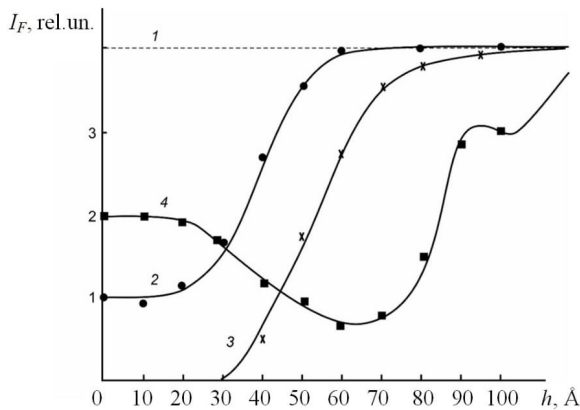


Fig. 3. The depth distribution profiles of F atoms from CdF₂ bombarded by Ar⁺ ions at $D = D_s$ with different energy values; E_0 , keV: 0.0 (1) 0.5 (2), 1.0 (3), 5.0 (4)

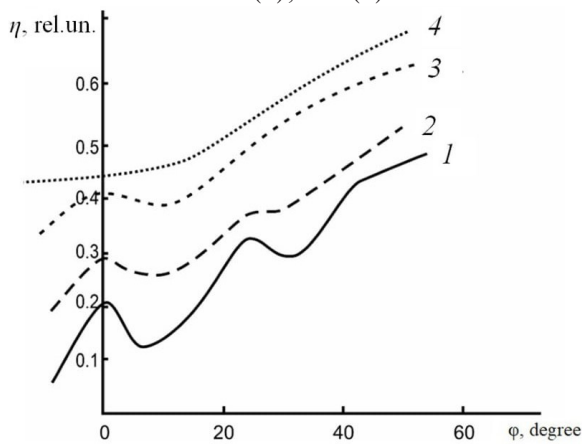


Fig. 4. The dependence of η on the angle ϕ (the angle of incidence of the primary beam) for amorphous CdF₂ films on Si(111) substrates; the film thickness values, Å: 10 (1), 20 (2), 40 (3), 50 (4). $E_p = 0.8$ keV

To answer this question, we studied the dependence of I_F on the depth h of a CdF₂ layer bombarded with Ar⁺ ions with different energies at $D = D_s$ (Fig. 3). The plots in Fig.3 show that the intensity of the I_F peak decreases sharply (by ~ 4 times) at $E_0 = 0.5$ keV, and it practically does not change until the layer depth $h = 20 - 80$ Å, that corresponds to the projected range of Ar⁺ ions.

Apparently, all F atoms in the form of diatomic gas F₂ evaporate from these layers. In the region $h \approx 25 - 50$ Å, the I_F concentration increases and, starting from $h \approx 50$ Å, the stoichiometric composition of CdF₂ is completely established. However, further studies showed that the CdF₂ layers were highly disordered to a depth of $h \approx 130 - 150$ Å. In the case of $E_0 = 1.0$ keV, the surface layers of the cadmium fluoride are completely decomposed into components to a depth of $h = 30 - 40$ Å, and almost all F atoms evaporate from these layers, and hence an amorphous cadmium film with a thickness of $d = 30 - 40$ Å is formed on the surface (see curve 3 in Fig. 3). When CdF₂ is bombarded by Ar⁺ ions with $E_0 = 5$ keV, the greatest decomposition occurs at the depth of the projected range of Ar⁺ ions ($h \approx 60 - 70$ Å). Apparently, most of the fluorine atoms go into vacuum, and the other part diffuses deep into the target. Therefore, the concentration of F increases significantly at a depth of $h = 80 - 100$ Å.

It is known that the thickness of disordered layers of a single crystal under ion bombardment is very difficult to determine experimentally. In this work, the depth of such layers was assessed by investigation of the angular dependences of the reflectance factor η of inelastically scattered electrons at the different primary electron energies E_p .

The dependences of η on the angle of incidence of the primary beam on the surface, for the Si(111) system with amorphous CdF₂ films of various thickness values are presented in Fig. 4. They were recorded at $E_p = 0.8$ keV. It can be seen that the main Si(111) p_p peak is completely smoothed out at a film thickness of about 50 Å. A similar method was used to determine the thicknesses of the CdF₂ films at which the main Si peak was smoothed out in the range $E_p = 1 - 10$ keV. The results are given in Table.

Using the data from Table, the thickness of disordered layers d_p in the CdF₂(111) was estimated using the condition when bombarded with Ar⁺ ions with different energies E_0 at doses $D = D_s$ (Fig. 5). This plot shows that

**The dependence of the thickness of
the amorphous CdF₂/Si(111) films on
the primary electron energies E_p**

E _p , keV	0.8	1.0	3.0	5.0	10
d, Å	50	80	200	350	500

Footnote: *d* values were found under the condition when the main peak on the curve $\eta(\varphi)$ was smoothed out at a given value of energy E_p .

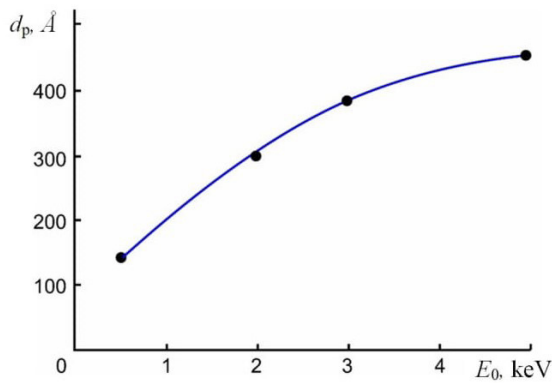


Fig. 5. A plot of the thickness of disordered layers versus the energy of Ar⁺ ions

Table *d* increases exponentially from about 130 to 450 Å as E_0 increases from 0.5 to 5 keV.

The photoelectron spectra of a CdF₂/Si(111) epitaxial film before and after bombardment by Ar⁺ ions at $E_0 = 1$ keV with different doses, taken at $h\nu = 21.2$ eV (Fig. 6). These spectra provide information about the density of state of the valence band electrons, and the area under the energy distribution curve is proportional to the quantum yield *Y* of photoelectrons. The top of the valence band E_v of CdF₂ is taken as the reference point. In the spectrum of pure CdF₂, there are three clearly defined maxima (peaks) at energies $E_{cv} = -1.6$ eV, -3.8 eV, and -8.1 eV. It can be assumed that peak E_1 appears due to hybridization of the 5*s* level of Cd with the 2*p* level of F; the main contribution to the appearance of peak E_2 is made by 5*s* levels of Cd, and that to E_3 is made by 2*p* levels of F.

When CdF₂ film is bombarded by Ar⁺ ions, a slight broadening of the curvilinear energy distribution of photoelectrons is observed at the dose $D = 10^{14}$ cm⁻², and a decrease in the intensity is observed at the peak of $E_{cv} = -1.8$ and 8.1 eV. Also, the shift of the peak in the initial state of the spectrum ($E_{cv} = 0.6 - 1.0$ eV) to the right leads to

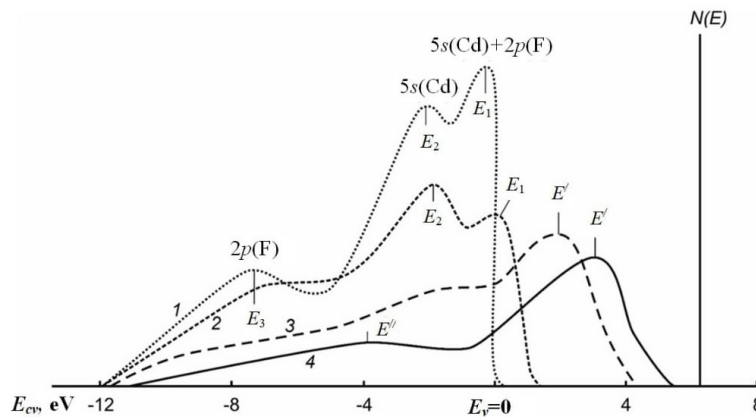


Fig. 6. The photoelectron spectra of the CdF₂ bombarded by Ar⁺ ions with energy $E_0 = 1$ keV. Doses D , cm⁻²: 0 (1), $1 \cdot 10^{14}$ (2); $5 \cdot 10^{15}$ (3), $5 \cdot 10^{16}$ (4)

a decrease in the gap width E_g of the CdF₂ film. At a dose of $5 \cdot 10^{15}$ cm⁻², a new peak E' characteristic of cadmium appears instead of E_1 and E_2 peaks, and the value of *Y* decreases by about 2 times in this case [19, 23].

Conclusion

In this work, the effect of bombardment with argon ions on the composition, electronic and crystal structure of the surface layers of single-crystal samples and CdF₂/Si(111) films has been studied. The molecular beam epitaxial film of the CdF₂/Si(111) with a thickness of 500 Å was shown to have high stoichiometric and crystalline perfection with a surface structure of 1×1 .

It was established that the intense desorption of fluorine atoms occurred, which continued up to dose $D = (5 - 10) \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$. The concentration of fluorine in the surface layers were found to go down to zero in the region $E_0 = 1 - 3 \text{ keV}$, and not decrease to zero when E_0 being greater than 4 keV. The main mechanisms of these changes were clarified.

For the first time, the thickness of layers enriched with cadmium atoms and the thickness of highly disordered $\text{CdF}_2/\text{Si}(111)$ layers were estimated. The change in the density of state of CdF_2 valence electrons upon bombardment by Ar^+ ions with $E_0 = 1 \text{ keV}$ was also studied for the first time using ultraviolet photoelectron spectroscopy (UPS) at different doses.

The results obtained in this work can undoubtedly be useful in the development of modern generation communications-electronics equipment.

REFERENCES

1. Sugiyama M., Oshima M., MBE growth of fluorides, *Microelectron. J.* 27 (4–5) (1996) 361–382.
2. Weng J., Gao Sh.-P., Layer-dependent band gaps and dielectric constants of ultrathin fluorite crystals, *J. Phys. Chem. Solids.* 148 (Jan) (2021) 109738.
3. Illarionov Y. Y., Vexler M. I., Suturin S. M., et al., Electron tunneling in MIS capacitors with the MBE-grown fluoride layers on Si (111) and Ge (111): Role of transverse momentum conservation, *Microelectron. Eng.* 88 (7) (2011) 1291–1294.
4. Banshchikov A. G., Illarionov Yu. Yu., Vexler M. I., et al., Trends in reverse-current change in tunnel MIS diodes with calcium fluoride on Si (111) upon the formation of an extra oxide layer, *Semicond.* 53 (6) (2019) 833–837.
5. Izumi A., Kawabata K., Tsutsui K., et al., Growth of $\text{CdF}_2\text{CaF}_2\text{Si}$ (111) heterostructure with abrupt interfaces by using thin CaF_2 buffer layer, *Appl. Surf. Sci.* 104–105 (2 Sept) (1996) 417–421.
6. Sokolov N. S., Suturin S. M., MBE-growth peculiarities of fluoride ($\text{CdF}_2\text{--CaF}_2$) thin film structures, *Thin Solid Films.* 367 (1–2) (2000) 112–119.
7. Mir A., Zaoui A., Bensaid D., The displacement effect of a fluorine atom in CaF_2 on the band structure, *Appl. Surf. Sci.* 439 (1 May) (2018) 1180–1185.
8. Li Zh., Baskurt M., Sahin H., et al., Electronic properties of intrinsic vacancies in single-layer CaF_2 and its heterostructure with monolayer MoS_2 , *J. Appl. Phys.* 130 (5) (2021) 055301.
9. Kalugin A. I., Sobolev V. V., Optical properties of CdF_2 in a wide energy range, *Tech. Phys.* 49 (3) (2004) 338–341.
10. Bekpulatov I. R., Imanova G. T., Kamilov T. S., et al., Formation of *n*-type CoSi monosilicide film which can be used in instrumentation, *Int. J. Modern Phys. B.* 37 (17) (2023) 22350164.
11. Bekpulatov I. R., Shomukhammedova D. S., Shukurova D. M., Ibragimova B. V., Obtaining higher manganese silicide films with high thermoelectric properties, *E3S Web Conf.* 365 (30 Jan) (2023) 05015.
12. Kamilov T. S., Rysbaev A. S., Klechkovskaya V. V., et al., The influence of structural defects in silicon on the formation of photosensitive $\text{Mn}_4\text{Si}_7\text{--Si(Mn)--Mn}_4\text{Si}_7$ and $\text{Mn}_4\text{Si}_7\text{--Si(Mn)--M}$ heterostructures, *Appl. Sol. Energy.* 55 (6) (2019) 380–384.
13. Rysbaev A. S., Khujaniyozov J. B., Bekpulatov I. R., et al., Effect of thermal and laser annealing on the atom distribution profiles in Si (111) implanted with P^+ and B^+ ions, *J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech.* 11 (2) (2017) 474–479.
14. Shcheulin A. S., Kupchikov A. K., Angervaks A. E., et al., Radio-frequency response of semiconducting $\text{CdF}_2\text{:In}$ crystals with Schottky barriers, *Phys. Rev. B.* 63 (20) (2001) 205207.
15. Sorokin L. M., Kyutt R. N., Ratnikov V. V., Kalmykov A. E., Structural characterization of a short-period superlattice based on the $\text{CdF}_2/\text{CaF}_2/\text{Si}$ (111), *Tech. Phys. Lett.* 47 (12) (2021) 893–896.
16. Ryskin A. I., Shcheulin A. S., Angervaks A. E., Semiconductor $\text{CdF}_2\text{:Ga}$ and CdF_2 in crystals as media for real-time holography, *Mater.* 5 (5) (2012) 784–817.
17. Kazansky S. A., Ryskin A. I., Clusters of group-III ions in activated fluorite-type crystals, *Phys. Solid State.* 44 (8) (2002) 1415–1425.
18. Varlamov A. G., Ulanov V. A., Donornaya provodimost' cristalla $\text{CdF}_2\text{:V}^{3+}$, otzhozhnogo v vakuume [Donor conductivity of the vacuum-annealed $\text{CdF}_2\text{:V}^{3+}$ crystal], *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii Rossii. Problemy Energetiki [Energy Problems]*. (9–10) (2006) 100–104 (in Russian).



19. **Rodnyĭ P. A., Khodyuk I. V., Stryganyuk G. B.**, Location of the energy levels of the rare-earth ions in BaF_2 and CdF_2 , *Phys. Solid State*. 50 (9) (2008) 1639–1643.
20. **Dorenbos P.**, Systematic behaviour in trivalent lanthanide charge transfer energies, *J. Phys. Cond. Matter*. 15 (49) (2003) 8417–8434.
21. **Bagraev N. T., Gimbitskaya O. N., Klyachkin L. E., et al.**, Quantum Hall effect in (cadmium fluoride)-based nanostructures, *Semicond.* 43 (1) (2009) 75–77.
22. **Umirzakov B. E., Pugacheva T. S., Tashatov A. K., Tashmukhamedova D. A.**, Electronic structure and optical properties of CaF_2 films under low energy Ba^+ ion-implantation combined with annealing, *Nucl. Instr. and Meth. B*. 166–167 (2 May) (2000) 572–576.
23. **Umirzakov B. E., Tashmukhamedova D. A., Muradkabilov D. M., Boltaev Kh. Kh.**, Electron spectroscopy of the nanostructures created in Si, GaAs, and CaF_2 surface layers using low-energy ion implantation, *Tech. Phys.* 58 (6) (2013) 841–844.
24. **Umirzakov B. E., Tashatov A. K., Tashmukhamedova D. A., Normuradov M. T.**, Protsess formirovaniya nanoplyonok na poverkhnosti CaF_2 pri ionnoy implantatsii i posleduyushchem otzhige [Nanofilm formation process on the CaF_2 surface during ion implantation and subsequent annealing], *Poverkhnost'. Rentgenovskie, Sinkhronnye i Neitronnye Issledovaniya* [Surface. X-ray, Synchrotron and Neutron Investigations]. (12) (2004) 90–94 (in Russian).
25. **Umirzakov B. E., Tashmukhamedova D. A., Ruzibaeva M. K., et al.**, Investigation of change of the composition and structure of the CdF_2/Si films surface at the low-energy bombardment, *Nucl. Instr. and Meth. B*. 326 (1 May) (2014) 322–325.
26. **Tashmukhamedova D. A., Yusupjanova M. B.**, Emission and optical properties of SiO_2/Si films, *J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech.* 10 (6) (2016) 1273–1275.
27. **Abduvayitov A. A., Boltaev Kh. Kh., Rozikov G. A.**, Study of the composition of uncontrolled impurities and the profiles of their distribution at the Ni–CdS interface, *J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech.* 16 (5) (2022) 860–863.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Sugiyama M., Oshima M.** MBE growth of fluorides // *Microelectronics Journal*. 1996. Vol. 27. No. 4–5. Pp. 361–382.
2. **Weng J., Gao Sh.-P.** Layer-dependent band gaps and dielectric constants of ultrathin fluorite crystals // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2021. Vol. 148. January. P. 109738.
3. **Illarionov Y. Y., Vexler M. I., Suturin S. M., Fedorov V. V., Sokolov N. S., Tsutsui K., Takahashi K.** Electron tunneling in MIS capacitors with the MBE-grown fluoride layers on Si (111) and Ge (111): Role of transverse momentum conservation // *Microelectronic Engineering*. 2011. Vol. 88. No. 7. Pp. 1291–1294.
4. **Банщиков А. Г., Илларионов Ю. Ю., Векслер М. И., Wachter S., Соколов Н. С.** Характер изменения обратного тока в туннельных МДП-диодах с фторидом кальция на Si (111) при создании дополнительного оксидного слоя // *Физика и техника полупроводников*. 2019. Т. 53. № 6. С. 844–849.
5. **Izumi A., Kawabata K., Tsutsui K., Sokolov N. S., Novikov S. V., Khilko A. Yu.** Growth of $\text{CdF}_2/\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$ heterostructure with abrupt interfaces by using thin CaF_2 buffer layer // *Applied Surface Science*. 1996. Vol. 104–105. 2 September. Pp. 417–421.
6. **Sokolov N. S., Suturin S. M.** MBE-growth peculiarities of fluoride (CdF_2 – CaF_2) thin film structures // *Thin Solid Films*. 2000. Vol. 367. No. 1–2. Pp. 112–119.
7. **Mir A., Zaoui A., Bensaïd D.** The displacement effect of a fluorine atom in CaF_2 on the band structure // *Applied Surface Science*. 2018. Vol. 439. 1 May. Pp. 1180–1185.
8. **Li Zh., Baskurt M., Sahin H., Gao S., Kang J.** Electronic properties of intrinsic vacancies in single-layer CaF_2 and its heterostructure with monolayer MoS_2 // *Journal of Applied Physics*. 2021. Vol. 130. No. 5. P. 055301.
9. **Калугин А. И., Соболев В. В.** Оптические свойства CdF_2 в широкой области энергии // *Журнал технической физики*. 2004. Т. 74. № 3. С. 58–61.
10. **Bekpulatov I. R., Imanova G. T., Kamilov T. S., Igamov B. D., Turapov I. Kh.** Formation of *n*-type CoSi monosilicide film which can be used in instrumentation // *International Journal of Modern Physics B*. 2023. Vol. 37. No. 17. P. 22350164.

11. **Bekpulatov I. R., Shomukhamedova D. S., Shukurova D. M., Ibragimova B. V.** Obtaining higher manganese silicide films with high thermoelectric properties // E3S Web of Conferences. 2023. Vol. 365. 30 January. Article No. 05015 (7 p).
12. **Kamilov T. S., Rysbaev A. S., Klechkovskaya V. V., Orekhov A. S., Igamov B. D., Bekpulatov I. R.** The influence of structural defects in silicon on the formation of photosensitive Mn_4Si_7 -Si(Mn)- Mn_4Si_7 and Mn_4Si_7 -Si(Mn)-M heterostructures // Applied Solar Energy. 2019. Vol. 55. No. 6. Pp. 380–384.
13. **Рысбаев А. С., Хужаниязов Ж. Б., Бекпулатов И. Р., Рахимов А. М., Пардаев О. Р.** Исследование влияния термического и лазерного отжига на профили распределения атомов в Si (111), имплантированного ионами P^+ и B^+ // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2017. № 4. С. 98–103.
14. **Shcheulin A. S., Kupchikov A. K., Angervaks A. E., Onopko D. E., Ryskin A. I., Ritus A. I., Pronin A. V., Volkov A. A., Lunkenheimer P., Loidl A.** Radio-frequency response of semiconducting CdF_2 : In crystals with Schottky barriers // Physical Review B. 2001. Vol. 63. No. 20. P. 205207.
15. **Сорокин Л. М., Кютт Р. Н., Ратников В. В., Калмыков А. Е.** Структурная характеристика короткопериодной сверхрешетки на основе гетероструктуры $CdF_2/CaF_2/Si(111)$ методами просвечивающей электронной микроскопии и рентгеновской дифрактометрии // Письма в Журнал технической физики. 2021. Т. 47. № 15. С. 3–6.
16. **Ryskin A. I., Shcheulin A. S., Angervaks A. E.** Semiconductor CdF_2 : Ga and CdF_2 in crystals as media for real-time holography // Materials (Basel). 2012. Vol. 5. No. 5. Pp. 784–817.
17. **Казанский С. А., Рыскин А. И.** Кластеры ионов III группы в активированных кристаллах типа флюорита // Физика твердого тела. 2002. Т. 44. № 8. С. 1356–1366.
18. **Варламов А. Г., Уланов В. А.** Донорная проводимость кристалла $CdF_2:V^{3+}$, отожженного в вакууме // Известия высших учебных заведений. Проблемы энергетики. 2006. № 9–10. С. 100–104.
19. **Родный П. А., Ходюк И. В., Стрыганюк Г. Б.** Энергетическое положение редкоземельных ионов в BaF_2 и CdF_2 // Физика твердого тела. 2008. Т. 50. № 9. С. 1578–1581.
20. **Dorenbos P.** Systematic behaviour in trivalent lanthanide charge transfer energies // Journal of Physics: Condensed Matter. 2003. Vol. 15. No. 49. Pp. 8417–8434.
21. **Баграев Н. Т., Гимбицкая О. Н., Клячкин Л. Е., Маляренко А. М., Шелых И. А., Рыскин А. И., Щеулин А. С.** Квантовый эффект Холла в наноструктурах на основе фторида кадмия // Физика и техника полупроводников. 2009. Т. 43. № 1. С. 844–849.
22. **Umirzakov V. E., Pugacheva T. S., Tashatov A. K., Tashmukhamedova D. A.** Electronic structure and optical properties of CaF_2 films under low energy Ba^+ ion-implantation combined with annealing // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2000. Vol. 166–167. 2 May. Pp. 572–576.
23. **Умирзаков Б. Е., Ташмухамедова Д. А., Мурадкбиллов Д. М., Болтаев Х. Х.** Электронная спектроскопия наноструктур, созданных в поверхностных слоях Si, GaAs и CaF_2 методом низкоэнергетической ионной имплантации // Журнал технической физики. 2013. Т. 83. № 6. С. 66–70.
24. **Умирзаков Б. Е., Ташатов А. К., Ташмухамедова Д. А., Нормурадов М. Т.** Процесс формирования нанопленок на поверхности CaF_2 при ионной имплантации и последующем отжиге // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2004. № 12. С. 90–94.
25. **Umirzakov V. E., Tashmukhamedova D. A., Ruzibaeva M. K., Djurabekova F. G., Danaev S. B.** Investigation of change of the composition and structure of the CdF_2/Si films surface at the low-energy bombardment // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2014. Vol. 326. 1 May. Pp. 322–325.
26. **Ташмухамедова Д. А., Юсупжанова М. Б.** Эмиссионные и оптические свойства тонких пленок SiO_2/Si // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2016. № 12. С. 89–91.
27. **Abduvayitov A. A., Boltaev Kh. Kh., Rozikov G. A.** Study of the composition of uncontrolled impurities and the profiles of their distribution at the Ni–CdS interface // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2022. Vol. 16. No. 5. Pp. 860–863.

THE AUTHORS**ABDUVAYITOV Akbarjon A.**

Tashkent State Technical University Named after Islam Karimov
 2 Universitet St., Tashkent, 100095, Uzbekistan
 akbarjon.abduvayitov@gmail.com
 ORCID: 0000-0001-6453-6523

TASHMUKHAMEDOVA Dilnoza A.

Tashkent State Technical University Named after Islam Karimov
 2 Universitet St., Tashkent, 100095, Uzbekistan
 d.ftmet@gmail.com
 ORCID: 0000-0001-5813-7518

UMIRZAKOV Boltakhodja E.

Tashkent State Technical University Named after Islam Karimov
 2 Universitet St., Tashkent, 100095, Uzbekistan
 be.umirzakov@gmail.com
 ORCID: 0000-0002-9815-2111

KHUJANIYOZOV Jumanazar B.

Tashkent State Technical University Named after Islam Karimov
 2 Universitet St., Tashkent, 100095, Uzbekistan
 KhujaniyozovJB@mail.ru
 ORCID: 0000-0001-6067-8196

BEKPULATOV Ilkhom R.

Karshi State University
 17 Kuchabog St., Karshi, 180119, Uzbekistan
 bekpulatov85@rambler.ru
 ORCID: 0000-0001-7955-3932

LOBODA Vera V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
 vera_loboda@mail.ru
 ORCID: 0000-0003-3103-7060

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АБДУВАЙИТОВ Акбаржон Абдумаджитович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики Ташкентского государственного технического университета, г. Ташкент, Узбекистан.

100095, Узбекистан, г. Ташкент, Университетская ул., 2.
 akbarjon.abduvayitov@gmail.com
 ORCID: 0000-0001-6453-6523

ТАШМУХАМЕДОВА Дилноза Артикбаевна – доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики Ташкентского государственного технического университета имени Ислама Каримова, г. Ташкент, Узбекистан.

100095, Узбекистан, г. Ташкент, Университетская ул., 2
 d.ftmet@gmail.com
 ORCID: 0000-0001-5813-7518

УМИРЗАКОВ Балгоходжа Ерматович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики Ташкентского государственного технического университета имени Ислама Каримова, г. Ташкент, Узбекистан.

100095, Узбекистан, г. Ташкент, Университетская ул., 2

be.umirzakov@gmail.com

ORCID: 0000-0002-9815-2111

ХУЖАНИЁЗОВ Джуманазар Бобокулович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики Ташкентского государственного технического университета, г. Ташкент, Узбекистан.

100095, Узбекистан, г. Ташкент, Университетская ул., 2.

KhujaniyozovJB@mail.ru

ORCID: 0000-0001-6067-8196

БЕКПУЛАТОВ Ильхом Рустамович – доктор физико-математических наук, проректор по научной работе и инновациям Каршинского государственного университета, г. Карши, Узбекистан.

180119, Узбекистан, г. Карши, ул. Кучабог, 17

bekpulatov85@rambler.ru

ORCID: 0000-0001-7955-3932

ЛОБОДА Вера Владимировна – кандидат физико-математических наук, директор Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

vera_loboda@mail.ru

ORCID: 0000-0003-3103-7060

Received 09.12.2023. Approved after reviewing 19.04.2024. Accepted 19.04.2024.

Статья поступила в редакцию 09.12.2023. Одобрена после рецензирования 19.04.2024. Принята 19.04.2024.

Научная статья

УДК 544.227

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17309>

ВЛИЯНИЕ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ БОМБАРДИРОВКИ НА СОСТАВ И СТРУКТУРУ ПОВЕРХНОСТИ ФОСФИДА ГАЛЛИЯ

С. Б. Донаев^{1,2} ✉, Г. М. Ширинов¹, Б. Е. Умирзаков¹, В. В. Лобода³

¹Ташкентский государственный технический университет им. Ислама Каримова,
г. Ташкент, Узбекистан;

²Каршинский государственный университет, г. Карши, Узбекистан;

³Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

✉ sardor.donaev@gmail.com

Аннотация. В работе изучены закономерности изменения состава и структуры поверхностных слоев GaP (111) при бомбардировке электронами с энергиями $E_e = 3 - 10$ кэВ и дозами $D = 10^{17} - 10^{20}$ см⁻². Для этого использован метод оже-электронной спектроскопии и регистрация угловой зависимости коэффициента неупругого отражения электронов. Установлено, что при $E_e = 3$ кэВ поверхностные слои GaP обогащаются атомами P, а случае $E_0 = 10$ кэВ – атомами Ga. В обоих случаях профили распределения атомов Ga по глубине образца имеют немонотонный характер. Оценено значение энергии электронов, при котором происходит инверсия состава поверхности. Дан анализ полученных результатов.

Ключевые слова: оже-электронная спектроскопия, наноразмерная фаза, электронная бомбардировка, поверхностная концентрация атомов

Для цитирования: Донаев С. Б., Ширинов Г. М., Умирзаков Б. Е., Лобода В. В. Влияние низкоэнергетической электронной бомбардировки на состав и структуру поверхности фосфида галлия // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 97–104. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17309>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17309>

INFLUENCE OF LOW-ENERGY ELECTRON BOMBARDMENT ON THE COMPOSITION AND STRUCTURE OF THE GALLIUM PHOSPHIDE SURFACE

S. B. Donaev^{1,2} ✉, G. M. ugli Shirinov¹, B. Y. Umirzakov¹, V. V. Loboda³

¹Tashkent State Technical University Named after Islam Karimov, Tashkent, Uzbekistan;

²Karshi State University, Karshi, Uzbekistan;

³Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ sardor.donaev@gmail.com

Abstract. In the paper, the patterns of changes in the composition and structure of the surface layers of GaP(111) in bombardment by electrons with energies from 3 to 10 keV and doses in the range $10^{17} - 10^{20}$ cm⁻² have been studied using the method of Auger electron spectroscopy and recording the angular dependence of the electron inelastic reflection coefficient. It was established that the surface layers of GaP were enriched with P atoms at $E = 3$ keV, and with

Ga atoms at $E = 10$ keV. In both cases, the Ga atoms distribution profiles over the depth the sample were non-monotonic. The electron energy value at which an inversion of the surface composition took place was estimated. An analysis of the results obtained was given.

Keywords: Auger electron spectroscopy, nanosized phase, electron bombardment, surface concentration of atoms

For citation: Donaev S. B., Shirinov G. M. ugli, Umirzakov B. Y., Loboda V. V., Influence of low-energy electron bombardment on the composition and structure of the gallium phosphide surface, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 97–104. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17309>

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

Введение

Наноразмерные гетероструктуры на основе бинарных полупроводников, в том числе фосфида галлия GaP, широко используются и имеют перспективы создания монолитных оптоэлектронных интегральных схем, фотопреобразователей (солнечных элементов), лазеров оптической и электронной накачки, а также приборов СВЧ-электроники [1 – 6]. Поэтому в настоящее время актуальным является получение информации об электронных, оптических, эмиссионных и электрофизических свойствах указанных выше структур и анализ влияния различных воздействий на эти свойства [7 – 10].

Для модификации физических свойств бинарных соединений используются различные методы. Это термический прогрев, травление, лазерное облучение, а также ионные бомбардировка и имплантация. При этом для создания монолитных интегральных схем на поверхности подложки (как правило, используют кремний Si) будет необходимо выращивать эпитаксиальную пленку с прямозонным переходом [1, 11].

В работах [12 – 14] имплантацией ионов Al^{3+} в фосфид и арсенид галлия (GaP (111) и GaAs (111)) получены нанофазы и нанопленки GaAlP и GaAlAs. Установлено, что в случае нанофаз GaAlP с поверхностными размерами менее 35 – 40 нм и толщиной 3,5 – 4,0 нм проявляются квантоворазмерные эффекты. Вследствие большой ширины запрещенной зоны GaAsP (2,26 эВ) и благоприятных смещений валентной зоны и зоны проводимости [15, 16], КПД солнечных элементов на основе GaAsP/Si может теоретически достигать значения 41,9 % [17].

В последние годы проводились экспериментальные исследования и компьютерное моделирование влияния бомбардировки ионами инертных газов на состав и структуру поверхности пленок GaP, InGaP [18, 19].

В работе [19] изучено, например, влияние поверхностных дефектов на траекторию деканализированных ионов и ее зависимость от энергии и угла рассеяния этих ионов. Экспериментально установлено, что при бомбардировке поверхностей $CoSi_2$ и GaP ионами аргона Ar^+ происходит металлизация этих поверхностей [18].

Таким образом, в настоящее время хорошо изучено влияние ионной бомбардировки, прогрева и лазерного облучения на состав и физические свойства монокристаллов A^3B^5 . Однако до настоящего времени практически не исследовано влияние электронной бомбардировки на состав и структуру монокристаллических образцов фосфида галлия.

Цель данной работы – проанализировать влияние электронной бомбардировки на состав и структуру поверхностного слоя монокристаллического фосфида галлия GaP (111).

Методика эксперимента

В качестве объекта исследования выбраны монокристаллические образцы GaP (111) диаметром около 10 мм и толщиной 1 мм. Исследования образцов проводились с использованием методов оже-электронной спектроскопии (ЭОС) и регистрации угловой зависимости коэффициента неупругого отражения электронов (НУОЭ). Для определения профиля распределения внедренных атомов по глубине проводился послойный



оже-анализ путем распыления ионов аргона Ar^+ с энергией 1 кэВ по поверхности образца; угол падения ионов составлял примерно $80 - 85^\circ$ относительно нормали, скорость травления поверхности была около $5 \pm 1 \text{ \AA}/\text{мин}$.

Результаты и обсуждение

Бомбардировка поверхности фосфида галлия проводилась электронами с энергиями E_e в интервале 3 – 10 кэВ с дозой D в интервале от 10^{17} до 10^{20} см^{-2} и плотностью тока j порядка $5 \cdot 10^{16} \text{ эл}/\text{см}^2$. При повышении дозы до уровня $D \approx 10^{18} \text{ см}^{-2}$ каких-либо заметных изменений состава и структуры поверхности фосфида галлия не наблюдалось. На рис. 1 приведены зависимости поверхностной концентрации атомов галлия C_{Ga} от дозы облучения D для фосфида галлия, бомбардированного электронами с энергиями 3 и 10 кэВ.

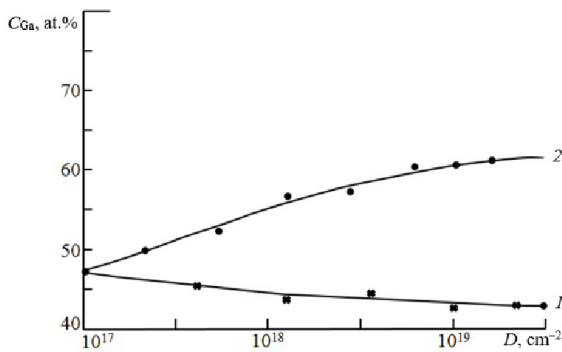


Рис. 1. Зависимости поверхностной концентрации атомов Ga от дозы электронной бомбардировки поверхности GaP с энергиями $E_e = 3 \text{ кэВ}$ (1) и 10 кэВ (2)

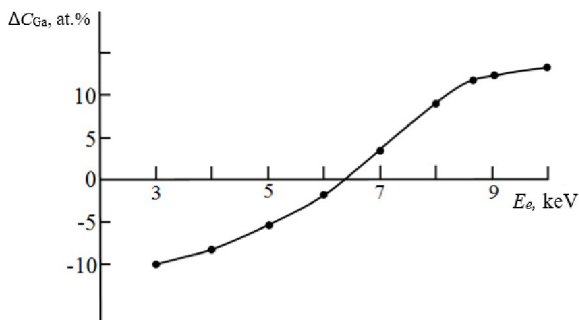


Рис. 2. Зависимость относительной поверхностной концентрации атомов Ga от энергии электронной бомбардировки $E_e = 3 - 10 \text{ кэВ}$ при значении $D = D_s$

рис. 3 этот коэффициент обозначен как η_{800} . Глубина выхода НУОЭ составляла порядка $100 - 120 \text{ \AA}$. На рис. 3 видно, что на кривой $\eta(\varphi)$ необлученного GaP(111) обнаруживаются четко выраженные максимумы, обусловленные неупругим отражением электронов от различных кристаллографических плоскостей. После облучения электронами с $E_e = 3 \text{ кэВ}$ происходит существенное снижение интенсивности поглощения и изменение его основных максимумов. По-видимому, полного разупорядочения слоев не происходит. В случае $E_e = 10 \text{ кэВ}$ на кривых $\eta(\varphi)$ полностью сглаживаются максимумы, что характерно для аморфизированных пленок.

Чтобы оценить изменение состава GaP в его приповерхностном слое в процессе электронной бомбардировки, при $D = D_s$ регистрировались профили распределения атомов

увеличение дозы не приводит к изменению величины C_{Ga} , т. е. соответствующая кривая зависимости выходит на насыщение. При $E_e = 3 \text{ кэВ}$ доза насыщения D_s составляет 10^{19} см^{-2} , а при $E_e = 10 \text{ кэВ}$ $D_s \approx 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-2}$. Таким образом, при дозе $D_s = D_s$ поверхностная концентрация C_{Ga} может снижаться или возрастать в зависимости от энергии E_e .

На рис. 2 приведена зависимость относительной поверхностной концентрации ΔC_{Ga} от энергии E_e в интервале значений $E_e = 3 - 10 \text{ кэВ}$ при $D = D_s$. Видно, что в диапазоне $E_e = 6 - 7 \text{ кэВ}$ кривая указанной зависимости проходит через нулевое значение. Начиная с $E_e \approx 9 \text{ кэВ}$ скорость изменения величины ΔC_{Ga} снижается. В процессе электронной бомбардировки происходит разложение фосфида галлия на составляющие атомы и имеет место разупорядочение поверхности в приповерхностной области GaP.

Степень разупорядочения поверхности оценивалась на основе угловых зависимостей коэффициента неупругого отражения электронов η при $E_{dis} = 800 \text{ эВ}$; на

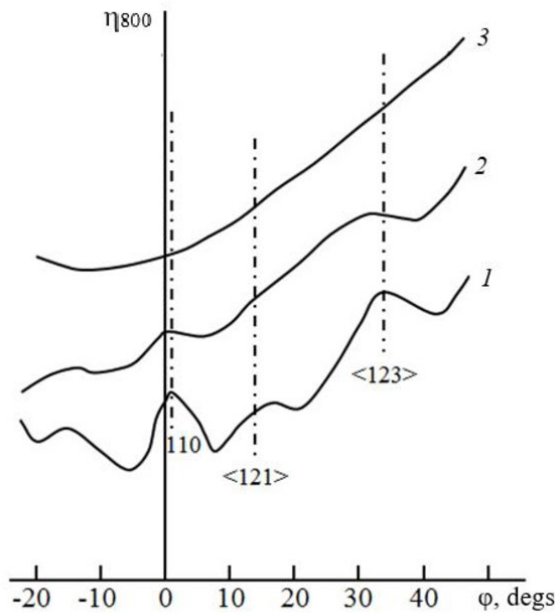


Рис. 3. Угловые зависимости коэффициента неупругого отражения электронов поверхностью GaP до бомбардировки (кривая 1); GaP, бомбардированного электронами с энергией 3 кэВ (кривая 2) и 10 кэВ (кривая 3).

Вертикальными штрихпунктирными линиями показаны позиции максимумов на кривых, связанных с неупругим отражением электронов от различных кристаллографических плоскостей GaP. $E_{dis} = 800$ эВ

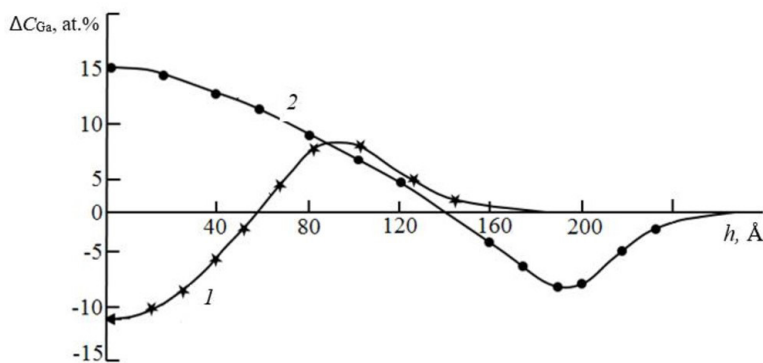


Рис. 4. Профили распределения атомов Ga по глубине h образца GaP, бомбардированного электронами с энергиями $E_e = 3$ кэВ (1) и 10 кэВ (2), при $D = D_s$

Таким образом, поверхностные слои при значениях глубины не более 50 Å обогащаются атомами фосфора и обедняются атомами галлия. Уход атомов фосфора из приповерхностного слоя при значениях $h \approx 50 - 90$ Å приводит к росту в этом слое концентрации атомов галлия (см. кривую 1 на рис. 4). Это следует из того, что площади под кривыми $-\Delta C_{Ga}(h)$ и $+\Delta C_{Ga}(h)$ практически не различаются. В случае же энергии электронов $E_e = 10$ кэВ основное изменение состава происходит до глубин $h \approx 250 - 300$ Å. При этом испаряется большая часть атомов фосфора, диффундирующая к поверхности; это

галлия по глубине h образца (рис. 4). Видно, что при $E_e = 3$ кэВ относительная концентрация галлия ΔC_{Ga} до глубины 15 – 20 Å заметно не меняется (см. кривую 1 на рис. 4), тогда как в интервале значений глубины $h \approx 20 - 110$ Å она монотонно растет от приблизительно –10 до +9 ат.%, затем, по мере роста глубины, она примерно экспоненциально снижается и при $h \approx 160 - 165$ Å приближается к нулю. В случае, когда энергия $E_e = 10$ кэВ, кривая $\Delta C_{Ga}(h)$, снижаясь, проходит через нуль, затем через минимум при $h \approx 200$ Å, экспоненциально растет и наконец приближается к нулю, начиная с $h \approx 250$ Å.

Анализ полученных результатов.

При бомбардировке электронами основные изменения состава и структуры поверхностных и приповерхностных слоев происходят при дозах D не менее 10^{17} см⁻². Заметное разложение фосфида галлия на составляющие атомы и разупорядочение приповерхностных слоев происходит при энергии $E_e \approx 3$ кэВ, начиная с дозы $D \approx 4 \cdot 10^{17}$ см⁻², а при $E_e \approx 10$ кэВ – начиная с дозы $D \approx 10^{17}$ см⁻². С повышением дозы электронного облучения степень разупорядочения поверхностных слоев GaP увеличивается как в случае $E_e = 3$ кэВ, так и при $E_e = 10$ кэВ.

В процессе электронной бомбардировки атомы фосфора диффундируют в сторону поверхности вследствие разницы в атомных массах фосфора и галлия (атомная масса P меньше, чем атомная масса Ga). По-видимому, при энергии электронов $E_e = 3$ кэВ, только малая часть молекул фосфида галлия разлагается и заметного испарения атомов с поверхности не происходит.



означает обогащение атомами Ga поверхностных слоев до значений глубины 120 – 150 Å. Небольшая часть атомов фосфора оказывается неспособной диффундировать вплоть до поверхности, и эти атомы увеличивают концентрацию фосфора на глубинах 160 – 240 Å (см. кривую 2 на рис. 4).

Заключение

Впервые изучено влияние электронной бомбардировки на состав и кристаллическую структуру поверхности GaP (111), служащей в качестве мишени, в интервале энергий электронов $E_e = 3 - 10$ кэВ. Определены изменения концентрации атомов галлия и фосфора на поверхности и их профили распределения по глубине в зависимости от энергии и дозы электронов. Показано, что при $E_e \leq 6$ кэВ поверхностная область GaP обогащается атомами фосфора, а при $E_e \geq 6$ кэВ – атомами галлия. Согласно полученным оценкам, значение энергии электронов, при котором происходит инверсия состава поверхностного слоя, составило примерно 6,4 кэВ.

Полученные в работе результаты могут быть полезны при разработке и создании монокристаллических интегральных схем на основе соединений $A^{III}B^V$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лазаренко А. А., Никитина Е. В., Пирогов Е. В., Соболев М. С., Егоров А. Ю. Молекулярно-пучковая эпитаксия азотсодержащих твердых растворов GaPN, GaPAsN и InGaPN // Физика и техника полупроводников. 2014. Т. 48. № 3. С. 407–411.
2. Yonezu H., Furukawa Y., Wakahara A. III–V epitaxy on Si for photonics applications // Journal of Crystal Growth. 2008. Vol. 310. No. 23. Pp. 4757–4762.
3. Егоров А. Ю., Крыжановская Н. В., Соболев М. С. Оптические свойства квантово-размерных гетероструктур на основе твердых растворов $GaP_xN_yAs_{1-x-y}$ // Физика и техника полупроводников. 2011. № 9. С. 1209–1213.
4. Yonezu H. Control of structural defects in-group III–V–N alloys grown on Si // Semiconductor Science and Technology. 2002. Vol. 17. No. 8. Pp. 762–768.
5. Ладугин М. А., Андреев А. Ю., Яроцкая И. В., Рябоштан Ю. Л., Багаев Т. А., Падалица А. А., Мармалюк А. А., Васильев М. Г. Сравнительный анализ квантовых ям GaAs/GaInP и GaAs/AlGaAs, полученных в условиях МОС-гидридной эпитаксии // Неорганические материалы. 2019. Т. 55. № 4. С. 345–349.
6. Razeghi M. Technology of quantum devices. New York: Springer, 2016. 560 p.
7. Планкина С. М., Вихрова О. В., Звонков Б. Н., Зубков С. Ю., Крюков Р. Н., Нежданов А. В., Павлов Д. А., Пашенькин И. Ю., Сушков А. А. Комплексное применение спектроскопии комбинационного рассеяния света и фотолюминесценции для диагностики многослойных гетероструктур // Физика и техника полупроводников. 2019. Т. 53. № 9. С. 1233–1236.
8. Limmer W., Glunk M., Mascheck S., Koeder A., Klarer D., Schoch W., Thonke K., Sauer R., Waag A. Coupled plasmon-LO-phonon modes in $Ga_{1-x}Mn_xAs$ // Physical Review B. 2002. Vol. 66. No. 20. P. 205209.
9. Bonera E., Fanciulli M., Batchelder D. N. Raman spectroscopy for a micrometric and tensorial analysis of stress in silicon // Applied Physics Letters. 2002. Vol. 81. No. 18. Pp. 3377–3379.
10. Соболев М. С., Лазаренко А. А., Никитина Е. В., Пирогов Е. В., Гудовских А. С., Егоров А. Ю. Молекулярно-пучковая эпитаксия GaP на подложке Si // Физика и техника полупроводников. 2015. Т. 49. № 4. С. 569–572.
11. Furykawa Y., Yoneza H., Wakahara A. Monolithic integration of light-emitting devices and silicon transistors // SPIE Newsroom. 2007. 19 November. https://spie.org/news/0914-monolithic-integration-of-light-emitting-devices-and-silicon-transistors#_=_.
12. Данаев С. Б., Умирзаков Б. Е., Ташмухамедова Д. А. Электронная структура наноразмерных структур $Ga_{1-x}Al_xAs$, созданных на поверхности GaAs методом ионной имплантации // Журнал технической физики. 2015. Т. 85. № 10. С. 148–151.
13. Умирзаков Б. Е., Ташмухамедова Д. А., Мурадкабилов Д. М., Болтаев Х. Х. Электронная спектроскопия наноструктур, созданных в поверхностных слоях Si, GaAs и CaF_2 методом низкоэнергетической ионной имплантации // Журнал технической физики. 2013. Т. 83. № 6. С. 66–70.

14. Shirinov G. M., Donaev S. B., Umirzakov B. Y., Loboda V. V. Emission, optical and electrical properties of GaInP/GaP nanofilms // St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 2. Pp. 89–93.
15. Feifel M., Ohlmann J., Benick J., et al. MOVPE grown gallium phosphide-silicon heterojunction solar cells // IEEE Journal of Photovoltaics. 2017. Vol. 7. No. 2. Pp. 502–507.
16. Garcia-Tabares E., Martin D., Garcia I., Lelievre J. F., Rey-Stolle I. Optimization of the silicon subcell for III-V on silicon multijunction solar cells: Key differences with conventional silicon technology // AIP Conference. Proceedings. 2012. Vol. 1477. Pp. 5–9.
17. Connolly J. P., Mencaraglia D., Renard C., Bouchier D. Designing III-V multijunction solar cells on silicon // Progress in Photovoltaics: Research and Application. 2014. Vol. 22. No. 7. Pp. 810–820.
18. Boltaev X. X., Tashmuhamedova D. A., Donaev S. B., Umirzakov B. E. Influence of bombardment of ions Ar⁺ on property and structure of surface nanofilms CoSi₂/Si(111) // Proceedings of the Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry (SIMS-2014). Munster, Germany, September 7–9, 2014. P. 125.
19. Kutliev U. O., Otabaev M. U., Karimov M. K., Masharipov F. K., Woiciechowski I. Scattering of low-energy Ne⁺ ions from the stepped surface of InGaP(001) ⟨110⟩ at the small angles of incidence // Physics and Chemistry of Solid State. 2023. Vol. 24. No. 3. Pp. 542–548.

REFERENCES

1. Lazarenko A. A., Nikitina E. V., Pirogov E. V., et al., Molecular beam epitaxy of GaPN, GaPAsN, and InGaPN nitride solid solutions, *Semicond.* 48 (3) (2014) 392–396.
2. Yonezu H., Furukawa Y., Wakahara A., III–V epitaxy on Si for photonics applications, *J. Cryst. Growth.* 310 (23) (2008) 4757–4762.
3. Egorov A. Yu., Kryzhanovskaya N. V., Sobolev M. S., Optical properties of quantum-confined heterostructures based on GaP_xN_yAs_{1-x-y} alloys, *Semicond.* 45 (9) (2011) 1164–1168.
4. Yonezu H., Control of structural defects in-group III–V–N alloys grown on Si, *Semicond. Sci. Technol.* 17 (8) (2002) 762–768.
5. Ladugin M. A., Andreev A. Yu., Yarotskaya I. V., et al., Comparative study of GaAs/GaInP and GaAs/AlGaAs quantum wells grown by metalorganic vapor phase epitaxy, *Inorg. Mater.* 55 (4) (2019) 315–319.
6. Razeghi M., *Technology of quantum devices*, Springer, New York, 2016.
7. Plankina S. M., Vikhrova O. V., Zvonkov B. N., et al., On the combined application of Raman spectroscopy and photoluminescence spectroscopy for the diagnostics of multilayer heterostructures, *Semicond.* 53 (9) (2019) 1207–1210.
8. Limmer W., Glunk M., Mascheck S., et al., Coupled plasmon-LO-phonon modes in Ga_{1-x}Mn_xAs, *Phys. Rev. B.* 66 (20) (2002) 205209.
9. Bonera E., Fanciulli M., Batchelder D. N., Raman spectroscopy for a micrometric and tensorial analysis of stress in silicon, *Appl. Phys. Lett.* 81 (18) (2002) 3377–3379.
10. Sobolev M. S., Lazarenko A. A., Nikitina E. V., et al., MBE growth of GaP on a Si substrate, *Semicond.* 49 (4) (2015) 559–562.
11. Furykawa Y., Yoneza H., Wakahara A., Monolithic integration of light-emitting devices and silicon transistors, *SPIE Newsroom*. 19 Nov. 2007. https://spie.org/news/0914-monolithic-integration-of-light-emitting-devices-and-silicon-transistors#_=_.
12. Donaev S. B., Umirzakov B. E., Tashmukhamedova D. A., Electronic structure of Ga_{1-x}Al_xAs nanostructures grown on the GaAs surface by ion implantation, *Tech. Phys.* 60 (10) (2015) 1563–1566.
13. Umirzakov B. E., Tashmukhamedova D. A., Muradkabilov D. M., Boltaev Kh. Kh., Electron spectroscopy of the nanostructures created in Si, GaAs, and CaF₂ surface layers using low-energy ion implantation, *Tech. Phys.* 58 (6) (2013) 841–844.
14. Shirinov G. M., Donaev S. B., Umirzakov B. Y., Loboda V. V., Emission, optical and electrical properties of GaInP/GaP nanofilms, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics.* 16 (2) (2023) 89–93.
15. Feifel M., Ohlmann J., Benick J., et al., MOVPE grown gallium phosphide-silicon heterojunction solar cells, *IEEE J. Photovolt.* 7 (2) (2017) 502–507.



16. **Garcia-Tabares E., Martin D., Garcia I., et al.**, Optimization of the silicon subcell for III-V on silicon multijunction solar cells: Key differences with conventional silicon technology, AIP Conf. Proc. 1477 (2012) 5–9.
17. **Connolly J. P., Mencaraglia D., Renard C., Bouchier D.**, Designing III-V multijunction solar cells on silicon, Prog. Photovolt. Res. Appl. 22 (7) (2014) 810–820.
18. **Boltaev X. X., Tashmuhamedova D. A., Donaev S. B., Umirzakov B. E.**, Influence of bombardment of ions Ar⁺ on property and structure of surface nanofilms CoSi₂/Si(111), Proc. of SIMS-2014, Munster, Germany; Sept. 7–9 (2014) 125.
19. **Kutliev U. O., Otabaev M. U., Karimov M. K., et al.**, Scattering of low-energy Ne⁺ ions from the stepped surface of InGaP(001) <110> at the small angles of incidence, Phys. Chem. Solid State. 24 (3) (2023) 542–548.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ДОНАЕВ Сардор Бурханович – доктор физико-математических наук, проректор по науке и инновациям Ташкентского государственного технического университета имени Ислама Каримова, г. Ташкент, Узбекистан.

100095, Узбекистан, г. Ташкент, Университетская ул., 2

sardor.donaev@gmail.com

ORCID: 0000-0001-5656-126X

ШИРИНОВ Ганжимурад Мамир угли – докторант кафедры общей физики Ташкентского государственного технического университета имени Ислама Каримова, г. Ташкент, Узбекистан.

100095, Узбекистан, г. Ташкент, Университетская ул., 2

ganjimurod777@gmail.com

ORCID: 0000-0002-7188-2560

УМИРЗАКОВ Балтоходжа Ерматович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики Ташкентского государственного технического университета имени Ислама Каримова, г. Ташкент, Узбекистан.

100095, Узбекистан, г. Ташкент, Университетская ул., 2

be.umirzakov@gmail.com

ORCID: 0000-0002-9815-2111

ЛОБОДА Вера Владимировна – кандидат физико-математических наук, директор Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

vera_loboda@mail.ru

ORCID: 0000-0003-3103-7060

THE AUTHORS

DONAEV Sardor B.

Tashkent State Technical University Named after Islam Karimov,
Karshi State University

2, Universitetskaya St., Tashkent, 100095, Uzbekistan

sardor.donaev@gmail.com

ORCID: 0000-0001-5656-126X

SHIRINOV Ganjimurod M. ugli

Tashkent State Technical University Named after Islam Karimov

2, Universitetskaya St., Tashkent, 100095, Uzbekistan

ganjimurod777@gmail.com

ORCID: 0000-0002-7188-2560

UMIRZAKOV Baltokhodja Y.

Tashkent State Technical University Named after Islam Karimov

2, Universitetskaya St., Tashkent, 100095, Uzbekistan

be.umirzakov@gmail.com

ORCID: 0000-0002-9815-2111

LOBODA Vera V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

vera_loboda@mail.ru

ORCID: 0000-0003-3103-7060

*Статья поступила в редакцию 19.02.2024. Одобрена после рецензирования 09.04.2024.
Принята 09.04.2024.*

Received 19.02.2024. Approved after reviewing 09.04.2024. Accepted 09.04.2024.

Механика

Научная статья

УДК 534-16

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17310>

АНАЛИЗ ТОЧНОСТИ КОРОТКОВОЛНОВЫХ И ДЛИННОВОЛНОВЫХ АСИМПТОТИК ДЛЯ СТАЦИОНАРНЫХ ВОЛН ЛЭМБА В ИЗОТРОПНОМ СЛОЕ

Я. К. Астапов, А. В. Лукин , И. А. Попов

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

 lukin_av@spbstu.ru

Аннотация. В работе анализируются точные и асимптотические приближенные решения для симметричных и антисимметричных волн Лэмба в однородном изотропном упругом слое. При помощи численного аппарата теории продолжения решений нелинейных уравнений вычислены дисперсионные кривые для волн с различной изменяемостью по толщине слоя. На основе полученных результатов исследован характер поля перемещений и изменчивость форм колебаний в зависимости от величины волнового числа. Проведен анализ асимптотической корректности балочных моделей Тимошенко, Бернулли – Эйлера как длинноволновых асимптотик волн Лэмба.

Ключевые слова: волны Лэмба, модель балки Бернулли – Эйлера, модель балки Тимошенко, теория бифуркации

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых (грант № МК-4577.2022.1.1).

Для цитирования: Астапов Я. К., Лукин А. В., Попов И. А. Анализ точности коротковолновых и длинноволновых асимптотик для стационарных волн Лэмба в изотропном слое // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 105–117. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17310>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17310>

AN ANALYSIS OF THE ACCURACY OF SHORT-WAVE AND LONG-WAVE ASYMPTOTICS FOR STATIONARY LAMB WAVES IN THE ISOTROPIC LAYER

Ya. K. Astapov, A. V. Lukin , I. A. Popov

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

 lukin_av@spbstu.ru

Abstract. In the paper, the exact and asymptotic approximate solutions for symmetric and antisymmetric Lamb waves in the homogeneous isotropic elastic film have been analyzed. Using the numerical methods of the theory of continuation of solutions of nonlinear equations, the dispersion curves were calculated for waves with different variability across the layer thickness. Based on the results obtained, the nature of the displacement field and the variability of oscillation forms depending on the wave number were studied. The asymptotic correctness of

the Timoshenko and Euler – Bernoulli beam models as long-wave asymptotics of Lamb waves was analyzed.

Keywords: Lamb waves, Euler – Bernoulli beam model, Timoshenko beam model, bifurcation theory

Funding: The research was supported by the Council on Grants of the President of the Russian Federation for state support of young scientists (Grant No. МК-4577.2022.1.1).

For citation: Astapov Ya. K., Lukin A. V., Popov I. A., An analysis of the accuracy of short-wave and long-wave asymptotics for stationary Lamb waves in the isotropic layer, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 105–117. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17310>

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

Введение

Согласно современным требованиям к устройствам теле- и радиокommunikаций нового поколения 5G, ожидается расширение диапазона частот, используемых для получения и передачи сигнала. Для этой цели рассматривается область сверхвысоких частот (СВЧ) (свыше 6 ГГц). Однако современные модели резонаторов, используемых для генерации и фильтрации сигналов, не способны работать при столь высоких частотах. Тем самым возникает необходимость в разработке новых моделей, обеспечивающих бесперебойную связь в задаваемом диапазоне. Среди многих типов упругих волн в твердых телах перспективными в решении данной проблемы являются волны Лэмба, генерируемые в тонком слое [1]. Исследования показывают, что определенные формы колебаний такого типа способны передавать СВЧ-сигнал с минимальными потерями [2 – 4]. Множество работ ежегодно публикуется на данную тему [5]. Проектирование акустоэлектронных преобразователей заданного частотного диапазона в условиях ограничений микросистемной технологии требует проведения многопараметрических расчетов по выбору оптимальной конфигурации резонатора: толщины слоя, межэлектродного расстояния во встречно-штыревом преобразователе, ориентации монокристалла и т. п. [6 – 9]. Кроме того, необходимо определять конкретные рабочие формы колебаний резонатора (индекс их изменчивости по направлению толщины слоя), обеспечивающие требуемые значения коэффициента электромеханической связи и при этом допускающие эффективное возбуждение электрическим полем. Решение подобных задач можно получить на основе совместного проведения как качественных аналитических оценок на упрощенных моделях, так и подробных численных расчетов на основе верифицированных методик.

Настоящая работа посвящена качественному исследованию стационарных упругих волн Лэмба в однородном упругом изотропном слое. Выполняется строгое аналитическое исследование дисперсионных кривых симметричных и антисимметричных волн Лэмба, их асимптотический анализ, а также прямое численное решение поставленной задачи и сравнение с известными моделями механики конструкций.

Используемая математическая модель

Рассматривается упругий изотропный однородный слой, расположенный вдоль оси x_1 по длине и вдоль оси x_3 по толщине. Слой считается бесконечно длинным и обладающим толщиной $2h$ ($-h \leq x_3 \leq h$). Задача рассматривается в плоско-деформированной постановке. Схема модели приведена на рис. 1.

Рассматривается система уравнений эластодинамики:

$$\mu \nabla^2 \mathbf{u} + (\lambda + \mu) \text{grad}(\text{div}(\mathbf{u})) = \rho \ddot{\mathbf{u}}, \quad (1)$$

где λ , μ – коэффициенты Ламе, ρ – плотность материала, \mathbf{u} – вектор поля перемещений.

Известно [10], что систему уравнений (1) путем представления

$$\mathbf{u} = \text{grad} \Phi + \text{rot} \psi \quad (2)$$

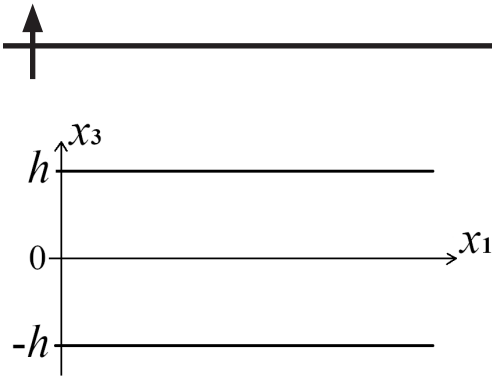


Рис. 1. Схема изотропного однородного тонкого слоя; $2h$ – его толщина

можно свести к системе волновых уравнений:

$$\square_1^2 \Phi = 0, \quad \square_1^2 \Psi = 0, \quad (3)$$

где $\square_\alpha^2 = (\partial^2 / \partial x_1^2 + \partial^2 / \partial x_3^2) - 1/c_\alpha^2 \cdot \partial^2 / \partial t^2$ – оператор Д'Аламбера ($\alpha = 1, 2$); c_1, c_2 – скорости волны дилатации и поперечной волны, соответственно; Φ, Ψ – функции потенциалов.

Решение системы уравнений (3) представимо в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Phi &= (A \sinh(v_1 x_3) + B \cosh(v_1 x_3)) e^{ik(x_1 - ct)}, \\ \Psi &= (C \sinh(v_2 x_3) + D \cosh(v_2 x_3)) e^{ik(x_1 - ct)}, \end{aligned} \quad (4)$$

где k – волновое число, $v_\alpha = \sqrt{k^2 - k_\alpha^2}$ ($k_\alpha = \omega/c_\alpha$, $\alpha = 1, 2$, ω – частота), c – фазовая скорость.

Граничные условия диктуются отсутствием напряжений на гранях пластины:

$$\sigma_{13}(x_1, \pm h, t) = 0, \quad \sigma_{33}(x_1, \pm h, t) = 0. \quad (5)$$

Применив к решению (4) граничные условия (5), получим:

$$\begin{cases} 2i\beta_1 [\cosh(v_1 h)A + \sinh(v_1 h)B] - (1 + \beta_2^2) [\sinh(v_2 h)C + \cosh(v_2 h)D] = 0, \\ 2i\beta_1 [\cosh(v_1 h)A - \sinh(v_1 h)B] + (1 + \beta_2^2) [\sinh(v_2 h)C - \cosh(v_2 h)D] = 0, \\ [(\lambda + 2\mu)\beta_1^2 - \lambda] [\sinh(v_1 h)A + \cosh(v_1 h)B] + 2i\mu\beta_2 [\cosh(v_2 h)C + \sinh(v_2 h)D] = 0, \\ [(\lambda + 2\mu)\beta_1^2 - \lambda] [-\sinh(v_1 h)A + \cosh(v_1 h)B] + 2i\mu\beta_2 [\cosh(v_2 h)C - \sinh(v_2 h)D] = 0. \end{cases} \quad (6)$$

Здесь введено обозначение $\beta_\alpha = v_\alpha/k$, ($\alpha = 1, 2$).

Решением данной системы алгебраических уравнений является семейство дисперсионных кривых для волн Лэмба.

Симметричные волны

Рассмотрим частный случай симметричной волны. Волна называется симметричной, когда частицы среды совершают симметричные горизонтальные и антисимметричные вертикальные движения относительно средней линии сечения. Тем самым вертикальные перемещения в верхней и нижней полуобластях направлены в противоположные стороны и средняя линия сечения ($x_3 = 0$) остается недеформированной. Симметричные волны принято обозначать как S_0, S_1, S_2, \dots .

Тогда решение (4) примет вид:

$$\begin{aligned} \Phi &= B \cosh(v_1 x_3) e^{ik(x_1 - ct)}, \\ \Psi &= C \sinh(v_2 x_3) e^{ik(x_1 - ct)}. \end{aligned} \quad (7)$$

Система (6) упростится и примет вид

$$\begin{cases} 2i\beta_1 \sinh(v_1 h)B - (1 + \beta_2^2) \sinh(v_2 h)C = 0, \\ [(\lambda + 2\mu)\beta_1^2 - \lambda] \cosh(v_1 h)B + 2i\mu\beta_2 \cosh(v_2 h)C = 0. \end{cases} \quad (8)$$

Из условия существования нетривиального решения системы (8) получим трансцендентное уравнение вида

$$\frac{\tanh(v_1 h)}{\tanh(v_2 h)} = \frac{(1 + \beta_2^2)^2}{4\beta_1\beta_2}. \quad (9)$$

Данное уравнение приобретет безразмерный вид

$$\frac{\tanh(\tilde{k}\sqrt{1 - \delta^2\tilde{c}^2})}{\tanh(\tilde{k}\sqrt{1 - \tilde{c}^2})} = \frac{(2 - \tilde{c}^2)^2}{4\sqrt{1 - \delta^2\tilde{c}^2}\sqrt{1 - \tilde{c}^2}}, \quad (10)$$

если ввести следующие обозначения:

$$\tilde{k} = kh, \quad \tilde{c} = \frac{c}{c_2}, \quad \tilde{\omega} = \tilde{k} \cdot \tilde{c} = \frac{khc}{c_2}, \quad \delta = \frac{c_2}{c_1}. \quad (11)$$

Уравнение (10) является трансцендентным относительно безразмерной фазовой скорости волны и волнового числа. Для уравнения (10) известны предельные случаи [11].

Рассмотрим первый предельный случай, когда длина бегущей волны значительно больше толщины пластины, т. е. $\lambda_\omega = 2\pi/k \gg 2h$. Тогда гиперболические тангенсы уравнения (10) заменяются их аргументами. Преобразовав уравнение (10), получим:

$$4(1 - \delta^2 \tilde{c}^2) = 2 - \tilde{c}^2, \\ \tilde{c} = 2\sqrt{1 - \delta^2}.$$

Пусть $\mu = \lambda$ (т. е. коэффициент Пуассона $\nu = 1/4$). Тогда можно утверждать, что $\delta^2 = 1/3$. В результате получим предельное значение безразмерной фазовой скорости:

$$\tilde{c} = \tilde{c}_p = 2\sqrt{2/3} \approx 1,633... \quad (12)$$

Рассмотрим второй предельный случай, при котором длина волны гораздо меньше толщины, т. е. $\lambda_\omega = 2\pi/k \ll 2h$; тогда отношение тангенсов можно считать равным единице. Результат преобразования уравнения (10) будет следующий:

$$(2 - \tilde{c}^2)^2 = 4\sqrt{1 - \delta^2 \tilde{c}^2} \sqrt{1 - \tilde{c}^2}. \quad (13)$$

Данное равенство является характеристическим уравнением поверхностных волн Рэлея [10]. При $\delta^2 = 1/3$ значение фазовой скорости составит

$$\tilde{c} = \tilde{c}_R \approx 0,9194... \quad (14)$$

Решение трансцендентного уравнения (10) было получено при помощи численного аппарата теории продолжения решений нелинейных уравнений [11]. На рис. 2 представлены дисперсионные кривые и зависимости значения фазовой скорости от волнового числа для первых трех ветвей волнового решения при различных значениях коэффициента Пуассона.

Из рис. 2, *b* следует корректность обеих асимптотических оценок (длинноволновой и коротковолновой).

Для полученных результатов были построены поля перемещений в слое. Их вид был получен путем подстановки решения (7) в уравнение (2). На рис. 3 представлены поля перемещений первых трех форм при различных значениях волнового числа: *a*, *d*, *g* –

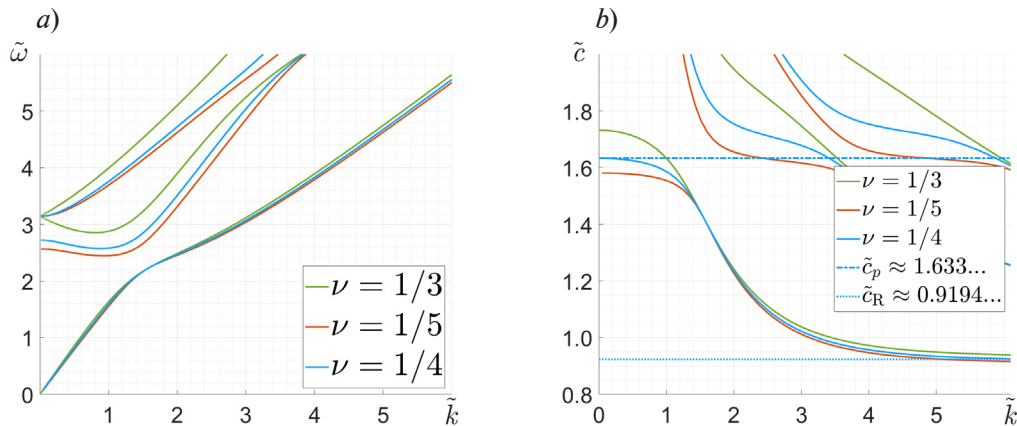


Рис. 2. Графики решения уравнения (10): *a* – дисперсионные кривые симметричных волн Лэмба; *b* – зависимости фазовой скорости от волнового числа



вблизи длинноволнового приближения ($\tilde{k}=1$); b, e, h – произвольное значение ($\tilde{k}=2$); c, f, i – вблизи коротковолнового приближения ($\tilde{k}=6$). Поля перемещений построены для сегмента бесконечно длинной пластинки (см. рис. 1); его сегмент $\lambda_\omega = 2\pi/k$ соответствует одному периоду колебания волны. Эта величина отложена по оси абсцисс, толщина пластинки – по оси ординат.

Цветовой гаммой обозначены вертикальные перемещения u_3 , горизонтальные перемещения u_1 визуализированы при помощи сетки.

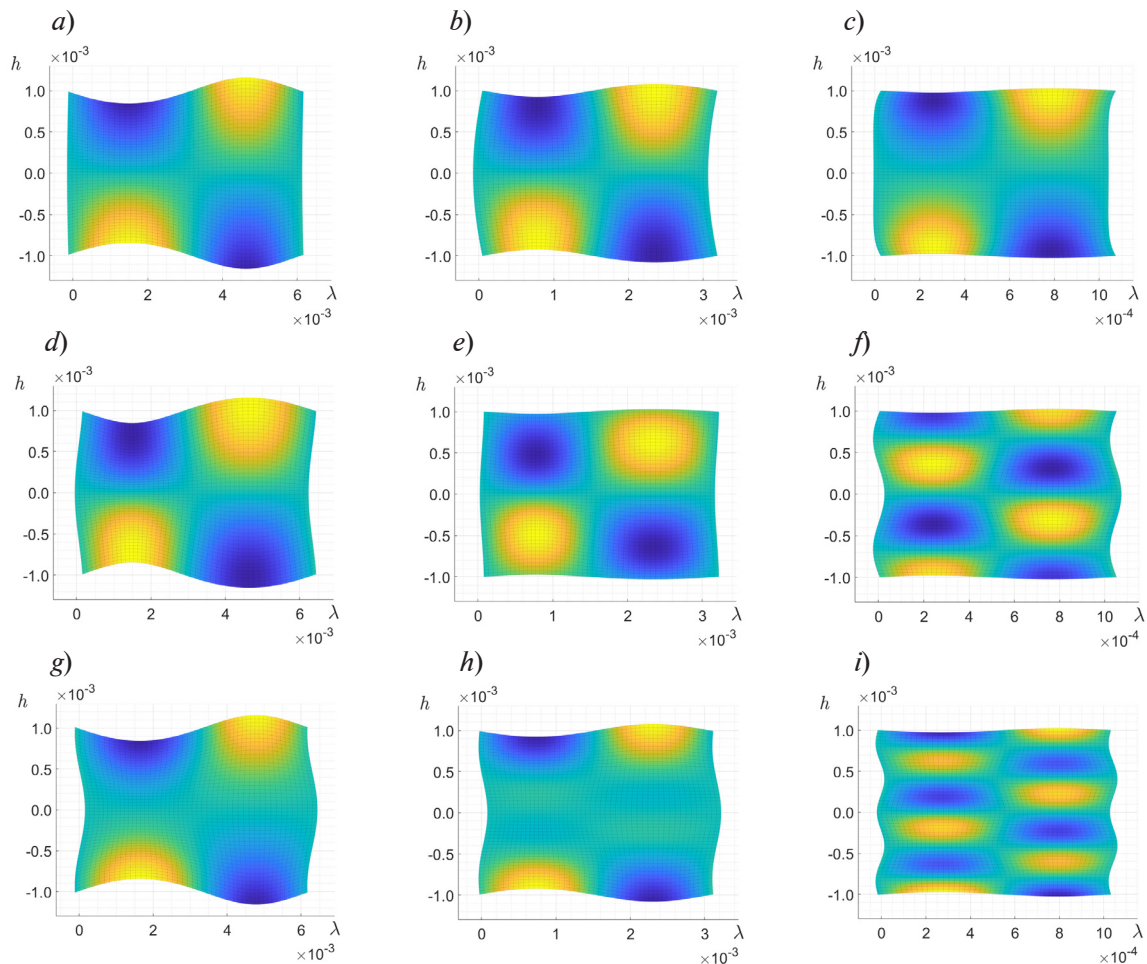


Рис. 3. Поля перемещений первых трех форм ($S0, S1, S2$) симметричных волн при различных значениях волнового числа \tilde{k} : a, b, c – форма $S0$; d, e, f – форма $S1$; g, h, i – форма $S2$

Анализ рисунков позволяет заключить, что при увеличении значения волнового числа в слое возрастает число неподвижных узлов. Стоит отметить, что материальная точка за период колебания описывает эллиптическую траекторию [12] и при увеличении значения волнового числа форма колебаний пластинки видоизменяется неочевидным образом. Отсюда возникает задача исследования изменчивости формы волны при варьировании значения волнового числа. Результаты для первых трех форм симметричных волн представлены на рис. 4.

На рис. 4, b видно, что характер поля перемещений u_3 остается практически неизменным при вариации значения волнового числа: наблюдаются средняя линия, перемещения на которой отсутствуют, а также верхняя и нижняя полуобласти пластины, совершающие противофазные перемещения вдоль оси x_3 . В то же время форма перемещений u_1 изменяется: изначально наблюдаются строго продольные колебания в горизонтальном направлении, но при достижении значения волнового числа \tilde{k} , близкого к 1,75, возникает новый узел, так что в сечении наблюдаются противофазные колебания в горизонтальном направлении. Также хорошо видно, что выполняется условие коротковолнового

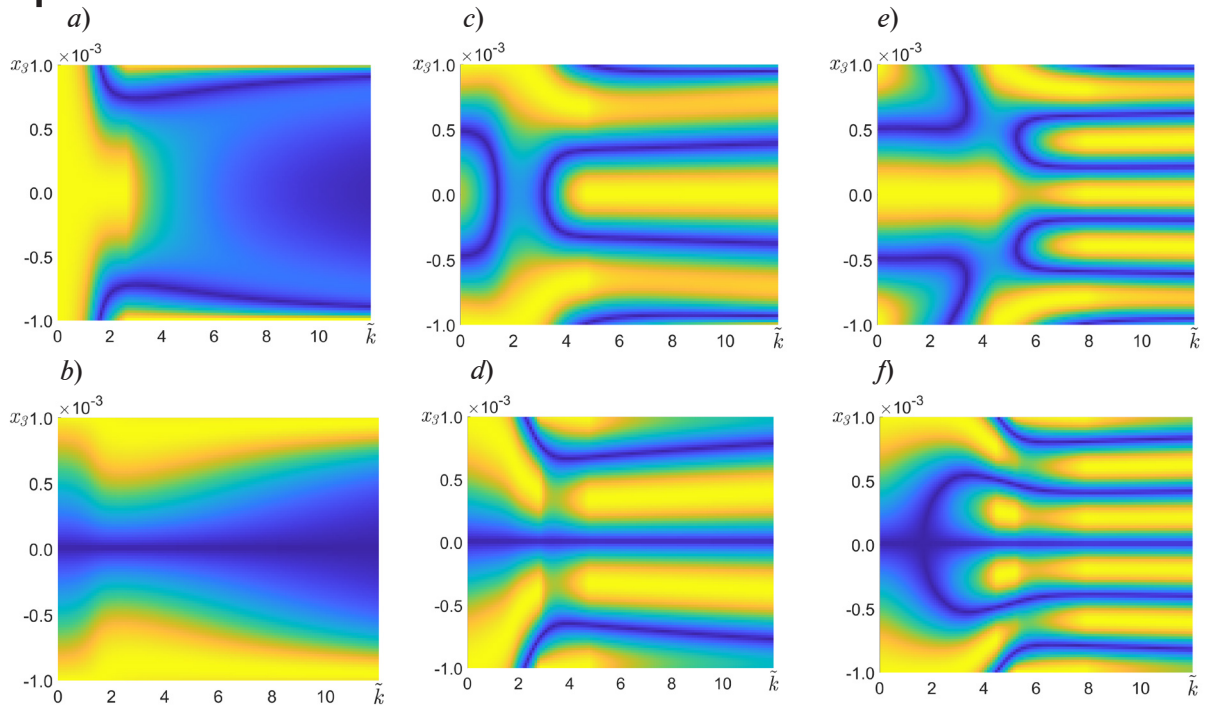


Рис. 4. Зависимости полей перемещений u_1 (a, c, e) и u_3 (b, d, f) трех ветвей решений (S_0, S_1, S_2) симметричной волны от волнового числа; a, b – ветвь S_0 ; c, d – ветвь S_1 ; e, f – ветвь S_2

приближения, а именно – с увеличением волнового числа наблюдается сильное затухание колебаний вглубь слоя. Для второй (см. рис. 4, c, d) и третьей (рис. 4, e, f) форм колебаний происходит сильное изменение форм в длинноволновом режиме. Наряду с этим наблюдается сохранение формы при значении волнового числа $\tilde{k} > 6$.

Антисимметричные волны

Рассмотрим случай антисимметричных волн. Волна называется антисимметричной, когда частицы среды совершают антисимметричные горизонтальные и симметричные вертикальные движения относительно средней линии сечения. При этом вертикальные колебания полуобластей происходят в одном направлении, и средняя линия деформируется. Решение (4) принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \Phi &= A \sinh(v_1 x_3) e^{ik(x_1 - ct)}, \\ \psi &= D \cosh(v_2 x_3) e^{ik(x_1 - ct)}. \end{aligned} \quad (15)$$

Для полученных решений (15) система уравнений (8) примет вид

$$\begin{cases} 2i\beta_1 \cosh(v_1 h) A - (1 + \beta_2^2) \cosh(v_2 h) D = 0, \\ [(\lambda + 2\mu)\beta_1^2 - \lambda] \sinh(v_1 h) A + 2i\mu\beta_2 \sinh(v_2 h) D = 0. \end{cases} \quad (16)$$

Если взять определитель системы (16) и провести обезразмеривание (11), то получим следующее трансцендентное уравнение:

$$\frac{\tanh(v_1 h)}{\tanh(v_2 h)} = \frac{4\beta_1\beta_2}{(1 + \beta_2^2)^2}. \quad (17)$$

Рассмотрим предельные случаи для уравнения (17). Пусть длина волны значительно превышает толщину слоя и выполняется неравенство $\tilde{c} < 1 < 1/\delta$. После всех преобразований (в соответствии с представленными в работе [10]) трансцендентное уравнение примет следующий вид:

$$\tilde{c}^2 = \frac{4}{3} \tilde{k}^2 (1 - \delta^2). \quad (18)$$

Пусть $\mu = \lambda$ (т. е. $\nu = 1/4$); тогда $\delta^2 = 1/3$, откуда следует, что

$$\tilde{c}_p = \frac{2\sqrt{2}}{3} \tilde{k}. \quad (19)$$

Таким образом, из уравнения (19) получаем линейную асимптоту для длинноволнового приближения.

Рассмотрим другой предельный случай, при котором длина волны гораздо меньше толщины пластины и выполняется неравенство $\tilde{c} < 1 < 1/\delta$. Преобразовав уравнение (17), вновь приходим к характеристическому уравнению поверхностных волн Рэлея (13), (14). Для случая $\tilde{c} > 1$ фазовая скорость стремится к 1.

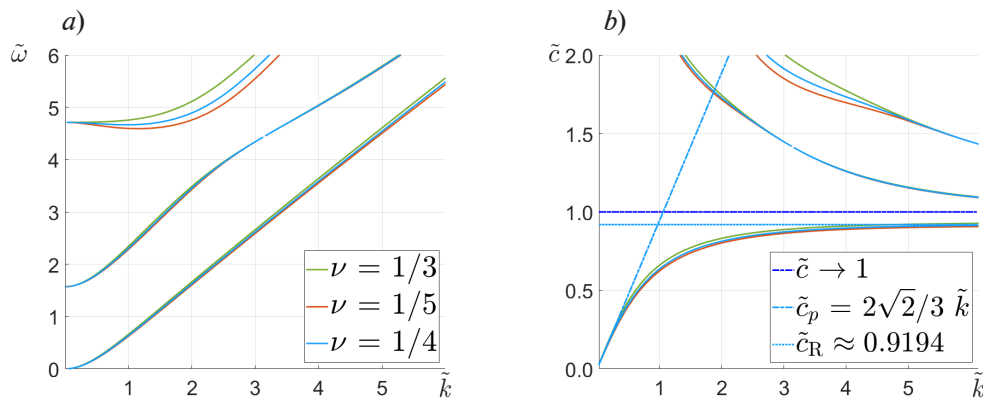


Рис. 5. Графики решения уравнения (17): *a* – дисперсионные кривые антисимметричных волн Лэмба; *b* – зависимости фазовой скорости от волнового числа

На рис. 5 приведены дисперсионные кривые антисимметричных колебаний и зависимости фазовой скорости от волнового числа. Видно (см. рис. 5, *b*), что полученные результаты для первой ветви антисимметричных волн удовлетворяют обоим приближениям. Предполагается [10], что для остальных форм значение фазовой скорости в случае коротковолнового приближения будет стремиться к единице.

Как и для симметричных колебаний, были построены поля перемещений антисимметричных колебаний (рис. 6).

Как видно на рис. 6, *a*, первая форма антисимметричных колебаний напоминает изгибные колебания балки. Также, аналогично симметричному случаю, наблюдается изменение формы колебаний при увеличении волнового числа. Исходя из этого, мы проанализировали изменчивость формы колебаний при варьировании значения волнового числа (рис. 7).

На рис. 7, *b* отчетливо видно, как с увеличением волнового числа амплитуда колебаний резко затухает вглубь слоя, что соответствует коротковолновому приближению. Видно, кроме того, что при малых значениях параметра \tilde{k} колебания совершаются всем сечением, тогда как в коротковолновом случае колебания возникают в верхней и нижней прослойках пластины, фактически не взаимодействуя друг с другом [13]. Такой эффект объясняется типом волны, поскольку при больших значениях волнового числа (как было указано выше) волна становится подобной по своему характеру поверхностной волне Рэлея, для которой свойственно резкое затухание вглубь полупространства [10]. Помимо этого, наблюдается интересный эффект разветвления узловой кривой на рис. 7, *a*. Можно заметить, что разветвление происходит при тех же значениях волнового числа, при которых происходит упомянутое разделение антисимметричной волны на две составляющие, которые формируются в верхней и нижних полуобластях пластины. Исходя из этих соображений, можно ожидать, что аналогичных разветвлений более наблюдаться не будет при дальнейшем увеличении волнового числа: наоборот, будет проявляться полное затухание колебаний вглубь материала.

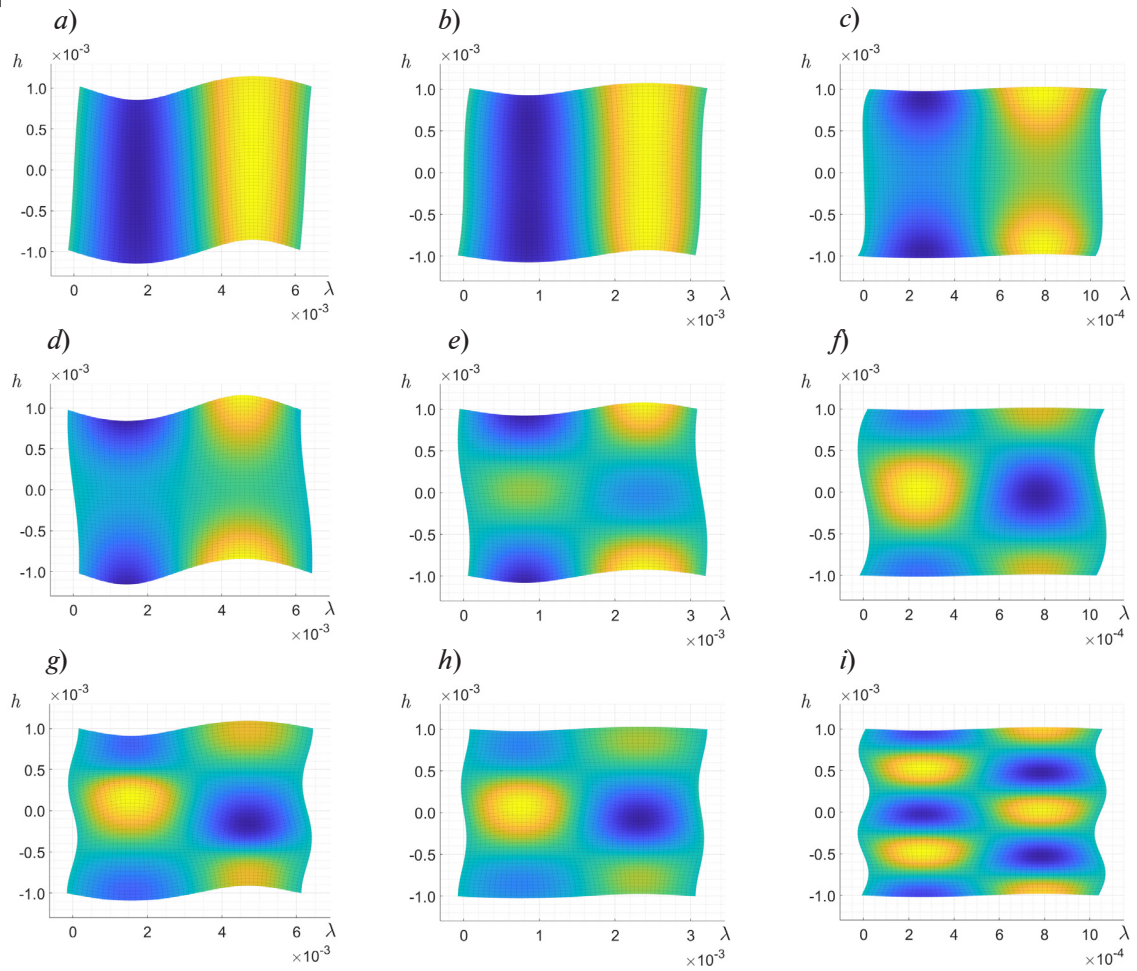


Рис. 6. Поля перемещений первых трех форм (A_0 , A_1 , A_2) антисимметричных волн при различных значениях волнового числа \tilde{k} :
 a, b, c – форма A_0 ; d, e, f – форма A_1 ; g, h, i – форма A_2

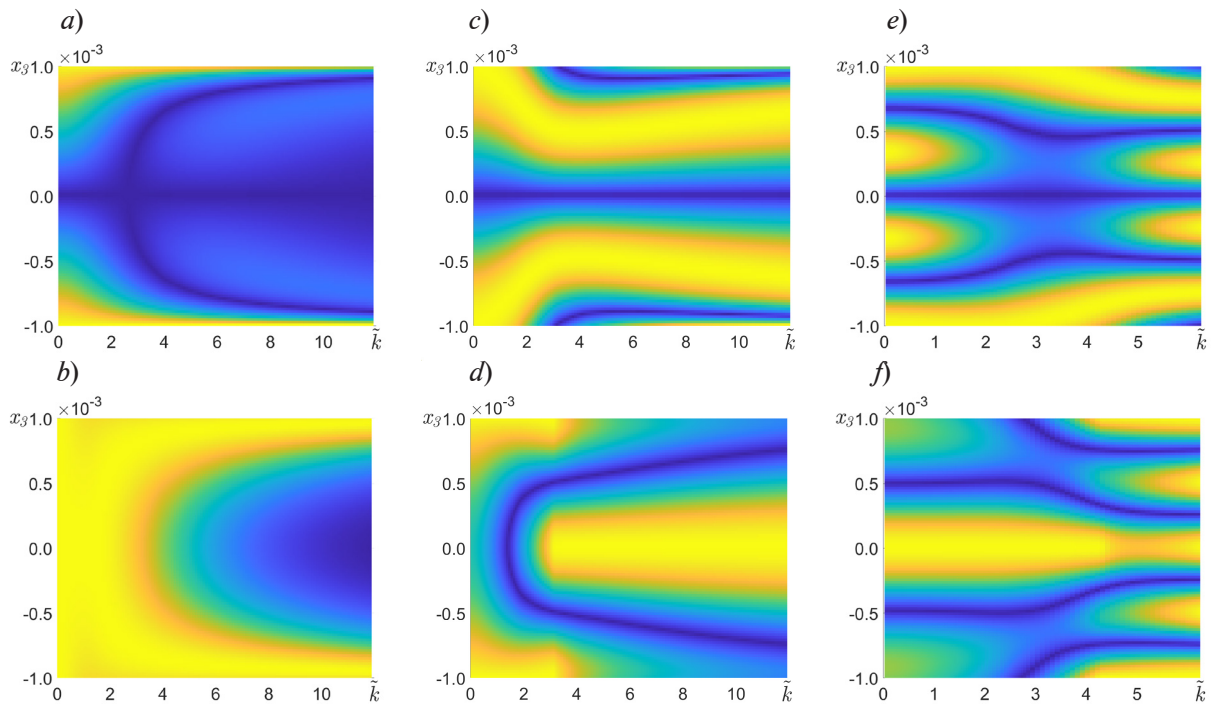


Рис. 7. Зависимости полей перемещений u_1 (a, c, e) и u_3 (b, d, f) трех ветвей решений (A_0 , A_1 , A_2) антисимметричной волны от волнового числа;
 a, b – ветвь A_0 ; c, d – ветвь A_1 ; e, f – ветвь A_2

Анализ асимптотической корректности балочных моделей

Как было отмечено выше, длинноволновое приближение первой формы колебаний антисимметричной волны по своей форме напоминает поперечные колебания балки. В инженерной практике распространены и хорошо изучены две модели изгибных колебаний балки: балка Бернулли – Эйлера и балка Тимошенко. Исходя из данного замечания, целесообразно сравнить полученные результаты с дисперсионными соотношениями для указанных моделей.

Известно [12], что для модели балки Бернулли – Эйлера задача в случае шарнирного опирания определяется системой:

$$\begin{cases} EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \frac{\rho}{A} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0 \quad (0 < x < l), \\ w(x, t) = 0, \quad \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = 0 \quad (x = 0, l), \\ w(x, 0) = W(x), \end{cases} \quad (20)$$

где w – вертикальные перемещения, E – модуль Юнга, I – момент инерции сечения, A – площадь сечения, $W(x)$ – начальные распределения перемещения, ρ – поверхностная плотность, l – длина балки.

Решение системы (20) можно представить в виде бесконечной суммы бегущих волн:

$$w(x, t) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} A_n \left[\sin\left(\frac{n\pi}{l}x - \omega_n t\right) + \sin\left(\frac{n\pi}{l}x + \omega_n t\right) \right], \quad (21)$$

где частота ω_n определяется выражением

$$\omega_n = (n\pi/l)^2 \sqrt{EI/\rho A}.$$

Длина волны при этом составляет $\lambda_n = 2l/n$. Таким образом, фазовая скорость выражается как

$$c_n = \frac{\omega_n \lambda_n}{2\pi} = n\pi \sqrt{\frac{EI}{\rho A l^2}}. \quad (22)$$

Для модели балки Тимошенко система имеет вид:

$$\begin{cases} EI \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k'AG \left(\frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right) - \rho I \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0, \\ k'AG \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0, \\ w(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) = 0, \quad (x = 0, l), \end{cases} \quad (23)$$

где ψ – изгибное вращение, $k' = 5/6$ – поправочный коэффициент для прямоугольного сечения, G – модуль сдвига.

Из системы (23) следует выражение для спектра собственных частот:

$$\tilde{\omega}_n^2 = \frac{(\eta^2 + \alpha^2)n^2\pi^2 + 1 \pm \sqrt{[(\eta^2 + \alpha^2)n^2\pi^2 + 1]^2 - 2\eta^2\alpha^2 n^4 \pi^4}}{2\eta^2\alpha^2}, \quad (24)$$

где $\tilde{\omega}_n$ – безразмерная частота, $\tilde{\omega}_n^2 = \omega^2(\rho A l^4)/(EI)$; η – безразмерный параметр, выражающий соотношение между изгибной и сдвиговой жесткостями, $\eta^2 = (EI)/(k'AGl^2)$; α – безразмерный параметр, выражающий соотношение между силами инерции сечения на поворот и на поперечное смещение, $\alpha^2 = I/(Al^2)$.

Уравнение (24) дает две ветви решений для изгибных ($\tilde{\omega}_{n,1}$) и сдвиговых ($\tilde{\omega}_{n,2}$) колебаний.

Представляло интерес построить конечно-элементные (КЭ) модели балок Бернулли – Эйлера и Тимошенко. Построение было выполнено в среде COMSOL Multiphysics. С целью сравнения на рис. 8 приведены результаты аналитического и КЭ-моделирования балки Бернулли – Эйлера и балки Тимошенко, а также ранее представленные результаты расчетов по модели упругих волн Лэмба в тонком слое.

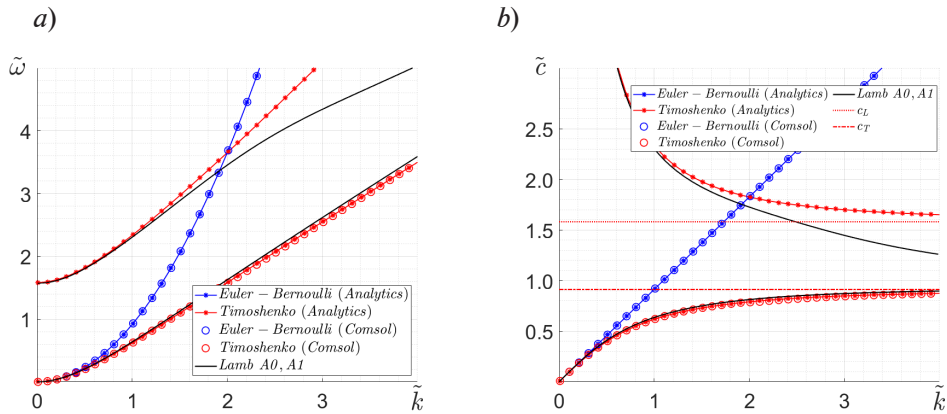


Рис. 8. Сравнение расчетных результатов для трех моделей: балки Бернулли – Эйлера, балки Тимошенко и упругих волн Лэмба: *a* – дисперсионные кривые, *b* – зависимости фазовой скорости от волнового числа

Анализ данных рис. 8 показывает, что нижняя ветвь решения для модели балки Тимошенко совпадает с первой ветвью волнового решения антисимметричных волн Лэмба. При этом стоит отметить, что данное совпадение не является закономерностью. Как отмечено выше, фазовая скорость нижней ветви решения волн Лэмба при коротковолновом приближении стремится к фазовой скорости поверхностных волн Рэлея c_R , которая, в свою очередь, зависит от значения коэффициента Пуассона (14). В то же время фазовая скорость волны для модели балки Тимошенко при увеличении волнового числа стремится к значению скорости поперечных колебаний $c_T = \sqrt{k'G/\rho}$. В безразмерном виде данные асимптотики являются результатом взятия квадратного корня от поправочного коэффициента k' .

Ранее было указано, что значение поправочного коэффициента задается как $k' = 5/6$, что было предложено Э. Рейсснером. Иным, часто используемым значением поправочного коэффициента, является предложение Р. Миндлина: $k' = \pi^2 / 12$. В работе П. А. Жилина [14] им было предложено следующее определение:

$$k' = \frac{5}{6 - \nu}, \quad (25)$$

оно было получено в ходе решения частотного уравнения колебания пластины с точностью до второго поправочного слагаемого.

На рис. 9 приведено сравнение безразмерных предельных значений фазовых скоростей поверхностных волн Рэлея c_R и поперечных колебаний c_T при различных значениях коэффициента Пуассона ν и поправочного коэффициента k' . Видно, что представленные предложения не совпадают с исследуемой моделью поверхностных волн Рэлея. При этом

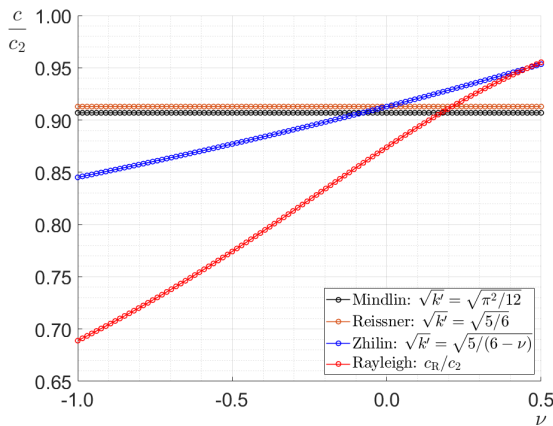


Рис. 9. Сравнение зависимостей предельных фазовых скоростей от коэффициента Пуассона



можно выделить определенные значения коэффициента Пуассона, при которых асимптотики совпадают.

Исходя из этого, можно сделать вывод, что совпадение характеристик упругих волн Лэмба и волн в балке Тимошенко наблюдается только при длинноволновом приближении, а при значении безразмерного волнового числа $\tilde{k} = k \cdot h \approx 1$ наблюдается расхождение результатов.

Заключение

Выполнено качественное аналитическое исследование стационарных волн Лэмба в тонком однородном изотропном слое. В соответствии с полученными решениями были построены дисперсионные кривые и зависимости фазовой скорости от волнового числа для симметричных и антисимметричных волн. Вычислены поля перемещений и видоизменения формы колебаний первой ветви волнового решения при варьировании значения волнового числа. Проведено сравнение характеристик антисимметричных волн Лэмба с волновыми характеристиками балок Бернулли – Эйлера и Тимошенко. Полученные результаты обеспечили конкретное представление о точности длинноволновых и коротковолновых асимптотических приближений для симметричных и антисимметричных волн Лэмба, в том числе приближений, основанных на применении балочных моделей механики конструкций.

Полученные результаты могут служить основой для верификации численных методов волновой механики, применяемых при моделировании волновых процессов в акустоэлектронных устройствах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lu R., Gong S. RF acoustic microsystems based on suspended lithium niobate thin films: Advances and outlook // Journal of Micromechanics and Microengineering. 2021. Vol. 31. No. 11. P. 114001.
2. Yang Y., Lu R., Gao L., Gong S. 10–60-GHz Electromechanical resonators using thin-film lithium niobate // IEEE Transaction on Microwave Theory and Techniques. 2020. Vol. 68. No. 12. Pp. 5211–5220.
3. Yang Y., Lu R., Gong S. Scaling acoustic filters towards 5G // Proceedings of the 2018 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). San Francisco, CA, USA. 01–05 December, 2018. Pp. 39.6.1–39.6.4.
4. Yang Y., Gao L., Gong S. X-band miniature filters using lithium niobate acoustic resonators and bandwidth widening technique // IEEE Transaction on Microwave Theory and Techniques. 2021. Vol. 69. No. 3. Pp. 1602–1610.
5. Wu J., Zhang Sh., Zhang L., Zhou H., Zheng P., Yao H., Li Zh., Huang K., Wu T., Ou X. Exploring low-loss surface acoustic wave devices on heterogeneous substrates // IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. 2022. Vol. 69. No. 8. Pp. 2579–2584.
6. Naumenko N. F. Optimal orientations of LiTaO₃ for application in plate mode resonators // Journal of Applied Physics. 2015. Vol. 118. No. 3. P. 034505.
7. Naumenko N. F. Laterally excited bulk acoustic resonators (XBARs): Optimization method and application to resonators on LiTaO₃ // Proceedings of the 2022 IEEE MTT-S International Conference on Microwave Acoustics and Mechanics (IC-MAM). 18 – 20 July 2022, Munich, Germany. 2022. Pp. 70–73.
8. Naumenko N. F. Advanced numerical technique for analysis of surface and bulk acoustic waves in resonators using periodic metal gratings // Journal of Applied Physics. 2014. Vol. 116. No. 10. P. 104503.
9. Naumenko N. F. Temperature behavior of SAW resonators based on LiNbO₃/Quartz and LiTaO₃/Quartz substrates // IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. 2021. Vol. 68. No. 11. Pp. 3430–3437.
10. Новацкий В. Теория упругости. Пер. с польского. М.: Мир, 1975. 872 с.
11. Govaerts W., Kuznetsov Yu. A., Meijer H. G. E., Al-Hdaibat B., de Witte V., Dhooge A., Mestrom W., Neiryneck N., Riet A. M., Sautios B. MATCONT: Continuation toolbox for ODEs in Matlab. Utrecht (The Netherlands): Utrecht University, 2019. 124 p.

12. **Gérardin, M., Rixen D. J.** Mechanical vibrations: theory and application to structural dynamics. 3-rd edition. Chichester (West Sussex, UK): John Willey and Sons, 2015. 598 p.
13. **Бирюков С. В., Гуляев Ю. В., Крылов В. В., Плесский В. П.** Поверхностные акустические волны в неоднородных средах. М.: Наука. Гл. редакция физ.-мат. лит.-ры, 1991. 416 с.
14. **Жилин П. А.** Прикладная механика: Основы теории оболочек. СПб.: Издательство Политехнического университета, 2006.

REFERENCES

1. **Lu R., Gong S.**, RF acoustic microsystems based on suspended lithium niobate thin films: Advances and outlook, *J. Micromech. Microeng.* 31 (11) (2021) 114001.
2. **Yang Y., Lu R., Gao L., Gong S.**, 10–60-GHz Electromechanical resonators using thin-film lithium niobate, *IEEE Trans. Microw. Theory Techn.* 68 (12) (2020) 5211–5220.
3. **Yang Y., Lu R., Gong S.**, Scaling acoustic filters towards 5G, *Proc. 2018 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 01–05 Dec., San Francisco, CA, USA (2018) 39.6.1–39.6.4.
4. **Yang Y., Gao L., Gong S.**, X-band miniature filters using lithium niobate acoustic resonators and bandwidth widening technique, *IEEE Trans. Microw. Theory Techn.* 69 (3) (2021) 1602–1610.
5. **Wu J., Zhang Sh., Zhang L., et al.**, Exploring low-loss surface acoustic wave devices on heterogeneous substrates, *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control.* 69 (8) (2022) 2579–2584.
6. **Naumenko N. F.**, Optimal orientations of LiTaO₃ for application in plate mode resonators, *J. Appl. Phys.* 118 (3) (2015) 034505.
7. **Naumenko N. F.**, Laterally excited bulk acoustic resonators (XBARs): Optimization method and application to resonators on LiTaO₃, *Proc. 2022 IEEE MTT-S Int. Conf. Microwave Acoustics and Mechanics (IC-MAM)*. 18–20 July 2022, Munich, Germany (2022) 70–73.
8. **Naumenko N. F.**, Advanced numerical technique for analysis of surface and bulk acoustic waves in resonators using periodic metal gratings, *J. Appl. Phys.* 116 (10) (2014) 104503.
9. **Naumenko N. F.**, Temperature behavior of SAW resonators based on LiNbO₃/Quartz and LiTaO₃/Quartz substrates, *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control.* 68 (11) (2021) 3430–3437.
10. **Novatski V.**, *Teoriya uprugosti [Elasticity theory]*, Mir Publishing, Moscow, 1975 (in Russian).
11. **Govaerts W., Kuznetsov Yu. A., Meijer H.G.E., et al.**, *MATCONT: Continuation toolbox for ODEs in Matlab*, Utrecht University, Utrecht (The Netherlands), 2019.
12. **Gérardin, M., Rixen D. J.**, Mechanical vibrations: Theory and application to structural dynamics. 3-rd Ed., John Willey and Sons, Chichester (West Sussex, UK), 2015.
13. **Biryukov S. V., Gulyaev Yu. V., Krylov V. V., Plessky V. P.**, Surface acoustic waves in inhomogeneous media (*Springer Series on Wave Phenomena, Vol. 20*), Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1995.
14. **Zhilin P. A.**, *Prikladnaya Mehanika: Osnovy teorii obolochek [Applied Mechanics: Basics of shell theory]*, Polytechnic University Publishing, Saint-Petersburg, 2006 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АСТАПОВ Ярослав Константинович – студент Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

astapov.yaroslav.00@mail.ru

ORCID: 0009-0008-0216-462X

ЛУКИН Алексей Вячеславович – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы механики и процессов управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

lukin_av@spbstu.ru

ORCID: 0000-0003-2016-8612



ПОПОВ Иван Алексеевич – ведущий инженер Высшей школы механики и процессов управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
popov_ia@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-4425-9172

THE AUTHORS

ASTAPOV Yaroslav K.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
astapov.yaroslav.00@mail.ru
ORCID: 0009-0008-0216-462X

LUKIN Aleksey V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
lukin_av@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-2016-8612

ПОПОВ Иван А.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
popov_ia@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-4425-9172

*Статья поступила в редакцию 31.01.2024. Одобрена после рецензирования 22.04.2024.
Принята 22.04.2024.*

Received 31.01.2024. Approved after reviewing 22.04.2024. Accepted 22.04.2024.

Научная статья

УДК 532.5.032

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17311>

АСИМПТОТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ СТОКСА ДЛЯ ПЛОСКОГО КОНТУРА

Е. Н. Афанасов¹ ✉, С. Г. Кадыров², В. Н. Сорокин²

¹ ООО «Эволюция морских цифровых технологий», Санкт-Петербург, Россия;

² Санкт-Петербургский государственный морской технический университет,
Санкт-Петербург, Россия

✉ zhenya.afanasov@yandex.ru

Аннотация. В работе излагаются асимптотические методы решения задачи о малых гармонических колебаниях плоского контура, погруженного в несжимаемую вязкую жидкость. В случае больших значений безразмерного параметра вязкости получены асимптотические формулы вплоть до третьего порядка. В случае малых значений этого параметра вязкости построен главный член асимптотики гидродинамической силы на произвольном гладком контуре и доказано, что его вид не зависит от формы контура. Полученные результаты подтверждены примером задачи о колебаниях эллиптического цилиндра.

Ключевые слова: задача Стокса, вязкая несжимаемая жидкость, колебания твердого тела, эллиптический цилиндр

Для цитирования: Афанасов Е. Н., Кадыров С. Г., Сорокин В. Н. Асимптотические методы решения задачи Стокса для плоского контура // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 118–133. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17311>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17311>

ASYMPTOTIC METHODS FOR SOLVING THE STOKES PROBLEM FOR A FLAT CONTOUR

E. N. Afanasov¹ ✉, S. G. Kadyrov², V. N. Sorokin²

¹ LLC "Evolution Marine Digital", St. Petersburg, Russia;

² State Marine Technical University, St. Petersburg, Russia

✉ zhenya.afanasov@yandex.ru

Abstract. The paper presents asymptotic methods for solving the problem of small harmonic oscillations of a flat contour immersed in an incompressible viscous liquid. In the case of large values of the dimensionless viscosity parameter, asymptotic approximations up to the third order have been obtained. In the case of small values of this viscosity parameter, the main term of the asymptotic of the hydrodynamic force on an arbitrary smooth contour was constructed and its form was proved not to depend on the shape of the contour. The results obtained were confirmed by an example of the problem of oscillations of an elliptical cylinder.

Keywords: Stokes problem, viscous incompressible fluid, solid body vibrations, elliptical cylinder

For citation: Afanasov E. N., Kadyrov S. G., Sorokin V. N., Asymptotic methods for solving the Stokes problem for a flat contour, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 118–133. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17311>

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

Введение

Теоретическая модель консольной балки произвольного поперечного сечения (рис. 1), которая возбуждается произвольной движущей силой и погружена в вязкую жидкость, является основной при создании и проектировании приборов в нанотехнологиях и в технике измерений вязкости. Жидкость, как правило, предполагается несжимаемой, длина балки значительно превышает ее другие размеры. Формулировка для поперечного сечения общего вида приводит к понятию гидродинамической функции [1 – 3], которая описывает гидродинамическую нагрузку и учитывает геометрию поперечного сечения балки. В зависимости от поперечного сечения балки эта гидродинамическая функция должна быть рассчитана численно или (что желательнее) аналитически.

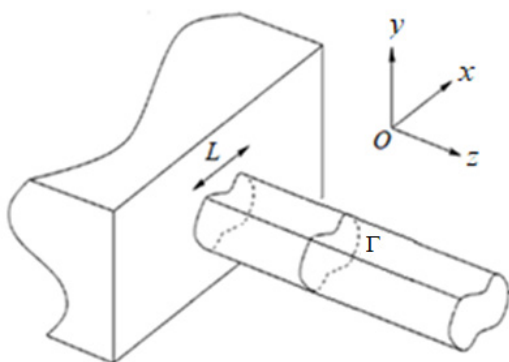


Рис. 1. Схематическое изображение консольной балки произвольного поперечного сечения: Γ – контур, L – его характерный размер

Для записи уравнений движения в безразмерном виде введем характерный размер контура L , характерную скорость ωL и характерное давление $\rho\omega^2 L^2$. Линеаризованные уравнения гидродинамики вязкой несжимаемой жидкости при сделанных выше предположениях имеют следующий вид [9]:

$$\begin{cases} \Delta \mathbf{v} - \beta \nabla p + i\beta \mathbf{v} = 0, \\ \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$ – вектор скорости жидкости; p – давление; β – безразмерный параметр, $\beta = \frac{\omega L^2}{\nu}$.

В приложениях параметр β может изменяться в чрезвычайно широком диапазоне: от 10^{-3} [1, 10, 11] до 10^5 [12]. В дальнейшем, для удобства записи, безразмерная амплитуда скорости u_0 принята равной 1.

Сформулируем граничные условия задачи.

На линии контура Γ условия «прилипания» имеют следующий вид:

$$v_n|_{\Gamma} = u_n, \quad v_{\tau}|_{\Gamma} = u_{\tau}, \quad (2)$$

где v_n, v_τ – нормальная и касательная составляющие вектора скорости жидкости, u_n, u_τ – (заданные) составляющие вектора скорости точек контура Γ .

Кроме того, возмущения поля скоростей, вызванные колебаниями, затухают при удалении от Γ :

$$\mathbf{v} \rightarrow 0, \sqrt{x^2 + y^2} \rightarrow \infty. \quad (3)$$

Если использовать представление компонент вектора скорости через две скалярные функции (называемые далее потенциалами для краткости [13]), 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

$$\begin{cases} \Delta \varphi = 0, \\ \Delta \psi + i\beta \psi = 0, \end{cases} \quad (4)$$

$$p = i\varphi.$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial n} + \frac{\partial \psi}{\partial \tau} = u_n, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} - \frac{\partial \psi}{\partial n} = u_\tau, \\ \varphi, \psi \rightarrow 0, \sqrt{x^2 + y^2} \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (5)$$

Как показано в статье [14], гидродинамическая сила \mathbf{R} , действующая на плоский контур с нормалью $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$, совершающий малые гармонические колебания, определяется через потенциалы формулой

$$\mathbf{R} = i\rho\omega \int_{\Gamma} [-\varphi \mathbf{n} - \psi (\mathbf{n} \times \mathbf{k})] dl, \quad (6)$$

где l – длина контура Γ ; \mathbf{k} – единичный вектор, $\mathbf{k} = (0, 0, 1)$.

Задачу, описываемую системой уравнений (4) и граничными условиями (5), будем называть задачей Стокса. Соотношения (4), (5) описывают любой вид плоского движения контура. В примерах, которые рассматриваются далее в этой статье, колебания происходят в направлении, параллельном оси Ox .

Для каждого уравнения системы (4) можно, учитывая граничные условия (5), сформулировать соответствующее граничное интегральное уравнение и, тем самым построить систему двух граничных интегральных уравнений [14]:

$$\begin{cases} \frac{1}{2}\varphi(M_0) - \int_{\Gamma} \varphi(M) \varphi_n^*(M, M_0) dl = \int_{\Gamma} \left[\frac{\partial \psi(M)}{\partial \tau} - u_n(M) \right] \varphi^*(M, M_0) dl, \\ \frac{1}{2}\psi(M_0) - \int_{\Gamma} \psi(M) \psi_n^*(M, M_0) dl = \int_{\Gamma} \left[u_\tau(M) - \frac{\partial \varphi(M)}{\partial \tau} \right] \psi^*(M, M_0) dl. \end{cases} \quad (7)$$

где $\varphi^*(M, M_0), \psi^*(M, M_0)$ – функции Грина для уравнений системы (4); $\varphi_n^*(M, M_0), \psi_n^*(M, M_0)$ – их производные в направлении внешней нормали \mathbf{n} в точке интегрирования; $H_0^{(1)}$ – функция Ханкеля первого рода нулевого порядка; $r(M, M_0)$ – расстояние между точками интегрирования M и наблюдения M_0 , лежащими на контуре;

$$\varphi^*(M, M_0) = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{1}{r(M, M_0)}, \psi^*(M, M_0) = \frac{i}{4} H_0^{(1)} [r(M, M_0) \sqrt{i\beta}],$$

$$\varphi_n^*(M, M_0) = \frac{\partial \varphi^*(M, M_0)}{\partial n}, \psi_n^*(M, M_0) = \frac{\partial \psi^*(M, M_0)}{\partial n}.$$

Асимптотика задачи Стокса для кругового контура

Точное решение задачи о колебаниях кругового цилиндра в вязкой несжимаемой покоящейся жидкости вдоль оси Ox , а также формула для расчета гидродинамического сопротивления цилиндра получены Дж. Стоксом [4].

Приведем асимптотические формулы, полученные с помощью метода потенциалов в статье [15]. В полярных координатах r, θ при $\beta \rightarrow \infty$ они имеют вид

$$\begin{cases} \varphi(1, \theta) \underset{\beta \rightarrow \infty}{\sim} \varphi_\infty(1, \theta) + O\left(\frac{1}{\beta^2}\right), \varphi_\infty(1, \theta) = \left(-1 + \frac{2}{i\sqrt{i\beta}} + \frac{1}{i\beta} - \frac{1}{4\beta\sqrt{i\beta}}\right) \cos \theta, \\ \psi(1, \theta) \underset{\beta \rightarrow \infty}{\sim} \psi_\infty(1, \theta) + O\left(\frac{1}{\beta^2}\right), \psi_\infty(1, \theta) = \left(\frac{2}{i\sqrt{i\beta}} + \frac{1}{i\beta} - \frac{1}{4\beta\sqrt{i\beta}}\right) \sin \theta; \end{cases} \quad (8)$$

при $\beta \rightarrow 0$ и конечном r –

$$\begin{cases} \varphi(r, \theta) \underset{\beta \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{(i\sqrt{i\beta})^2 \left[\ln(i\sqrt{i\beta})^2 + 2\gamma - 2\ln 2 \right]} \tilde{\varphi}(r, \theta) + O(\beta), \\ \psi(r, \theta) \underset{\beta \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{(i\sqrt{i\beta})^2 \left[\ln(i\sqrt{i\beta})^2 + 2\gamma - 2\ln 2 \right]} \tilde{\psi}(r, \theta) + r \sin \theta + O(\beta), \\ \tilde{\varphi}(r, \theta) = \frac{4}{r} \cos \theta, \tilde{\psi}(r, \theta) = \frac{4}{r} \sin \theta. \end{cases} \quad (9)$$

и, согласно формуле (6), получаем следующие выражения для $R(\beta)$:

$$\begin{cases} R(\beta) \underset{\beta \rightarrow \infty}{\sim} R_\infty(\beta), R_\infty(\beta) = i\pi \left(1 - \frac{4}{i\sqrt{i\beta}} - \frac{2}{i\beta} + \frac{1}{2\beta\sqrt{i\beta}} \right), \\ R(\beta) \underset{\beta \rightarrow 0}{\sim} R_0(\beta), R_0(\beta) = -\frac{8i\pi}{(i\sqrt{i\beta})^2 \left[\ln(i\sqrt{i\beta})^2 + 2\gamma - 2\ln 2 \right]}. \end{cases} \quad (10)$$

Точное же выражение для $R(\beta)$ приведено в работах [4, 5, 8].

На рис. 2 показаны результаты расчета модуля относительных погрешностей

$$\varepsilon_1 = \left| \frac{|R_0(\beta)| - |R(\beta)|}{|R(\beta)|} \right|, \varepsilon_2 = \left| \frac{|R_\infty(\beta)| - |R(\beta)|}{|R(\beta)|} \right|$$

(в процентах) по формулам (8), (9).

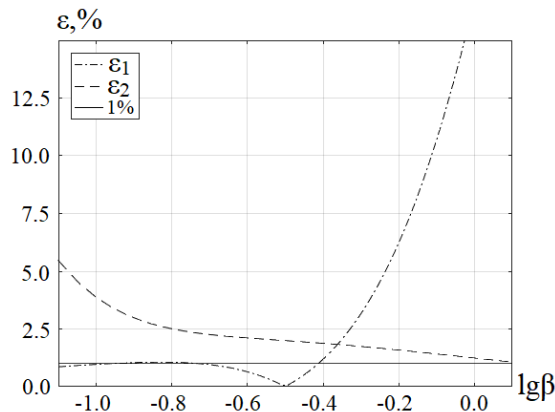


Рис. 2. Результаты расчета модуля относительных погрешностей по формулам (8), (9). Сплошной линией показан уровень погрешности, равный 1% (для сравнения)

Для наглядности на рис. 2 сплошной линией показан уровень погрешности, равный 1%. Видно, что вне диапазона $\lg \beta \in (-0,8, 0,0)$, т. е. при $\beta \notin (0,16, 1,00)$, вычисления гидродинамической силы на контуре цилиндра можно производить с ошибкой, не превышающей 1 %, если использовать соответствующую асимптотику.

Асимптотическое решение задачи Стокса при больших значениях β

Классические формулы, полученные Дж. Стоксом, наводят на мысль выполнять асимптотическое разложение искомых потенциалов в виде асимптотического ряда по степеням малого параметра $\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{i\sqrt{i\beta}}$:

$$\varphi(M_0) \underset{|\lambda| \rightarrow \infty}{\sim} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\lambda^k} \varphi^{(k)}(M_0), \quad \psi(M_0) \underset{|\lambda| \rightarrow \infty}{\sim} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda^k} \psi^{(k)}(M_0). \quad (11)$$

Введем локальную декартову систему координат (\tilde{x}, \tilde{y}) с началом в точке наблюдения M_0 и осью $M_0\tilde{x}$, направленной по касательной к контуру Γ (рис. 3).

Уравнение кривой в локальной системе координат имеет вид $\tilde{y} = \tilde{y}(\tilde{x})$, причем $\tilde{y}(0) = \left. \frac{d\tilde{y}}{d\tilde{x}} \right|_{\tilde{x}=0} = 0$.

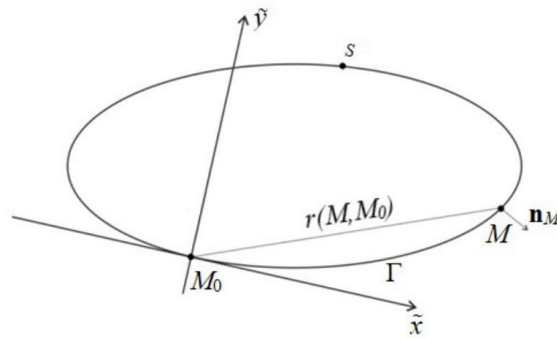


Рис. 3. Введенная локальная система декартовых координат:
 Γ – контур; M_0 – точка наблюдения; s – длина дуги, отсчитываемая от точки наблюдения M_0 против часовой стрелки

Контур Γ зададим с помощью естественной параметризации $\tilde{x} = \tilde{x}(s)$, $\tilde{y} = \tilde{y}(s)$, где $s \in [0, L]$ – длина дуги, отсчитываемая от точки наблюдения M_0 против часовой стрелки.

Для представления интегралов, содержащих функцию ψ^* и ее производные в системе уравнений (7), в форме, удобной для получения асимптотик, используем интегральные представления функций Ханкеля [16]:

$$\frac{i}{4} H_0^{(1)}(\sqrt{i\beta}r) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty e^{\lambda r \operatorname{ch} t} dt, \quad \frac{i}{4} H_1^{(1)}(\sqrt{i\beta}r) = \frac{i\lambda r}{2\pi} \int_0^\infty e^{\lambda r \operatorname{ch} t} sh^2 t dt. \quad (12)$$

Запишем интегралы, входящие в уравнения (12), в следующем виде:

$$I(\lambda) = \int_0^L f(s) e^{\lambda S(s)} ds = I_1(\lambda) + I_2(\lambda) = \int_0^{s_0} f(s) e^{\lambda S(s)} ds + \int_{s_0}^L f(s) e^{\lambda S(s)} ds,$$

где s_0 – произвольная фиксированная внутренняя точка промежутка изменения параметра s : $s_0 \in [0, L]$.

Согласно сведениям в монографии [17], справедливы следующие выражения:

$$I_1(\lambda) \underset{|\lambda| \rightarrow \infty}{\sim} \left(\frac{c_0}{\lambda} + \frac{c_1}{\lambda^2} + \frac{c_2}{\lambda^3} + \dots \right) e^{\lambda S(s)} \Big|_{s=0+0}, c_k = \left[-D^k \frac{f(s)}{S'(s)} \right] \Big|_{s=0+0},$$

$$I_2(\lambda) \underset{|\lambda| \rightarrow \infty}{\sim} - \left(\frac{c_0}{\lambda} + \frac{c_1}{\lambda^2} + \frac{c_2}{\lambda^3} + \dots \right) e^{\lambda S(s)} \Big|_{s=L-0}, c_k = \left[-D^k \frac{f(s)}{S'(s)} \right] \Big|_{s=L-0}, \quad (13)$$

$$D = -\frac{1}{S'(s)} \frac{d}{ds}.$$

Для вычисления коэффициентов c_k можно использовать односторонние разложения в ряд Тейлора, известные из курса дифференциальной геометрии [18]:

$$\tilde{x}(s) = \pm s \mp \frac{\kappa^2 s^3}{6} + \dots, \tilde{y}(s) = \frac{\kappa s^2}{2} \pm \kappa'(s) \frac{s^3}{6} + \dots, r = \pm s \mp \frac{\kappa^2 s^3}{24} + \dots \quad (14)$$

В этих формулах κ – кривизна кривой в точке M_0 , $\kappa = -|\mathbf{r}''(s)|$; комбинация знаков плюс-минус соответствуют тейлоровским разложениям справа в точке $s = 0$ и слева в точке $s = L$.

Если использовать приведенные выше формулы и выполнить несложные (но трудоемкие) вычисления, то можно убедиться, что для любой функции $f(s)$, заданной на контуре, выполняются следующие соотношения:

$$\int_{\Gamma} f(s) \frac{i}{4} H_0^{(1)}(\sqrt{i\beta}r) ds \underset{|\lambda| \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{2\lambda} f(s) - \frac{1}{4\lambda^3} \left[\frac{\partial^2 f(s)}{\partial s^2} + \frac{1}{4} f(s) \kappa^2 \right], \quad (15)$$

$$\int_{\Gamma} f(s) \frac{i}{4} \frac{\partial}{\partial n} H_0^{(1)}(\sqrt{i\beta}r) ds \underset{|\lambda| \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\kappa}{4\lambda} f(s). \quad (16)$$

Теперь остается, используя эти соотношения и подставляя асимптотические ряды (11) в правые и левые части уравнений (7), приравнять коэффициенты при одинаковых степенях $\frac{1}{\lambda}$ и получить окончательно следующие группы уравнений и соотношений:

граничных интегральных уравнений для $\varphi^{(k)}$ ($k = 0, 1, 2, 3$) – приближений потенциала φ –

$$\frac{1}{2} \varphi^{(0)}(M_0) - \int_{\Gamma} \varphi^{(0)}(M) \varphi_n^*(M, M_0) dl = - \int_{\Gamma} u_n(M) \varphi^*(M, M_0) dl, \quad (17)$$

$$\frac{1}{2} \varphi^{(k)}(M_0) - \int_{\Gamma} \varphi^{(k)}(M) \varphi_n^*(M, M_0) dl = \int_{\Gamma} \frac{\partial \psi^{(k)}(M)}{\partial s} \varphi^*(M, M_0) dl, \quad k = 1, 2, 3; \quad (18)$$

соотношений в точках контура для $\psi^{(k)}$ ($k = 1, 2, 3$) – приближений потенциала ψ (далее для простоты записи указание на точку M_0 опускается) –

$$\psi^{(1)} = -u_{\tau} + \frac{\partial \varphi^{(0)}}{\partial s}, \quad (19)$$

$$\psi^{(2)} = \frac{\kappa \psi^{(1)}}{2} + \frac{\partial \varphi^{(1)}}{\partial s}, \quad (20)$$

$$\psi^{(3)} = \frac{\kappa \psi^{(2)}}{2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi^{(1)}}{\partial s^2} + \frac{\kappa^2}{8} \psi^{(1)} + \frac{\partial \varphi^{(2)}}{\partial s}. \quad (21)$$

Соотношения для $k = 0, 1$ соответствуют известной (линейной) формуле Морисона [19, 20]; для $k = 2$ были получены и доказаны в статье [21]; что же касается соотношений для $k = 3$, то они получены впервые.

Важно отметить, что граничные интегральные уравнения (17), (18) абсолютно эквивалентны краевым задачам Неймана для уравнения Лапласа:

$$\Delta\varphi^{(0)} = 0, \quad \left. \frac{\partial\varphi^{(0)}}{\partial n} \right|_{\Gamma} = u_n \quad (22)$$

$$\Delta\varphi^{(k)} = 0, \quad \left. \frac{\partial\varphi^{(k)}}{\partial n} \right|_{\Gamma} = -\left. \frac{\partial\psi^{(k)}}{\partial s} \right|_{\Gamma}, \quad k = 1, 2, 3. \quad (23)$$

Асимптотика задачи Стокса для кругового контура (пример). Последовательно производя вычисления по формулам (22), (23) для потенциала φ и (19) – (21) для потенциала ψ , имеем:

$$\begin{cases} \Delta\varphi^{(0)} = 0, \quad \left. \frac{\partial\varphi^{(0)}}{\partial r} \right|_{r=1} = \cos\theta, \quad \varphi^{(0)}(r, \theta) = -\frac{1}{r}\cos\theta; \\ \psi^{(1)}(1, \theta) = 2\sin\theta. \end{cases}$$

$$\begin{cases} \Delta\varphi^{(1)} = 0, \quad \left. \frac{\partial\varphi^{(1)}}{\partial r} \right|_{r=1} = -2\cos\theta, \quad \varphi^{(1)}(r, \theta) = \frac{2}{r}\cos\theta; \\ \psi^{(2)}(1, \theta) = -\sin\theta. \end{cases}$$

$$\begin{cases} \Delta\varphi^{(2)} = 0, \quad \left. \frac{\partial\varphi^{(2)}}{\partial r} \right|_{r=1} = \cos\theta, \quad \varphi^{(2)}(r, \theta) = -\frac{1}{r}\cos\theta; \\ \psi^{(3)}(1, \theta) = -\frac{1}{4}\sin\theta. \end{cases}$$

$$\Delta\varphi^{(3)} = 0, \quad \left. \frac{\partial\varphi^{(3)}}{\partial r} \right|_{r=1} = -\frac{1}{4}\cos\theta, \quad \varphi^{(3)}(r, \theta) = -\frac{1}{4r}\cos\theta.$$

Полученные результаты при $r = 1$ совпадают с формулами (8).

О задаче Неймана для потенциалов $\varphi^{(k)}$ ($k = 1, 2, 3$). В некоторых случаях, возможно, решения уравнений (22), (23) удастся найти методом Фурье [21], но можно использовать и численные методы. Однако такие решения можно получить с помощью конформного преобразования.

Единственное решение задачи Неймана, т. е.

$$\Delta\varphi^{(k)} = 0, \quad \left. \frac{\partial\varphi^{(k)}}{\partial r} \right|_{r=R} = \Phi(\eta), \quad (24)$$

для внешности круга $r = R$ дается формулой Дини [22]:

$$\varphi^{(k)}(\eta) = \frac{R}{\pi} \int_0^{2\pi} \Phi(t) \ln \left| \sin \frac{\eta-t}{2} \right| dt, \quad (25)$$

где η, t – угловые координаты точки наблюдения и точек интегрирования.

Отобразим конформным преобразованием $z = z(\zeta)$ – внешность круга радиуса R на внешность контура Γ .

Пусть контур Γ , определяемый параметрическим образом, а именно –

$$z(\eta) = x(\eta) + iy(\eta),$$

соответствует окружности $\zeta = Re^{i\eta}$.

Существует единственное конформное отображение, для которого точке $\zeta = R$ на окружности соответствует точка $z = 1$ на контуре Γ и при этом луч $\text{Re}\zeta \geq R, \text{Im}\zeta = 0$ на плоскости ζ перейдет в луч $\text{Re}z \geq 1, \text{Im}z = 0$ на плоскости z . Тогда решение задачи Неймана в точках этого контура можно найти с помощью следующей формулы [22]:

$$\varphi^{(k)}(\eta)\Big|_{\Gamma} = -\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\partial \psi^{(k)}}{\partial t} \Big|_{\zeta=R e^{it}} \left| z'(\zeta) \right|_{\zeta=R e^{it}} \ln \left| \sin \frac{\eta-t}{2} \right| dt. \quad (26)$$

Но поскольку

$$\frac{\partial \psi^{(k)}}{\partial t} \Big|_{\zeta=R e^{it}} = \frac{\partial \psi^{(k)}}{\partial t} \Big|_{\Gamma} \frac{1}{\left| z'(\zeta) \right|_{\zeta=R e^{it}}},$$

окончательно имеем:

$$\varphi^{(k)}(\eta)\Big|_{\Gamma} = -\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\partial \psi^{(k)}}{\partial t} \Big|_{\Gamma} \ln \left| \sin \frac{\eta-t}{2} \right| dt. \quad (27)$$

Это и есть формула, восстанавливающая значения $\varphi^{(k)}$ ($k = 1, 2, 3$) на контуре Γ по известным значениям $\psi^{(k)}\Big|_{\Gamma}$.

Как известно, конформное отображение сохраняет углы между кривыми, поэтому косинусы углов между нормальными к контуру Γ и осями координат (на плоскости z) и косинусы углов между нормальными к окружности и осями координат (на плоскости ζ) совпадают в соответствующих друг другу точках.

Докажем, что

$$\int_0^{2\pi} \varphi^{(k)}(\eta) \begin{Bmatrix} \cos m\eta \\ \sin m\eta \end{Bmatrix} d\eta = \pm \int_0^{2\pi} \psi^{(k)}(\eta) \begin{Bmatrix} \sin m\eta \\ \cos m\eta \end{Bmatrix} d\eta, \quad m = 1, 2, \dots \quad (28)$$

Действительно, из формул (27) следует, что

$$\int_0^{2\pi} \varphi^{(k)}(\eta) \begin{Bmatrix} \cos m\eta \\ \sin m\eta \end{Bmatrix} d\eta = - \int_0^{2\pi} \frac{\partial \psi^{(k)}}{\partial t} dt \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \begin{Bmatrix} \cos m\eta \\ \sin m\eta \end{Bmatrix} \ln \left| \sin \frac{\eta-t}{2} \right| dt, \quad m = 1, 2, \dots \quad (29)$$

Но поскольку справедливо равенство (см. формулы в книге [23]):

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \begin{Bmatrix} \cos m\eta \\ \sin m\eta \end{Bmatrix} \int_0^{2\pi} \ln \left| \sin \frac{\eta-t}{2} \right| dt = -\frac{1}{m} \begin{Bmatrix} \cos m\eta \\ \sin m\eta \end{Bmatrix}, \quad m = 1, 2, \dots \quad (30)$$

то, интегрируя уравнение (29) по частям, получаем искомое равенство (28). Доказательство получено.

Таким образом, ряды Фурье для функций $\varphi^{(k)}$, $\psi^{(k)}$ являются гармоническими сопряженными друг другу вне контура [24].

В частности, при $m = 1$, $\cos \eta = n_x$, $\sin \eta = n_y$, из равенства (28) следует свойство потенциалов $\varphi^{(k)}$, $\psi^{(k)}$, полезное при вычислении силы:

$$\int_{\Gamma} \varphi^{(k)} n_x dl = \int_{\Gamma} \psi^{(k)} n_y dl. \quad (31)$$

Вследствие этой формулы, при вычислении силы достаточно найти функции $\varphi^{(k)}$ и затем получить информацию о функции $\psi^{(k)}$ в точках контура с помощью локальных формул (19) – (21).

Асимптотическое решение задачи Стокса при «малых» значениях β

Формулы (9) для решения задачи о колебаниях цилиндра при малых значениях β подсказывают структуру асимптотики подобных решений для произвольного контура.

Из них следует, что при $\beta \rightarrow 0$ потенциалы φ , ψ представляют собой сумму гармонических во внешности круга функций, пропорциональных $(\lambda^2 \ln \lambda^2)^{-1}$ и слагаемых вида 0 , $y = r \cdot \sin \theta$, которые описывают однородный поток колеблющейся жидкости.

Пусть функции $\Phi(x, y)$, $\Psi(x, y)$ представляют собой потенциал и функцию тока, однородного во всей плоскости колебательного потока идеальной несжимаемой жидкости. Комплексный потенциал такого потока следует выражению [25]:

$$W(x, y) = \Phi(x, y) - i\Psi(x, y).$$

Введем потенциалы

$$\varphi = \varphi' + \Phi, \quad \psi = \psi' + \Psi$$

(штрихи далее опускаются).

Теперь система дифференциальных уравнений (4) имеет вид

$$\begin{cases} \Delta\varphi = 0, \\ \Delta\psi + i\beta\psi = -i\beta\Psi. \end{cases} \quad (32)$$

Уравнение для функции ψ не является однородным, хотя краевые условия для системы (32) выражаются как

$$\begin{cases} \left. \frac{\partial\varphi}{\partial n} \right|_{\Gamma} = - \left. \frac{\partial\psi}{\partial\tau} \right|_{\Gamma}, \\ \left. \frac{\partial\psi}{\partial n} \right|_{\Gamma} = \left. \frac{\partial\varphi}{\partial\tau} \right|_{\Gamma}. \end{cases} \quad (33)$$

они однородны, условия затухания на бесконечности следующие:

$$\varphi + \Phi \rightarrow 0, \quad \psi + \Psi \rightarrow 0, \quad \sqrt{x^2 + y^2} \rightarrow \infty.$$

Пусть Ω_R – часть плоскости $z = x + iy$ с внутренней границей Γ и произвольной по форме внешней границей γ_R , имеющей диаметр $2R$. Применяя вторую формулу Грина [22] к паре функций ψ, ψ^* в ограниченной области Ω_R и размещая точку наблюдения на контуре Γ , построим интегральное уравнение для потенциала ψ :

$$\frac{1}{2}\psi - \int_{\Gamma} \psi \psi_n^* dl = - \int_{\Gamma} \psi^* \frac{\partial\varphi}{\partial\tau} dl + \int_{\gamma_R} \left(\psi \psi_n^* - \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial n} \right) dl + i\beta \iint_{\Omega_R} \psi^* (\psi + \Psi) dx dy. \quad (34)$$

При выводе этого уравнения использовано второе из граничных условий (33), аргументы всех функций опущены для краткости записи.

Будем искать асимптотическое представление потенциалов $\varphi(x, y), \psi(x, y)$ при $\beta \rightarrow 0$ в виде

$$\varphi = \frac{1}{\lambda^2 \ln \lambda^2} \tilde{\varphi}(x, y), \quad \psi = \frac{1}{\lambda^2 \ln \lambda^2} \tilde{\psi}(x, y), \quad (35)$$

где $\tilde{\varphi}(x, y), \tilde{\psi}(x, y)$ – неизвестные вещественные гладкие функции, ограниченные в области Ω_R , которые подлежат определению.

Заметим, что

$$\begin{aligned} \psi^*(M_0, M) &\underset{\beta \rightarrow 0}{\sim} -\frac{1}{4\pi} \ln \lambda^2 + \frac{1}{2\pi} \ln \frac{1}{r(M_0, M)} = -\frac{1}{4\pi} \ln \lambda^2 + \varphi^*(M_0, M), \\ \psi_n^*(M_0, M) &\underset{\beta \rightarrow 0}{\sim} \varphi_n^*(M_0, M). \end{aligned} \quad (36)$$

при конечных $r(M_0, M)$.

Подставим соотношения (35), (36) в интегральное уравнение (34), умножим его на $\lambda^2 \ln \lambda^2$ и перейдем к пределу при $\beta \rightarrow 0$. Тогда при конечном R получим:

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} \tilde{\psi} \psi_n^* dl &\underset{\beta \rightarrow 0}{\sim} \int_{\Gamma} \tilde{\psi} \varphi_n^* dl, \\ \int_{\Gamma} \psi^* \frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial\tau} dl &= \int_{\Gamma} \left(-\frac{1}{4\pi} \ln \lambda^2 + \varphi^* \right) \frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial\tau} dl = -\frac{1}{4\pi} \ln \lambda^2 \int_{\Gamma} \frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial\tau} dl + \int_{\Gamma} \varphi^* \frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial\tau} dl = \int_{\Gamma} \varphi^* \frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial\tau} dl, \\ i\beta \iint_{\Omega_R} \psi^* (\psi + \Psi) dx dy &\underset{\beta \rightarrow 0}{\rightarrow} 0. \end{aligned}$$

Что касается слагаемого

$$\int_{\gamma_R} \left[\tilde{\psi} \varphi_n^* - \left(-\frac{1}{4\pi} \ln \lambda^2 + \varphi^* \right) \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial n} \right] dl,$$

то при произвольном фиксированном значении β и $R \rightarrow \infty$ его можно считать сколь угодно малым.

Аналогичным образом поступим и с потенциалом φ . В результате получаем следующую систему:

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \tilde{\varphi} - \int_{\Gamma} \tilde{\varphi} \varphi_n^* dl = \int_{\Gamma} \varphi^* \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tau} dl, \\ \frac{1}{2} \tilde{\psi} - \int_{\Gamma} \tilde{\psi} \varphi_n^* dl = - \int_{\Gamma} \varphi^* \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tau} dl. \end{cases} \quad (37)$$

Граничные интегральные уравнения (37) указывают, что функции $\tilde{\varphi}(x, y), \tilde{\psi}(x, y)$ являются сопряженными гармоническими функциями во внешности контура Γ , а функция

$$F(z) = \frac{1}{\lambda^2 \ln \lambda^2} [\tilde{\varphi}(x, y) - i \tilde{\psi}(x, y)]$$

является аналитической в этой области.

Таким образом, задача свелась к отысканию комплексного потенциала некоторого фиктивного течения идеальной несжимаемой жидкости, происходящего во внешности контура Γ плоскости $z = x + iy$, помещенного в однородный поток с комплексным потенциалом W . Решение этой классической задачи легко получить, если использовать конформное преобразование такой области на внешность единичного круга [25].

Пусть $z = z(\zeta)$, $\zeta = \zeta(z)$ – известные аналитические функции, реализующие это преобразование.

Комплексная скорость «на бесконечности», на плоскости ζ определяется формулой

$$\begin{cases} \left(\frac{dW}{d\zeta} \right)_{\infty} = k \left(\frac{dW}{dz} \right)_{\infty}, \\ k = \left(\frac{dz}{d\zeta} \right)_{\infty}. \end{cases} \quad (38)$$

По известной функции $F(z)$ можно найти и гидродинамическую силу. Ограничимся случаем движения контура вдоль оси Ox . Тогда, согласно формуле (6),

$$R \underset{\beta \rightarrow 0}{\sim} -i \frac{1}{\lambda^2 \ln \lambda^2} \oint_{\Gamma} (\tilde{\varphi} dy - \tilde{\psi} dx). \quad (39)$$

С другой стороны (см. работу [24]),

$$\oint_{\Gamma} F(z) dz = \frac{1}{\lambda^2 \ln \lambda^2} \oint_{\Gamma} (\tilde{\varphi} - i \tilde{\psi})(dx + i dy) = \frac{1}{\lambda^2 \ln \lambda^2} \oint_{\Gamma} (\tilde{\varphi} dx + \tilde{\psi} dy) + i \frac{1}{\lambda^2 \ln \lambda^2} \oint_{\Gamma} (\tilde{\varphi} dy - \tilde{\psi} dx).$$

В результате получаем соотношение

$$R \underset{\beta \rightarrow 0}{\sim} -i \operatorname{Im} \oint_{\Gamma} F(z) dz = 2\pi i \operatorname{Re} s F(z) \Big|_{z=\infty}. \quad (40)$$

В случае кругового контура единичного радиуса на плоскости комплексного переменного $\zeta = \xi + i\eta$, из асимптотических формул (9) следует, что

$$\begin{cases} \tilde{\varphi}(\zeta, \eta) = 4 \frac{\xi}{|\zeta|^2}, \quad \tilde{\psi}(\zeta, \eta) = 4 \frac{\eta}{|\zeta|^2}, \\ F(\zeta) = \frac{4}{\lambda^2 \ln \lambda^2} \frac{1}{\zeta} \end{cases}$$

и

$$R(\beta) \sim \frac{8\pi i}{\lambda^2 \ln \lambda^2} \operatorname{Res} \frac{1}{\zeta} \Big|_{\zeta=\infty}.$$

Но $\operatorname{Res} \frac{1}{\zeta} \Big|_{\zeta=\infty} = -1$, поэтому окончательно получаем:

$$R_0(\beta) = -\frac{8i\pi}{\lambda^2 \ln \lambda^2}. \quad (41)$$

Формула (41) есть решение задачи об асимптотике гидродинамической силы при $\beta \rightarrow \infty$. В соответствии с этой формулой, главный член асимптотики гидродинамической силы при малых значениях β имеет такой вид и не зависит от формы гладкого контура. Этот эффект упомянут в статье [1] для контуров в виде окружности и пластины. Однако оказывается, что он имеет место всегда. Проверить этот факт можно лишь на задаче Стокса для эллиптического контура, у которой имеется аналитическое решение [15].

Асимптотика задачи Стокса для эллиптического контура

Продemonстрируем применение построенных асимптотик на примере задачи Стокса для эллиптического контура.

Асимптотическое решение при «больших» значениях β . Асимптотика решения этой задачи в первом приближении получена в статье [21]. Для построения следующих приближений обратимся к формулам (19) – (21) и (27). Их применение требует численного вычисления подинтегральных выражений, содержащих функции и их производные, а также численного определения интегралов с ядром, имеющим логарифмическую особенность. Для этой процедуры использовалась квадратурная формула, предложенная в статье [26]. Опуская технические подробности, приведем здесь лишь некоторые результаты расчета.

На рис. 4 сопоставлены результаты расчетов модуля силы $R_x(\beta)$, полученных в статье [21] численным решением задачи Стокса о колебаниях эллиптического контура вдоль большей оси (параметр $\varepsilon = 0,2$), с результатами расчетов $R_x^{(k)}(\beta)$ ($k = 1, 2, 3$), учитывающих одно, два и три слагаемых по асимптотическим зависимостям (19) – (21) и (27), соответственно. Отметим, что в качестве характерной длины L выбрана полусумма полуосей эллипса.

На рис. 4 видно, что второе и третье приближения значительно улучшают результат в диапазоне «умеренных» значений β . При больших значениях параметра β хорошее совпадение с численным решением дает уже первое приближение [21].

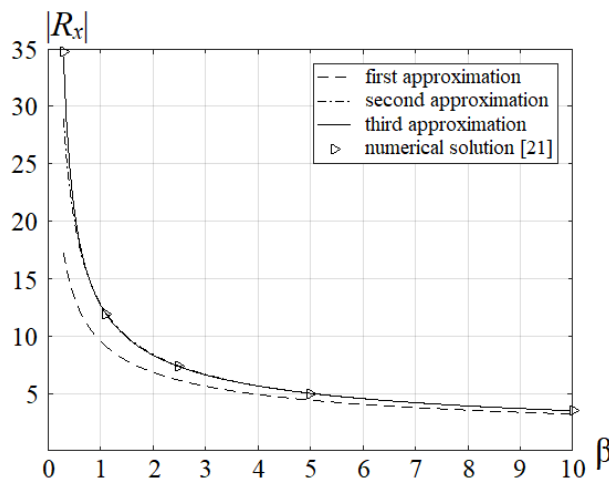


Рис. 4. Сопоставление результатов расчетов модуля $R_x(\beta)$, полученных в статье [21], с результатами расчетов модуля $R_x^{(k)}(\beta)$ ($k = 1, 2, 3$)

Асимптотическое решение при «малых» значениях β . Два слагаемых асимптотических разложений потенциалов при $\beta \rightarrow 0$ и конечных значениях ξ имеют вид (первые слагаемые были приведены в статье [15]):

$$\begin{cases} \varphi(\xi, \eta) \sim \frac{8e^{-\xi-\xi_0}}{(1-\varepsilon)\lambda^2 \ln \lambda^2} \cos \eta - \frac{1}{2} e^{-\xi-\xi_0} (1 + \varepsilon - e^{2\xi_0} + \varepsilon e^{2\xi_0}) \cos \eta, \\ \psi(\xi, \eta) \sim \frac{8e^{-\xi-\xi_0}}{(1-\varepsilon)\lambda^2 \ln \lambda^2} \sin \eta + \frac{1}{2} e^{-\xi-\xi_0} (e^{2\xi} - 1)(1 + \varepsilon) \sin \eta, \end{cases} \quad (42)$$

где ε – отношение полуосей эллипса, $\varepsilon \in [0, 1]$; ξ, η – эллиптические координаты, $\xi \in [\xi_0, +\infty)$, $\eta \in [0, 2\pi)$; $x = hch\xi \cos \eta$, $y = hsh\xi \sin \eta$, $h = \sqrt{1 - \varepsilon^2}$, $z = x + iy = hch(\xi + i\eta)$.

Контур эллипса соответствует значению $\xi_0 = \operatorname{ar}th \varepsilon$.

Нетрудно убедиться, что

$$1 + \varepsilon - e^{2\xi_0} + \varepsilon e^{2\xi_0} = 0, \quad \frac{e^{-\xi-\xi_0} (e^{2\xi} - 1)(1 + \varepsilon)}{2} \sin \eta = y.$$

Тогда из формул (42) следует, что

$$\begin{cases} \varphi(\xi, \eta) \sim \frac{8e^{-\xi-\xi_0}}{(1-\varepsilon)\lambda^2 \ln \lambda^2} \cos \eta, \\ \psi(\xi, \eta) \sim \frac{8e^{-\xi-\xi_0}}{(1-\varepsilon)\lambda^2 \ln \lambda^2} \sin \eta + y; \end{cases}$$

$$F(\xi, \eta) = \frac{8e^{-\xi-\xi_0}}{(1-\varepsilon)\lambda^2 \ln \lambda^2} (\cos \eta - i \sin \eta) = \frac{8}{\lambda^2 \ln \lambda^2} \frac{1}{he^{\xi+i\eta}}.$$

Далее,

$$he^{\xi+i\eta} = he^{\operatorname{ar}ch \frac{z}{h}} = z + \sqrt{z^2 - h^2}.$$

Таким образом,

$$F(z) = \frac{8}{\lambda^2 \ln \lambda^2} \frac{1}{\zeta(z)}. \quad (43)$$

Известное конформное отображение [24] вида

$$z = \frac{1}{2} \left[(1 + \varepsilon)\zeta + \frac{(1 - \varepsilon)}{\zeta} \right] \quad (44)$$

переводит внешность окружности $|\zeta| = 1$ во внешность эллипса с полуосями 1 и ε .

Из выражения (44) следует, что

$$\zeta(z) = \frac{z + \sqrt{z^2 - h^2}}{1 + \varepsilon}.$$

В результате отображения (43) на внешность единичного круга

$$F(\zeta) = \frac{8k}{\lambda^2 \ln \lambda^2} \frac{1}{(1 + \varepsilon)\zeta}$$

и, согласно формуле (40), получаем (как и ожидалось), что

$$R_0(\beta) = -\frac{8i\pi}{\lambda^2 \ln \lambda^2}. \quad (45)$$

Заключение

В результате проведенного исследования построены асимптотические формулы для задачи о малых гармонических колебаниях плоского контура, погруженного в несжимаемую вязкую жидкость. Показано, что при малых значениях параметра β главный член асимптотики гидродинамической силы не зависит от формы гладкого контура. При больших значениях β (см. рис. 4) полученные второе и третье асимптотические приближения позволяют значительно улучшить результаты расчета гидродинамической силы в диапазоне «умеренных» чисел β .

Таким образом, вычисления гидродинамической силы на произвольном гладком контуре в широком диапазоне значений β можно выполнять, используя соответствующую асимптотику.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **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.
2. **Maali A., Hurth C., Boisgard R., Jai C., Cohen-Bouhacina T., Aimé J.-P.** Hydrodynamics of oscillating atomic force microscopy cantilevers in viscous fluids // *Journal of Applied Physics*. 2005. Vol. 97. No. 7. P. 074907.
3. **Quiñones M., Camargo H., Baquero H.** Frequency response of a microcantilever immersed in fluid // *Proceedings of the 4th World Congress on New Technologies (NewTech'-18)*. Madrid, Spain. August 19–21, 2018. P. 122.
4. **Stokes G. G.** On the effect of internal friction of fluids on the motion of pendulums // *Transactions of the Cambridge Philosophical Society*. 1851. Vol. 9. Part 2. Pp. 8–106.
5. **Rosenhead L.** (Editor). *Laminar boundary layers*. Oxford (UK): Oxford University Press, 1963. 688 p.
6. **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.
7. **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.
8. **Tanahashi T.** Force acting on an oscillating cylinder in incompressible viscous fluid // *Keio Engineering Reports*. 1972. Vol. 25. No. 11. Pp. 129–140.
9. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Теоретическая физика. В 10 тт. Т. 6. Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 736 с.
10. **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, Italy. 2009. Pp. 1–11.
11. **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.
12. **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.
13. **Гузь А. Н.** Динамика сжимаемой вязкой жидкости. Киев: А.С.К., 1998. 350 с.
14. **Кадыров С. Г.** Метод граничных интегральных уравнений в задаче о малых колебаниях тел в сжимаемой вязкой жидкости // *Морской вестник*. 2013. Апрель. Спецвыпуск. № 1 (10). С. 85–87.
15. **Афанасов Е. Н., Кадыров С. Г., Певзнер В. В.** Задача Стокса для эллиптического контура // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2023. Т. 16. № 3. С. 177–188.
16. **Градштейн И. С., Рыжик И. М.** Таблицы интегралов, сумм, рядов и производений. Изд. 4-е. М.: Физматгиз, 1963. 1100 с.
17. **Федорюк М. В.** Асимптотика: интегралы и ряды. М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит-ры, 1987. 544 с.
18. **Погорелов А. В.** Дифференциальная геометрия. Изд. 6-е. М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит-ры, 1974. 176 с.



19. **Troesch A. W., Kim S. K.** Hydrodynamic forces acting on cylinders oscillating at small amplitudes // *Journal of Fluids and Structures*. 1991. Vol. 5. No. 1. Pp. 113–126.
20. **Bearman P. W., Downie M. J., Graham J. M. R., Obasaju E. D.** Forces on cylinders in viscous oscillatory flow at low Keulegan–Carpenter numbers // *Journal of Fluid Mechanics*. 1985. Vol. 154. May. Pp. 337–356.
21. **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.
22. **Михлин С. Г.** Курс математической физики. М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит-ры, 1968. 576 с.
23. **Лифанов И. К.** Особые интегральные уравнения и методы их численного решения. М.: МАКС Пресс, 2006. 70 с.
24. **Лаврентьев М. А., Шабат Б. В.** Методы теории функций комплексного переменного. Изд. 4-е. М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит-ры, 1973. 736 с.
25. **Кочин Н. Е., Кибель И. А., Розе Н. В.** Теоретическая гидромеханика. Часть 1. Изд. 6-е. М.: Физматгиз, 1963. 584 с.
26. **Мелешко И. Н., Ласый П. Г., Довга Ю. А.** Приближенный метод вычисления интегралов с логарифмической особенностью специального вида // *Наука и техника*. 2012. № 3. С. 47–50.

REFERENCES

1. **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.
2. **Maali A., Hurth C., Boisgard R., et al.**, Hydrodynamics of oscillating atomic force microscopy cantilevers in viscous fluids, *J. Appl. Phys.* 97 (7) (2005) 074907.
3. **Quiñones M., Camargo H., Baquero H.**, Frequency response of a microcantilever immersed in fluid, *Proc. 4th World Congress on New Technologies (NewTech'18)*, Madrid, Spain, August 19–21, 2018. (2018) 122.
4. **Stokes G. G.**, On the effect of internal friction of fluids on the motion of pendulums, *Trans. Camb. Phil. Soc.* 9 (2) (1851) 8–106.
5. **Rosenhead L.** (Ed.), *Laminar boundary layers*, Oxford University Press, Oxford (UK), 1963.
6. **Ray M.**, Vibration of an infinite elliptic cylinder in a viscous liquid, *Z. Angew. Math. Mech.* 16 (2) (1936) 99–108.
7. **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.
8. **Tanahashi T.**, Force acting on an oscillating cylinder in incompressible viscous fluid, *Keio Eng. Rep.* 25 (11) (1972) 129–140.
9. **Landau L. D., Lifshitz E. M.**, *Course of theoretical physics*, in 10 Vols. Vol. 6. Fluid Mechanics, Pergamon Press, Oxford, UK, 1959.
10. **Ricci A., Giuri E.**, Fluid Structure Interaction (FSI) analysis of microcantilevers vibrating in fluid environment, *Proc. Europ. COMSOL Conf.*, March 30, 2009. Milan, Italy (2009) 1–11.
11. **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.
12. **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.
13. **Guz A. N.**, *Динамика сжимаемой вязкой жидкости [Dynamics of compressible viscous fluid]*, A.S.K. Publishing, Kiev, 1998 (in Russian).
14. **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).
15. **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 (in Russian).
16. **Gradshteyn I. S., Ryzhik I. M.**, *Table of integrals, series, and products*; Edited by D. Zwillinger and V. Moll, Academic Press, Elsevier Inc., New York, 2014.

17. **Fedoryuk M. V.**, Asimptotika: integraly i ryady [Asymptotics: Integrals and series]. Moscow, Nauka Publishing., 1987 (in Russian).
18. **Pogorelov A. V.**, Differential geometry, P. Noordhoff N. V., Groningen, Netherlands, 1954.
19. **Troesch A. W., Kim S. K.**, Hydrodynamic forces acting on cylinders oscillating at small amplitudes, J. Fluids Struct. 5 (1) (1991) 113–126.
20. **Bearman P. W., Downie M. J., Graham J. M. R., Obasaju E. D.**, Forces on cylinders in viscous oscillatory flow at low Keulegan–Carpenter numbers, J. Fluid Mech. 154 (May) (1985) 337–356.
21. **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 (in Russian).
22. **Mikhlin S. G.**, Mathematical physics: An advanced course, North-Holland Pub. Co., Amsterdam, 1970.
23. **Lifanov I. K.**, Osobyie integralnyye uravneniya i metody ikh chislennogo resheniya [Special integral equations and methods for their numerical solution], MAKS Press, Moscow, 2006 (in Russian).
24. **Lavrent'ev M. A., Shabat B. V.**, Metody teorii funktsij kompleksnogo peremennogo [Methods of the theory of functions of complex variable], Nauka Publishing, Moscow, 1973 (in Russian).
25. **Kochin N. E., Kibel' I. A., Roze N. V.**, Theoretical hydromechanics, Vol. 1, Interscience Publ., New York, 1964.
26. **Meleshko I. N., Lasyi P. G., Dovga Yu. A.**, Approximate calculation method for integrals with logarithmic peculiarity of special type, Science & Technique. (3) (2012) 47–50 (in Russian).

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

ORCID: 0009-0001-6193-5083

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

ORCID: 0009-0004-3383-7613

СОРОКИН Вадим Николаевич – старший преподаватель кафедры математики Санкт-Петербургского государственного морского технического университета, Санкт-Петербург, Россия.

190008, Россия, г. Санкт-Петербург, Лоцманская ул., 3

sorokin_v_n@mail.ru

ORCID: 0009-0000-2883-2763

THE AUTHORS

AFANASOV Evgeny N.

LLC "Evolution Marine Digital"

4-3 Alexandrovsky Park, St. Petersburg, 197198, Russia

zhenya.afanasov@yandex.ru

ORCID: 0009-0001-6193-5083

KADYROV Sergey G.

State Marine Technical University

3 Lotsmanskaya St., St. Petersburg, 190008, Russia

skadyrov@gmail.com

ORCID: 0009-0004-3383-7613



SOROKIN Vadim N.

State Marine Technical University

3 Lotsmanskaya St., St. Petersburg, 190008, Russia

sorokin_v_n@mail.ru

ORCID: 0009-0000-2883-2763

*Статья поступила в редакцию 09.04.2024. Одобрена после рецензирования 17.04.2024.
Принята 17.04.2024.*

Received 09.04.2024. Approved after reviewing 17.04.2024. Accepted 17.04.2024.

Научная статья

УДК 539.3


DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17312>

АЛГОРИТМ ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ДЛЯ СВЯЗАННЫХ ЗАДАЧ ЭЛЕКТРОУПРУГОСТИ

А. Д. Новокшенов , И. Абдулин, Д. В. Вершинин

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

 novoksh_ad@spbstu.ru

Аннотация. Исследована проблема применения топологической оптимизации к упругим деформируемым телам, находящимся в условиях воздействия связанных электрических и механических полей. Основная задача состояла в оптимизации распределения электрических и механических свойств материала в заданной области с учетом ограничения на итоговый объем конструкции. Сформулирован и реализован алгоритм топологической оптимизации (в виде программного кода на языке Python) для тел, находящихся под действием связанных электрических и механических полей. Алгоритм включал в себя решение связанной задачи электроупругости с помощью метода конечных элементов, анализ производных целевой функции и оптимизацию двойственным методом в рамках метода скользящих асимптот. Алгоритм был опробован в численных экспериментах на задаче оптимизации пьезоэлектрического актуатора, помещенного в однородное либо в линейно-распределенное электрические поля. В итоге получены распределения механических и электрических свойств для различных значений коэффициента жесткости.

Ключевые слова: топологическая оптимизация, метод конечных элементов, метод скользящих асимптот, пьезоэлектрический актуатор

Финансирование: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-71-00108, <https://rscf.ru/project/22-71-00108/>.

Для цитирования: Новокшенов А. Д., Абдулин И., Вершинин Д. В. Алгоритм топологической оптимизации для связанных задач электроупругости // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 134–147. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17312>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17312>

A TOPOLOGY OPTIMIZATION ALGORITHM FOR ELECTROELASTICITY COUPLED PROBLEMS

A. D. Novokshenov , I. Abdulin, D. V. Vershinin

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

 novoksh_ad@spbstu.ru

Abstract. A problem of applying topology optimization to elastic deformable bodies exposed to coupled electric and mechanical fields has been studied. The main goal was to find the optimal distribution of electric and mechanical properties in the given area, taking into account restrictions on the final volume of the structure. A topology optimization algorithm was formulated and implemented (as program code in Python) for bodies under the action of the coupled electric and mechanical fields. The algorithm included solving the coupled electroelasticity problem using the finite element method, analyzing derivatives of the objective function,



and optimizing by the dual procedure within the method of moving asymptotes. The algorithm was tested in numerical experiments on the optimization problem of a piezoelectric actuator exposed to uniform or linearly distributed electric fields. As a result, the distributions of mechanical and electrical properties were obtained for various values of the stiffness coefficient.

Keywords: topology optimization, finite element method, method of moving asymptotes, piezoelectric actuator

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 22-71-00108), <https://rscf.ru/project/22-71-00108/>

For citation: Novokshenov A. D., Abdulin I., Vershinin D. V., A topology optimization algorithm for electroelasticity coupled problems, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 134–147. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17312>

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

Введение

Области структурной и топологической оптимизации (ТО) имеют глубокие корни исторического развития. Так, еще Ж. Л. Лагранжем была решена задача оптимизации веса колонны, к свободному концу которой была приложена сжимающая сила [1]. Одна из первых работ по структурной оптимизации была написана Э. Мичеллом в 1904 г. [2]. С развитием численных методов, в частности метода конечных элементов (МКЭ) в 1960-х гг., началось активное развитие структурной, в том числе топологической, оптимизации [3]. В 1980-е гг. на их основе были разработаны законченные теории, широко представленные в работах М. Бендсоу [4, 5].

В научных публикациях можно найти множество методов для анализа и улучшения производительности пьезоэлектрических структур по критериям размера и геометрии [6 – 9], по критериям структуры и количества слоев [10], оптимизация по субпараметрам [11 – 13]. В ходе развития методов ТО они применялись для различных областей физики [14, 15], включая пьезоэлектричество. При введении корректных целевых функций и новых параметров удалось создать алгоритмы для задач оптимизации пьезоактуаторов [16, 17], датчиков [18] и накопителей энергии [19 – 21]. Также существуют различные модификации этих методов, например, с учетом ограничения по механическим напряжениям [22].

В ранних работах для решения задачи ТО использовался метод гомогенизации [23, 24]. В последующие годы были представлены другие подходы: метод пенализации для твердого изотропного тела (*англ.* Solid Isotropic Material with Penalization (SIMP)) [25], метод двунаправленной эволюционной оптимизации конструкций (*англ.* Bi-directional Evolutionary Structural Optimization (BESO)) [26] и метод фиксации уровня (*англ.* Level-Set Method (LSM)) [27].

В ходе анализа публикаций выявлено, что существующие алгоритмы топологической оптимизации можно разделить на три класса:

- основанные на критерии оптимальности (эвристические);
- основанные на анализе производных (методы математического программирования);
- генетические алгоритмы топологической оптимизации.

Одним из наиболее универсальных и стабильных методов, используемых авторами при оптимизации конструкций, является метод скользящих асимптот (*англ.* Method of Moving Asymptotes (ММА)) [28], поэтому именно он был выбран нами в качестве основного алгоритма оптимизации.

В настоящей работе на основе анализа публикаций сформулирован и представлен алгоритм решения задачи топологической оптимизации для связанной задачи электроупругости.

Алгоритм основан на методе скользящих асимптот, конечно-элементном решении связанной задачи электроупругости и параметризации свойства материала с помощью модифицированного SIMP-метода. Алгоритм реализован на языке Python и опробован на задаче оптимизации пьезоэлектрического актуатора для случая постоянного электрического поля.

Топологическая оптимизация

Топологическая оптимизация – это математический метод, который позволяет получить оптимальное распределение материала в пределах заданного пространства при заданных конфигурации внешних нагрузок, граничных условий и ограничениях с целью достижения максимальной производительности системы.

Наиболее типичной задачей топологической оптимизации является минимизация податливости конструкции. В математическом отношении она эквивалентна минимизации работы внешних сил [5], т. е.

$$\min_{\mathbf{u} \in \mathbf{U}} A^{ex}(\mathbf{u}) \quad (1)$$

при заданных ограничениях:

$$\begin{aligned} A^{ex}(\delta \mathbf{u}) &= \delta(\rho_b \psi(\varepsilon(\mathbf{u}))), \forall \delta \mathbf{u} \in \mathbf{U}, \\ V &\leq \alpha V_0, 0 < \alpha < 1, \end{aligned} \quad (2)$$

где $A^{ex}(\delta \mathbf{u})$ – работа внешних сил на достигнутых перемещениях; $\psi(\varepsilon(\mathbf{u}))$ – плотность свободной энергии; $\delta \mathbf{u}$ – возможные перемещения; \mathbf{U} – допустимые перемещения; ρ_b – плотность тела; V, V_0 – конечный и начальный объемы конструкции; α – доля конечного материала.

Первое ограничение в формулах (2) – условие равновесия в вариационной форме.

Данную задачу обычно решают с помощью дискретизации области и использования МКЭ. Поэтому необходимо переформулировать задачу для соответствующей конечно-элементной постановки, а именно –

$$\min_{\mathbf{u} \in \mathbf{U}} \mathbf{f}^T \mathbf{u} \quad (3)$$

при следующих ограничениях:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}(E_e) \mathbf{u} &= \mathbf{f}, E_e \in E_{per}, \\ \mathbf{K}(E_e) &= \sum_{e=1}^N \mathbf{K}_e(E_e), \end{aligned} \quad (4)$$

$$\sum_{e=1}^N \rho_e v_e = V = \alpha V_0, 0 < \alpha < 1,$$

где \mathbf{f} – столбец сил; \mathbf{u} – столбец перемещений; \mathbf{K} – матрица жесткости системы; v_e – объем конечного элемента с номером e ; ρ_e, E_e – плотность и модуль Юнга конечного элемента с номером e ; E_{per} – допустимые значения модуля Юнга.

В качестве инструмента для решения данной задачи используется метод скользящих асимптот (ММА).

Алгоритм решения связанной задачи электроупругости (СЗЭУ)

Определяющие уравнения для СЗЭУ. Указанные соотношения для линейной СЗЭУ для пьезоэлектрического материала, без учета температурного эффекта, можно записать в следующей форме [29]:

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= \mathbf{c}^E \mathbf{S} - \mathbf{e}^T \mathbf{E}, \\ \mathbf{D} &= \mathbf{e} \mathbf{S} + \boldsymbol{\varepsilon}^S \mathbf{E}, \end{aligned} \quad (5)$$

где \mathbf{T} – вектор механических напряжений; \mathbf{S} – вектор механических деформаций; \mathbf{E} – вектор напряженности электрического поля; \mathbf{D} – вектор электрического смещения; \mathbf{c}^E – матрица жесткости при постоянной напряженности электрического поля \mathbf{E} ; $\boldsymbol{\varepsilon}^S$ – матрица

диэлектрической проницаемости при постоянных деформациях \mathbf{S} ; \mathbf{e} – матрица пьезоэлектрических коэффициентов связи; верхний индекс T означает транспонирование.

Напряженность электрического поля \mathbf{E} определяется соотношением

$$\mathbf{E} = - \text{grad}\phi \tag{6}$$

где ϕ – электрический потенциал.

Для представленной в данной работе модели рассматривается пьезоэлектрический материал класса тетрагональных кристаллов [30], обладающий ортотропной анизотропией. Этот класс включает большую часть пьезоэлектрических материалов, в частности хорошо известные материалы, например цирконат-титанат свинца $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$ (PZT).

С учетом указанного выше, тензор механической жесткости \mathbf{c}^E , пьезоэлектрическая матрица \mathbf{e}^T и диэлектрическая проницаемость $\boldsymbol{\varepsilon}^S$ для полного трехмерного случая имеют следующий вид:

$$\mathbf{c}^E = \begin{pmatrix} c_{11}^E & c_{12}^E & c_{13}^E & 0 & 0 & 0 \\ c_{12}^E & c_{11}^E & c_{13}^E & 0 & 0 & 0 \\ c_{13}^E & c_{13}^E & c_{33}^E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44}^E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44}^E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66}^E \end{pmatrix}, \mathbf{e}^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{7}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}^S = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11}^S & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{11}^S & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33}^S \end{pmatrix}.$$

Далее рассмотрим пластину, состоящую из пьезоэлектрического материала, распределенного между двумя электродами (рис. 1).

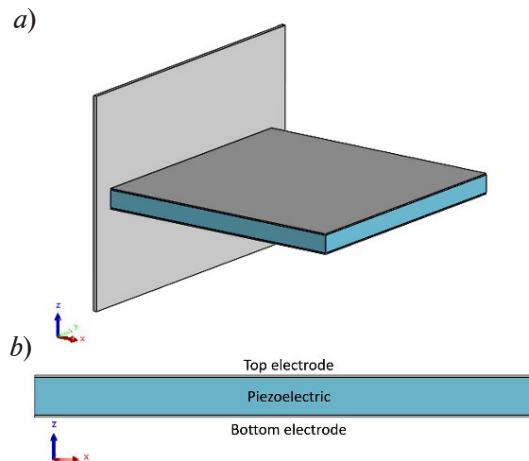


Рис. 1. Изображения пластины из пьезоэлектрического материала (Piezoelectric) с верхним (Top) и нижним (Bottom) электродами (electrode) в изометрическом виде (a) и виде сбоку (b)

Исходя из конфигурации рассматриваемой системы, целесообразно сделать следующие предположения [31]:

- отношение длины или ширины пластины к ее толщине должно быть менее 0,1;
- перемещения и нагрузки в системе могут возникать только в плоскости пластины;
- толщина электродов пренебрежимо мала, по сравнению с толщиной пластины;
- механическая часть рассматриваемой задачи – линейная;
- электроды идеально проводят ток;

вектор пьезоэлектрической поляризации направлен перпендикулярно плоскости пластины (вдоль оси OZ);

значение потенциала φ на нижнем электроде пластины полагается равным нулю;

электрическое поле \mathbf{E} вдоль толщины пластины (в направлении оси OZ) является однородным;

электрический потенциал φ вдоль толщины пластины (в направлении оси OZ) следует линейному закону.

Первые два предположения позволяют использовать постановку для плоской напряженной задачи теории упругости. Предположение о малости толщины электродов позволяет пренебречь их влиянием на жесткость системы. Кроме того, при ориентации оси поляризации пьезоэлектрического материала вдоль направления OZ , его поведение в плоскости оказывается изотропным. Более того, в таком случае единственное воздействие на материал будет оказывать электрическое поле в направлении OZ .

Таким образом, сокращенная (2D) форма пьезоэлектрического определяющего уравнения может быть записана в следующем виде [7]:

$$\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ D_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11}^* & c_{12}^* & 0 & -e_{31}^* \\ c_{12}^* & c_{12}^* & 0 & -e_{31}^* \\ 0 & 0 & c_{33}^* & 0 \\ c_{31}^* & c_{31}^* & 0 & \varepsilon_{33}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ E_3 \end{bmatrix}, \quad (8)$$

где компоненты матрицы можно выразить через представленные ранее:

$$\begin{aligned} c_{11}^* &= c_{11}^E - \frac{(c_{13}^E)^2}{c_{33}^E}, \quad c_{12}^* = c_{12}^E - \frac{(c_{13}^E)^2}{c_{33}^E}, \quad c_{33}^* = c_{66}^E; \\ e_{31}^* &= e_{31} - e_{33} \frac{c_{13}^E}{c_{33}^E}, \quad \varepsilon_{33}^* = \varepsilon_{33}^S + \frac{(e_{33})^2}{c_{33}^E}. \end{aligned} \quad (9)$$

Определяющее соотношение (8) используется для последующего конечно-элементного моделирования системы.

Конечно-элементная модель системы. Для конечно-элементного моделирования пьезоэлектрической пластины использовалось разбиение области на плоские прямоугольные линейные элементы с двумя гауссовыми точками интегрирования.

Вектор деформаций элемента может быть представлен как

$$\mathbf{S} = \mathbf{B}_u \mathbf{U}, \quad (10)$$

где \mathbf{B}_u – матрица частных производных для вычисления вектора деформаций.

Напряженность электрического поля в общем случае является векторной величиной, вычисляемой как градиент электрического потенциала по формуле (6). Однако последние два предположения о характере электрического поля и ориентация пьезоэлектрического материала (см. выше) дают возможность свести рассмотрение напряженности поля к скалярной величине – ее проекции на ось OZ . Тогда величина напряженности электрического поля вычисляется как

$$E = -B_\varphi \varphi, \quad B_\varphi = \frac{1}{h}, \quad (11)$$

где h – толщина пластины.

Далее используем вариационный принцип Гамильтона без учета диссипативных сил в системе; при этом можем записать линейное дифференциальное уравнение для одного элемента в матричной форме [29]:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{m} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{\mathbf{u}} \\ \ddot{\varphi} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{k}_{uu} & \mathbf{k}_{u\varphi} \\ \mathbf{k}_{\varphi u} & -\mathbf{k}_{\varphi\varphi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix}, \quad (12)$$



где \mathbf{m} – матрица инерционных коэффициентов; \mathbf{k}_{uu} – локальная матрица жесткости; \mathbf{f} – вектор внешнего механического воздействия; q – электрический заряд; $\mathbf{k}_{u\varphi}$ – матрица пьезоэлектрической связи.

Матрица $\mathbf{k}_{u\varphi}$ вычисляется по формуле

$$\mathbf{k}_{u\varphi} = h \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \mathbf{e}^T \mathbf{B}_{\varphi} |J| d\xi d\eta, \quad (13)$$

где ξ, η – локальные координаты элемента; J – Якобиан элемента.

В соответствии с алгоритмом МКЭ, локальные матрицы и векторы нагрузок должны быть собраны в глобальные, после чего можем записать уравнение для всей рассматриваемой области:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{M} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{\mathbf{U}} \\ \ddot{\Phi} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{u\varphi} \\ \mathbf{K}_{\varphi u} & -\mathbf{K}_{\varphi\varphi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U} \\ \Phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{Q} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Будем рассматривать квазистатическую задачу о нажимном механизме под действием внешнего электрического поля. Такая постановка дает нулевые производные величин по времени. Кроме того, предполагается, что внешний электрический заряд в системе отсутствует ($\mathbf{Q} = 0$). Такая постановка задачи приводит нас к следующей системе уравнений для МКЭ:

$$\mathbf{K}_{uu} \mathbf{U} + \mathbf{K}_{u\varphi} \Phi = \mathbf{F}. \quad (15)$$

Эта система используется для вычисления поля перемещений под действием внешнего электрического поля. Теперь, после вывода уравнения связанной задачи для МКЭ, мы можем его использовать, чтобы перейти к параметризации этой задачи для топологической оптимизации.

Схема интерполяции пьезоэлектрического материала. В данной работе для интерполяции указанного материала используется расширение схемы SIMP, для которой необходимы следующие зависимости локальных матриц от фиктивной плотности и поляризации [31]:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_{uu}(\rho) &= (E_{\min} + \rho^{p_{uu}} (E_0 - E_{\min})) \mathbf{k}_{uu}^0, \\ \mathbf{k}_{u\varphi}(\rho, P) &= (e_{\min} + \rho^{p_{u\varphi}} (e_0 - e_{\min})) (2P - 1)^{p_P} \mathbf{k}_{u\varphi}^0, \end{aligned} \quad (16)$$

где E_0, e_0 – числа, используемые для определения исходных характеристик материала элемента, $E_0 = e_0 = 1$; ρ – фиктивная плотность материала элемента (может принимать значения от 0 до 1); P – переменная поляризации, определяющая направление поляризации пьезоэлектрического материала (принимает значения от 0 до 1); $p_{uu}, p_{u\varphi}, p_P$ – штрафные факторы для жесткости, пьезоэлектрической связи и поляризации, соответственно; E_{\min}, e_{\min} – малые числа для определения минимально возможных значений для жесткости и коэффициента пьезоэлектрической связи.

Наличие малых чисел E_{\min} и e_{\min} необходимо для устранения численных неопределенностей, возникающих при итеративном процессе оптимизации.

Представленная в формуле (16) схема интерполяции известна как PEMP-P (piezoelectric material with penalization and polarization) и была представлена в работе М. Кёгля и Е. Сильвы в 2005 году [25], посвященной оптимизации адаптивных материалов и, в частности, пьезоэлектрических пластин.

Переменные поляризации P отражают поведение материала при наличии электростатического поля: при P от 0 до 0,5 материал под действием поля сжимается, а при P от 0,5 до 1,0 – расширяется.

Постановка задачи для пьезоактуатора. Рассмотрим задачу топологической оптимизации электроактуатора (рис.2). Исходная конструкция представляет собой квадратную пьезоэлектрическую пластину (PE.-C. Plate) (рис. 2, см. также подраздел «Конечно-элементная модель системы»), левый конец которой закреплен по всем степеням свободы. Под действием электрического поля материал расширяется либо сжимается, в зависимости от его поляризации.

Цель проводимой оптимизации – обеспечить максимальное перемещение или нажимное усилие, создаваемое средней точкой правой грани пластины при ограничении объема:

$V = 0,4 V_0$. Серая область (см. рис. 2 слева) показывает исходную область для последующей оптимизации.

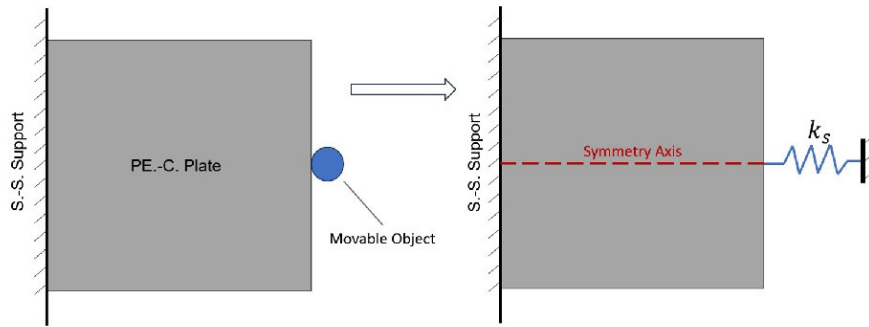


Рис. 2. Схема нажимного механизма к постановке задачи:
 S.-S. Support – консольные закрепления; PE.-C. Plate – пьезоэлектрическая пластина;
 Movable Object – передвигаемый объект; Symmetry Axis – ось симметрии;
 k_s – жесткость пружины

Для моделирования взаимодействия нажимного механизма с перемещаемым объектом (Movable Object) к средней точке правой стороны присоединяется дополнительная пружина с жесткостью k_s :

$$k_s = K_s k_0, \quad (17)$$

где K_s – параметр, характеризующий силу взаимодействия с перемещаемым объектом; k_0 – наибольшее значение в матрице жесткости системы, т. е. $k_0 = \max K_{ij}$.

По изменению параметра K_s можно делать выбор: либо необходимо большее перемещение интересующей точки, либо приоритетным является создаваемое нажимное усилие. Например, при $K_s = 1,0$ $k_s = k_0$ (см. формулу (17)), и таким образом на оптимизированной топологии будет достигаться максимальное нажимное усилие. И наоборот, определяя малые значения для данного параметра, например $K_s = 0,01$, пластина будет оптимизирована соответствующим образом для обеспечения максимально возможного перемещения.

Следуя классическому подходу к решению задач оптимизации для податливых механизмов, изложенному в монографии [5], можем записать формулировку для данной задачи как минимизацию следующей целевой функции:

$$J = -\mathbf{L}^T \mathbf{U}, \quad (18)$$

при ограничениях вида

$$\begin{aligned} \sum_{e=1}^{N_e} \rho_e v_e &= V = \alpha V_0, \quad 0 < \alpha < 1, \\ 0 < \rho_e &\leq 1; \\ 0 < P_e &\leq 1, \end{aligned} \quad (19)$$

где \mathbf{L} – вектор (равен 1 у компоненты, которая соответствует степени свободы перемещений, нас интересующей, и равен 0 у всех других компонент); \mathbf{U} – вектор перемещений; ρ_e , v_e , P_e – плотность, объем и поляризация элемента с номером e .

Вычисление производных целевой функции. При использовании методов, основанных на градиентном спуске, к которым относится и метод скользящих асимптот (он применяется в данной работе), необходимо на каждой итерации процесса вычислять производные целевой функции по переменным оптимизации:

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial \rho_e} &= \frac{\partial}{\partial \rho_e} \left[-\mathbf{L}^T \mathbf{U} + \Lambda^T (\mathbf{K}_{uu} \mathbf{U} + \mathbf{K}_{u\phi} \Phi - \mathbf{F}) \right] = \\ &= \frac{\partial}{\partial \rho_e} \left[(-\mathbf{L}^T + \Lambda^T \mathbf{K}_{uu}) \mathbf{U} + \Lambda^T \mathbf{K}_{u\phi} \Phi - \Lambda^T \mathbf{F} \right]. \end{aligned} \quad (20)$$



Чтобы избежать вычисления производных целевой функции по перемещениям, применяют метод сопряженных векторов (adjoint method), при котором для нахождения значений производных необходимо решить дополнительную сопряженную задачу:

$$-L^T + \Lambda^T K_{uu} = 0, \quad (21)$$

где Λ^T – глобальный сопряженный вектор, $\Lambda^T = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{ndof}]^T$.

С помощью Λ^T находят производные целевой функции:

$$\frac{\partial J}{\partial \rho_e} = \lambda_e^T \frac{\partial \mathbf{k}_{uu}}{\partial \rho_e} \mathbf{u}_e + \lambda_e^T \frac{\partial \mathbf{k}_{u\varphi}}{\partial \rho_e} \varphi_e, \quad (22)$$

где λ_e^T – элементный сопряженный вектор (состоит из компонент λ_i сопряженного вектора Λ^T , принадлежащих элементу с номером e); \mathbf{u}_e – вектор перемещений, который состоит из перемещений узлов элемента с номером e .

Используем аналогичную процедуру и записываем производные целевой функции по поляризациям P_e :

$$\frac{\partial J}{\partial P_e} = \lambda_e^T \frac{\partial \mathbf{k}_{u\varphi}}{\partial P_e} \varphi_e. \quad (23)$$

Производные элементных матриц жесткости и пьезоэлектрической связи вычисляются путем непосредственного дифференцирования выражений (16):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{k}_{uu}}{\partial \rho_e} &= p_{uu} (E_0 - E_{\min}) \rho_e^{(p_{uu}-1)} \mathbf{k}_{uu}^0, \\ \frac{\partial \mathbf{k}_{u\varphi}}{\partial \rho_e} &= p_{u\varphi} (e_0 - e_{\min}) \rho_e^{(p_{u\varphi}-1)} (2P_e - 1)^{p_p} \mathbf{k}_{u\varphi}^0, \\ \frac{\partial \mathbf{k}_{u\varphi}}{\partial P_e} &= 2p_p (e_0 - e_{\min}) (2P_e - 1)^{(p_p-1)} \rho_e^{p_{u\varphi}} \mathbf{k}_{u\varphi}^0. \end{aligned} \quad (24)$$

После нахождения выражений для вычисления производных, их можно использовать в ходе решения оптимизационной задачи методом скользящих асимптот.

Программная реализация алгоритма. Построенный алгоритм топологической оптимизации для связанной задачи электроупругости, учитывающий распределение плотности пьезоэлектрического материала, а также его поляризации состоит из следующих шагов.

Шаг 1. Изменение всех проектных переменных (фиктивных плотностей), для удовлетворения ограничения на объемную долю.

Шаг 2. Конечно-элементный расчет напряженно-деформированного состояния пластины под действием электрического поля.

Шаг 3. Решение сопряженной задачи.

Шаг 4. Вычисление производных целевой функции по переменным проектирования (плотностям и поляризации).

Шаг 5. Построение выпуклой аппроксимации функции, нахождение минимума через двойственную функцию (внутренний цикл метода скользящих асимптот).

Шаг 6. Обновление вектора проектных переменных (найденное решение – следующий шаг точки аппроксимации).

Шаг 7. Проверка на сходимость. При отсутствии сходимости необходим возврат к Шагу 2.

Представленный алгоритм был реализован на языке Python. Был написан конечно-элементный решатель для решения связанной задачи электроупругости, а также модуль вычисления производных. Разработанные модули были интегрированы с алгоритмом метода скользящих асимптот, находящимся в открытом доступе.

Тестирование разработанного алгоритма

Для тестирования алгоритма были рассмотрены два случая с различными распределениями напряженности электрических полей: однородное и линейное вдоль оси OX .

Случай однородного электрического поля. В результате задания на правой и левой границах пластины одинаковых значений потенциала получено однородное распределение поля.

На рис. 3 представлены полученные результаты распределения плотности материала и его поляризации для различных значений параметра K_s как в случае однородного электрического поля, так и в случае поля, линейного вдоль оси OX (см. следующий подраздел).

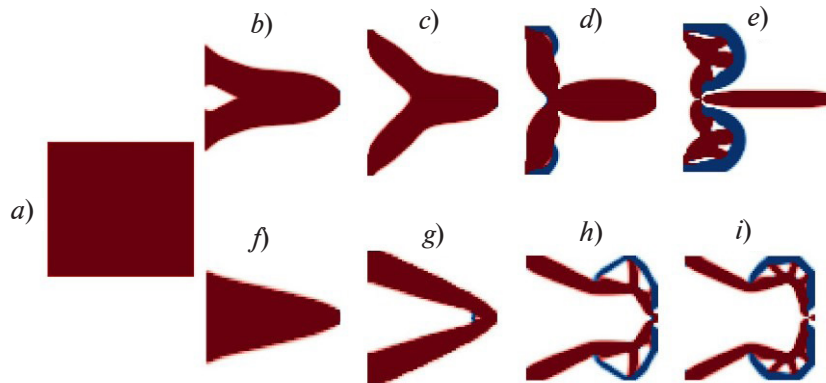


Рис. 3. Оптимизированные распределения плотности материала и его поляризации при различных значениях параметра K_s .

Материал помещен в однородное электрическое поле (homogenous field) ($b - e$) либо в поле, линейное (linear field) вдоль оси OX ($f - i$); a – исходная топология (initial topology); значения K_s : 1,0000 (b, f), 0,1000 (c, g), 0,0125 (d), 0,0150 (h), 0,0050 (e, i).

Расширение материала показано коричневым цветом, сжатие – синим

Таблица

Результаты оптимизации нажимного механизма для пьезоэлектрической пластины, помещенной в электрические поля двух видов (см. рис. 3)

Параметр K_s	Коэффициент усиления перемещений η	
	Однородное поле	Поле, линейное вдоль оси OX
1,0000	0,84	0,78
0,1000	1,04	0,93
0,0125	1,51	–
0,0150	–	1,84
0,0050	2,70	3,08

Примечание. K_s – параметр, характеризующий силу взаимодействия с перемещаемым объектом.

Кроме того, в таблице представлены коэффициенты усиления перемещения η , по сравнению с исходной системой. Видно, что с уменьшением жесткости пружины коэффициент усиления η растет, однако не стоит забывать, что нажимное усилие при этом снижается. При больших значениях параметра K_s оптимальное распределение материала обладает довольно простой односвязной структурой одной поляризации (рис. 3, b, c). При уменьшении этого параметра оптимальными становятся более сложные распределения материала с различными областями расширения и сжатия (рис. 3, d, e), что позволяет сделать конструкцию более гибкой и податливой.

Полученные результаты хорошо согласуются с результатами, представленными в статье [31]; это позволяет сделать вывод о корректности разработанного алгоритма.

Случай электрического поля с линейным распределением по оси OX . С целью решения задачи для условия неоднородного электрического поля, на левой границе пластины было задано нулевое значение потенциала, на правой – ненулевое. В результате расчета было обеспечено электрическое поле, линейно распределенное вдоль оси OX .



На рис. 3, $f-i$ представлены полученные результаты распределения плотности и поляризации для различных значений параметра K_s для случая поля, линейного вдоль оси OX .

Кроме того, в сводной таблице представлены для сравнения коэффициенты усиления перемещения η (также по сравнению с исходной системой).

Приведенное сравнение позволяет утверждать, что для данной постановки задачи результаты оптимизации оказываются весьма схожими с соответствующими результатами для однородного электрического поля. При больших K_s наблюдаются более однородные структуры (рис. 3, f, g), что обеспечивается увеличением силы нажатия. Малые значения параметра K_s приводят к более сложным распределениям материала с областями растяжения и сжатия (рис. 3, h, i), что обеспечивает увеличение коэффициента усиления перемещений η .

Заключение

Проведено исследование возможностей применения топологической оптимизации к телам, находящимся под действием связанных полей. На основе анализа научных публикаций сформулирован и реализован алгоритм в виде программного кода на языке Python для нахождения оптимального распределения механических и электрических свойств материала в постановке максимизации податливости конструкции или нажимного усилия в заданном направлении с ограничением на объем. Разработанный алгоритм включает решение связанной задачи электроупругости с помощью метода конечных элементов, параметризацию электрических и механических свойств материала с помощью модифицированного SIMP-метода, нахождение производных целевой функции по параметрам проектирования, построение выпуклой аппроксимации и решение двойственной задачи оптимизации в рамках метода скользящих асимптот. Алгоритм апробирован на решении задачи оптимизации пьезоэлектрической пластины с однородным электрическим полем. Получены также результаты для случая линейно-распределенного электрического поля. Показано, что при больших значениях коэффициента жесткости пружины наблюдаются более однородные структуры, чем обеспечивается увеличение силы нажатия.

Представленные результаты хорошо согласуются с приведенными в литературе. Результаты для линейно-распределенного электрического поля получены впервые.

Результаты работы могут быть использованы при проектировании различных микро-электромеханических систем элементов, однако для этого необходимо доработать алгоритм с точки зрения учета технологических ограничений. Одним из возможных вариантов в этом случае является добавление в алгоритм фильтра производных, а также фильтра проектных переменных.

Дальнейшую работу планируется направить на внедрение методов машинного обучения для ускорения процесса схождения при решении с помощью метода скользящих асимптот (ММА), а также для безытерационного решения задачи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Егоров Ю. В. О задаче Лагранжа об оптимальной форме колонны // Доклады Академии наук. 2003. Т. 392. № 5. С. 598–602.
2. Michell A. G. M. The limits of economy of material in frame structures // Philosophical Magazine. 1904. Series 6. Vol. 8. No. 47. November. Pp. 589–597.
3. Prager W., Taylor J. E. Problems of optimal structural design // Journal of Applied Mechanics. 1968. Vol. 35. No. 1. Pp. 102–106.
4. Bendsøe M. P., Díaz A. R., Kikuchi N. Topology and generalized layout optimization of elastic structures (Chapter) // Bendsøe M. P., Soares C. A. M. (Eds.) Topology design of structures, NATO ASI Book Series. Vol. 227. Dordrecht (Netherlands): Springer, 1993. Pp. 159–205.
5. Bendsøe M. P., Sigmund O. Topology optimization: Theory, methods, and applications. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2003. 370 p.
6. Schlinquer T., Mohand-Ousaid A., Rakotondrabe M. Optimal design of a unimorph piezoelectric cantilever devoted to energy harvesting to supply animal tracking devices // IFAC-PapersOnLine. 2017. Vol. 50. No. 1. Pp. 14600–14605.

7. **Bafumba Liseli J., Agnus J., Lutz P., Rakotondrabe M.** Optimal design of piezoelectric cantilevered actuators for charge-based self-sensing application // *Sensors*. 2019. Vol. 19. No. 11. P. 2582.
8. **Homayouni-Amlashi A., Mohand-Ousaid A., Rakotondrabe M.** Analytical modelling and optimization of a piezoelectric cantilever energy harvester with in-span attachment // *Micromachines*. 2020. Vol. 11. No. 6. P. 591.
9. **Muthalif A. G. A., Nordin N. H. D.** Optimal piezoelectric beam shape for single and broadband vibration energy harvesting: Modeling, simulation and experimental results // *Mechanical Systems and Signal Processing*. 2015. Vol. 54–55. March. Pp. 417–426.
10. **Rabenorosa K., Rakotondrabe M.** Performances analysis of piezoelectric cantilever based energy harvester devoted to mesoscale intra-body robot // *Proceedings of SPIE*. Vol. 9494: Next-Generation Robotics II; and Machine Intelligence and Bio-inspired Computation: Theory and Applications. Baltimore, US, 2016. Pp. 95–107.
11. **Rakotondrabe M.** Combining self-sensing with an unknown input-observer to estimate the displacement, the force and the state in piezoelectric cantilevered actuator // *American Control Conference*. 17–19 June, 2013. Washington, DC, USA. Pp. 4523–4530.
12. **Khadraoui S., Rakotondrabe M., Lutz P.** Optimal design of piezoelectric cantilevered actuators with guaranteed performances by using interval techniques // *IEEE/ASME Transactions on Mechatronics*. 2014. Vol. 19. No. 5. Pp. 1660–1668.
13. **Rakotondrabe M.** Performances inclusion for stable interval systems // *American Control Conference*. 29 June – 1 July 2011, San Francisco, California, USA. Pp. 4367–4372.
14. **Alexandersen J., Andreasen C. S.** A review of topology optimization for fluid-based problems // *Fluids*. 2020. Vol. 5. No. 1. P. 29.
15. **Deaton J. D., Grandhi R. V.** A survey of structural and multidisciplinary continuum topology optimization: post 2000 // *Structural and Multidisciplinary Optimization*. 2014. Vol. 49. No. 1. Pp. 1–38.
16. **Moretti M., Silva E. C.** Topology optimization of piezoelectric bimaterial actuators with velocity feedback control // *Frontiers in Mechanical Engineering*. 2019. Vol. 14. No. 2. Pp. 190–200.
17. **Goncalves J. F., De Leon D. M., Perondi E. A.** Simultaneous optimization of piezoelectric actuator topology and polarization // *Structural and Multidisciplinary Optimization*. 2018. Vol. 58. No. 3. Pp. 1139–1154.
18. **Menuzzi O., Fonseca J. S., Perondi E. A., Goncalves J. F., Padoin E., Silveira O. A.** Piezoelectric sensor location by the observability Gramian maximization using topology optimization // *Computational Applied Mathematics*. 2018. Vol. 37. No. 1. Pp. 237–252.
19. **Homayouni-Amlashi A., Mohand-Ousaid A., Rakotondrabe M.** Topology optimization of 2DOF piezoelectric plate energy harvester under external in-plane force // *Journal of Micro-Bio Robotics*. 2020. Vol. 16. 16 March. Pp. 1–13.
20. **Homayouni-Amlashi A., Mohand-Ousaid A., Rakotondrabe M.** Multidirectional piezoelectric plate energy harvesters designed by topology optimization algorithm // *IEEE Robotics and Automation Letters*. 2019. Vol. 5. No. 2. Pp. 462–469.
21. **Townsend S., Grigg S., Picelli R., Featherston C., Kim H. A.** Topology optimization of vibrational piezoelectric energy harvesters for structural health monitoring applications // *Journal of Intellectual Material Systems and Structures*. 2019. Vol. 30. No. 18–19. Pp. 2894–2907.
22. **Wein F., Kaltenbacher M., Stingl M.** Topology optimization of a cantilevered piezoelectric energy harvester using stress norm constraints // *Structural and Multidisciplinary Optimization*. 2013. Vol. 48. No. 1. Pp. 173–185.
23. **Suzuki K., Kikuchi N.** A homogenization method for shape and topology optimization // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 1991. Vol. 93. No. 3. Pp. 291–318.
24. **Bendsøe M. P., Sigmund O.** Optimization of structural topology, shape, and material. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1995. 370 p.
25. **Kögl M., Silva E. C. N.** Topology optimization of smart structures: Design of piezoelectric plate and shell actuators // *Smart Materials and Structures*. 2005. Vol. 14. No. 2. Pp. 387–399.
26. **De Almeida B. V.** Topology optimization of bimorph piezo-electric energy harvesters considering variable electrode location // *Smart Materials and Structures*. 2019. Vol. 28. No. 8. P. 085030.
27. **Chen S., Gonella S., Chen W., Liu W. K.** A level set approach for optimal design of smart energy harvesters // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2010. Vol. 199. No. 37–40. Pp. 2532–2543.



28. **Svanberg K.** The method of moving asymptotes – A new method for structural optimization // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 1987. Vol. 24. No. 2. Pp. 359 – 373.
29. **Lerch R.** Simulation of piezoelectric devices by two- and three-dimensional finite elements // *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*. 1990. Vol. 37. No. 3. Pp. 233–247.
30. **Piefort V.** Finite element modelling of piezoelectric active structures: PhD thesis, Bruxelles, Belgium: Universite Libre de Bruxelles, 2001. 125 p.
31. **Homayouni-Amlashi A., Schlinquer T., Mohand-Ousaid A., Rakotondrabe M.** 2D topology optimization MATLAB codes for piezoelectric actuators and energy harvesters // *Structural and Multidisciplinary Optimization*. 2020. Vol. 63. No. 2. Pp. 983–1014.

REFERENCES

1. **Egorov Yu. V.**, On the Lagrange problem about the optimal form for circular hollow columns, *Comptes Rendus Mécanique*. 331 (10) (2003) 699–704.
2. **Michell A. G. M.**, The limits of economy of material in frame structures, *Phil. Mag. Ser. 6*. 8 (47) (1904) 589–597.
3. **Prager W., Taylor J. E.**, Problems of optimal structural design, *J. Appl. Mech.* 35 (1) (1968) 102–106.
4. **Bendsøe M. P., Díaz A. R., Kikuchi N.**, Topology and generalized layout optimization of elastic structures, Chapter in book: Bendsøe M. P., Soares C. A. M. (Eds.), *Topology design of structures*, NATO ASI Book Ser. Vol. 227, Springer, Dordrecht (1993) 159–205.
5. **Bendsøe M. P., Sigmund O.**, *Topology optimization: Theory, methods, and applications*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2003.
6. **Schlinquer T., Mohand-Ousaid A., Rakotondrabe M.**, Optimal design of a unimorph piezoelectric cantilever devoted to energy harvesting to supply animal tracking devices, *IFAC-PapersOnLine*. 50 (1) (2017) 14600–14605.
7. **Bafumba Liseli J., Agnus J., Lutz P., Rakotondrabe M.**, Optimal design of piezoelectric cantilevered actuators for charge-based self-sensing application, *Sensors*. 19 (11) (2019) 2582.
8. **Homayouni-Amlashi A., Mohand-Ousaid A., Rakotondrabe M.**, Analytical modelling and optimization of a piezoelectric cantilever energy harvester with in-span attachment, *Micromachines*. 11 (6) (2020) 591.
9. **Muthalif A. G. A., Nordin N. H. D.**, Optimal piezoelectric beam shape for single and broadband vibration energy harvesting: Modeling, simulation and experimental results, *Mech. Syst. Signal Process.* 54–55 (March) (2015) 417–426.
10. **Rabenoroso K., Rakotondrabe M.**, Performances analysis of piezoelectric cantilever based energy harvester devoted to mesoscale intra-body robot, *Proc. SPIE. Vol. 9494: Next-Generation Robotics II; and Machine Intelligence and Bio-inspired Computation: Theory and Applications*. Baltimore, US, (2016) 95–107.
11. **Rakotondrabe M.**, Combining self-sensing with an unknown input-observer to estimate the displacement, the force and the state in piezoelectric cantilevered actuator, *American Control Conference*. 17–19 June, 2013, Washington, DC, USA. (2013) 4523–4530.
12. **Khadraoui S., Rakotondrabe M., Lutz P.**, Optimal design of piezoelectric cantilevered actuators with guaranteed performances by using interval techniques, *IEEE/ASME Trans. Mechatron.* 19 (5) (2014) 1660–1668.
13. **Rakotondrabe M.**, Performances inclusion for stable interval systems, *American Control Conference*. 29 June – 1 July 2011, San Francisco, California, USA (2011) 4367–4372.
14. **Alexandersen J., Andreasen C. S.**, A review of topology optimization for fluid-based problems, *Fluids*. 5 (1) (2020) 29.
15. **Deaton J. D., Grandhi R. V.**, A survey of structural and multidisciplinary continuum topology optimization: post 2000, *Struct. Multidiscip. Optim.* 49 (1) (2014) 1–38.
16. **Moretti M., Silva E. C.**, Topology optimization of piezoelectric bimaterial actuators with velocity feedback control, *Front. Mech. Eng.* 14 (2) (2019) 190–200.
17. **Goncalves J. F., De Leon D. M., Perondi E. A.**, Simultaneous optimization of piezoelectric actuator topology and polarization, *Struct. Multidiscip. Optim.* 58 (3) (2018) 1139–1154.

18. **Menuzzi O., Fonseca J.S., Perondi E.A., et al.**, Piezoelectric sensor location by the observability gramian maximization using topology optimization. *Comput. Appl. Math.* 37 (1) (2018) 237–252.
19. **Homayouni-Amlashi A., Mohand-Ousaid A., Rakotondrabe M.**, Topology optimization of 2DOF piezoelectric plate energy harvester under external in-plane force, *J. Micro-Bio Robot.* 16 (16 March) (2020) 1–13.
20. **Homayouni-Amlashi A., Mohand-Ousaid A., Rakotondrabe M.**, Multidirectional piezoelectric plate energy harvesters designed by topology optimization algorithm, *IEEE Robotics and Automation Letters.* 5 (2) (2019) 462–469.
21. **Townsend S., Grigg S., Picelli R., et al.**, Topology optimization of vibrational piezoelectric energy harvesters for structural health monitoring applications, *J. Intell. Mater. Syst. Struct.* 30 (18–19) (2019) 2894–2907.
22. **Wein F., Kaltenbacher M., Stingl M.**, Topology optimization of a cantilevered piezoelectric energy harvester using stress norm constraints, *Struct. Multidiscipl. Optim.* 48 (1) (2013) 173–185.
23. **Suzuki K., Kikuchi N.**, A homogenization method for shape and topology optimization, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 93 (3) (1991) 291–318.
24. **Bendsøe M. P., Sigmund O.**, Optimization of structural topology, shape, and material, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1995.
25. **Kögl M., Silva E. C. N.**, Topology optimization of smart structures: Design of piezoelectric plate and shell actuators, *Smart Mater. Struct.* 14 (2) (2005) 387–399.
26. **De Almeida B. V.**, Topology optimization of bimorph piezo-electric energy harvesters considering variable electrode location, *Smart. Mater. Struct.* 28 (8) (2019) 085030.
27. **Chen S., Gonella S., Chen W., Liu W. K.**, A level set approach for optimal design of smart energy harvesters, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 199 (37–40) (2010) 2532–2543.
28. **Svanberg K.**, The method of moving asymptotes – A new method for structural optimization, *Int. J. Numer. Meth. Eng.* 24 (2) (1987) 359–373.
29. **Lerch R.**, Simulation of piezoelectric devices by two- and three-dimensional finite elements, *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control.* 37 (3) (1990) 233–247.
30. **Piefort V.**, Finite element modelling of piezoelectric active structures: PhD thesis, Bruxelles, Belgium: Universite Libre de Bruxelles, 2001, 125 p.
31. **Homayouni-Amlashi A., Schlinquer T., Mohand-Ousaid A., Rakotondrabe M.**, 2D topology optimization MATLAB codes for piezoelectric actuators and energy harvesters, *Struct. Multidiscipl. Optim.* 63 (2) (2020) 983–1014.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

НОВОКШЕНОВ Алексей Дмитриевич – кандидат технических наук, доцент Высшей школы механики и процессов управления, старший научный сотрудник Центра компьютерного инжиниринга Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
novoksh_ad@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-5874-5994

АБДУЛИН Илья – инженер отдела кросс-отраслевых технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
abdulin.i.2001@gmail.com
ORCID: 0009-0008-6553-4077

ВЕРШИНИН Денис Вячеславович – инженер отдела кросс-отраслевых технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vershinindv42@gmail.com
ORCID: 0009-0004-9552-3433

**THE AUTHORS****NOVOKSHENOV Aleksei D.**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
novoksh_ad@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-5874-5994

ABDULIN Илья

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
abdulin.i.2001@gmail.com
ORCID: 0009-0008-6553-4077

VERSHININ Denis V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
vershinindv42@gmail.com
ORCID: 0009-0004-9552-3433

*Статья поступила в редакцию 08.04.2024. Одобрена после рецензирования 23.04.2024.
Принята 23.04.2024.*

Received 08.04.2024. Approved after reviewing 23.04.2024. Accepted 23.04.2024.

Original article

UDC 524.6.

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17313>

INDIVIDUAL BEHAVIOR OF GAS HYDRODYNAMICS FROM PAIRS OF ISOLATED GALAXIES IN INTERACTION

E. Teófilo-Salvador ✉

National Autonomous University of Mexico, Mexico

✉ mca.ts.eduardo2015@gmail.com

Abstract. The hydrodynamic behavior of the gas of a selected pair of interacting galaxies has been reviewed based on numerical simulation using Illustris and IllustrisTNG. 210 halos were identified visually, using the Explorer; but their number was reduced due to selection taking into account found distances, masses and particle emission conditions, then the halos were refined and received specific cuts using Python. Among them, 34% did not interact at all, due to asymmetries ranging from 18 to 74%. The pair with ID 473420-473421 turned out to be the best interacting pair, and it was most marked at $z = 1$ and 5. This sample provided more information about the behavior of the gas present, such as the formation of tidal tails, with a relative velocity of 9 to 213 km/s. The density fields were affected by distribution velocities and radial motion in galaxy interaction processes, the gas flow created transitions between the two disks in the radial velocity field, with longer jets in regions of cold gas compared to those of hot one.

Keywords: ID 473420-473421, pair of isolated galaxies, numerical simulation

Funding: The author thanks the National Council of Humanities, Sciences and Technologies of Mexico, for the financial support for the postdoctoral stay 2021–2022 with numbers 930457 and 2420881 for 2022–2023, and to the ESTL-UAEN.

For citation: Teófilo-Salvador E., Individual behavior of gas hydrodynamics from pairs of isolated galaxies in interaction, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 148–160. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17313>

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 524.6

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17313>

ИЗУЧЕНИЕ ПАР ИЗОЛИРОВАННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ГАЛАКТИК В АСПЕКТЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ГАЗА

Э. Теофило-Сальвадор ✉

Национальный автономный университет Мексики, г. Мехико, Мексика

✉ mca.ts.eduardo2015@gmail.com

Аннотация. В работе рассмотрено гидродинамическое поведение газа в выбранной паре изолированных галактик, основанное на численном моделировании Illustris и IllustrisTNG. Визуально в браузере Explorer было идентифицировано 210 ореолов, но их количество было уменьшено за счет выбора, учитывающего найденные расстояния, массы и условия выброса частиц; затем с помощью Python ореолы были доработаны и получили специфические разрезы. Среди них 34 % вообще не совершали взаимодействия ввиду наличия асимметрии (18 – 74%). Наилучшей взаимодействующей парой оказалась пара с идентификатором 473420-473421, причем она была лучше всего выражена при



значениях красного космологического смещения $z = 1$ и 5 . Выбранная пара позволила получить больше информации о поведении присутствующего газа, например он проявляется в образовании приливных хвостов после взаимодействия с относительной скоростью от 9 до 213 км/с. На поля плотности влияют скорости распределения газов и их радиальное движение в процессах взаимодействия галактик; поток газа создает переходы между двумя дисками в поле радиальных скоростей, причем с более длинными струями в областях холодного газа, по сравнению с таковыми в горячих областях.

Ключевые слова: ID 473420-473421, пара изолированных галактик, численное моделирование

Финансирование. Автор благодарит Национальный совет Мексики по гуманитарным наукам, естественным наукам и технологиям за финансовую поддержку пребывания в докторантуре в 2021–2022 гг. (№№ 930457 и 2420881 от 2022–2023).

Для цитирования: Теофило-Сальвадор Э. Изучение пар изолированных взаимодействующих галактик в аспекте гидродинамического поведения газа // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 148–160. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17313>

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

Introduction

The interaction of galaxies can occur as harassment, interaction, collision, fusion or cannibalism. Simulations have made it possible to describe these phenomena. The morphology and distribution of galaxy radial velocities are signs of recent interaction [1]. Gas-rich systems show star formation due to debris generated [2]. The presence of gas clouds and the density varies due to different coupling mechanisms such as intra clouds [3]. It was shown in Ref. [4] that cold gas inputted tend to smear the central metallicity of the galaxy, and M. Spavone et al. described in Ref. [5] that tidal encounters considerably removed the amount of mass from galaxies, and interaction and accretion mechanisms showed regions still being assembled. It was reported in Ref. [6] that gas mass flow altered the azimuth angle and became longer in directions aligned with the major and minor axes of the galaxies. Quantifying gas temperature, density, entropy, and cooling times is difficult, because entropy is sensitive to feedback energy injection, and is an indicator of gas cooling time [7].

Pairs of galaxies have been studied by many scientists. M. H. Hani et al. [8] analyzed 27,691 post-merger samples with $0 < z < 1$ (z is the cosmological redshift) uniformly distributed, obtaining star formation effects with redshift evolution. K. A. Blumenthal et al. [9] reported 446 pairs with $z = 0$, including star formation rate, galactic winds, metal enrichment, gas heating and cooling, black hole growth, and feedback. I. Wang et al. [10] applied CNN algorithms to report 6114 unique R -band galaxies with different orientations by classification into galaxy merger fractions.

R. Davé et al. [11] compared gas properties from the Simba, Eagle, and IllustrisTNG databases, based on cold interstellar gas modeling, with luminosity functions and gas mass ratios. These databases have been supported by codes for numerical simulations such as Enzo, Gadget, Flash, Athena, Ramses, Octo-Tiger, Gizmo or Arepo [12]. The Arepo code is more precise in the interactions between fast moving fluids and shocks such as gas, it ensures a better description due to mixing, of vorticity in curved shocks and a more efficient and realistic extraction of gas from the created substructures [13].

The simulations involve evolution over time and other elements; for example, the gas with dust is released more efficiently [14]. The condensation of metals in the gas phase forms dust grains that can reduce and induce a change in the cooling rate of the outer parts of the galaxy, this implies a change in active galactic nuclei, due to the change in the accretion rate [15]. J. S. Millard et al. [16] established that the evolution of the dust mass can generate a bias depending on the type of galaxies to be studied (satellite or central), leading to alterations in the surrounding gas.

The study of galaxy interaction has not been significant in statistical samples for large cosmological simulations [8], as even multiple physical processes can generate the same process asymmetry [17]. The behavior of the gas in the galactic interaction process is multicomponent, heterogeneous, irregular and discontinuous, due to morphology, propagation speed, travel speed, mass, density and distance, among other factors.

The goal of this research was to develop a simulation-based method for treating pairs of isolated galaxies interacting in the hydrodynamic gas behavior.

Methodology

Fig. 1 shows the methodological procedure designed to conduct the research.

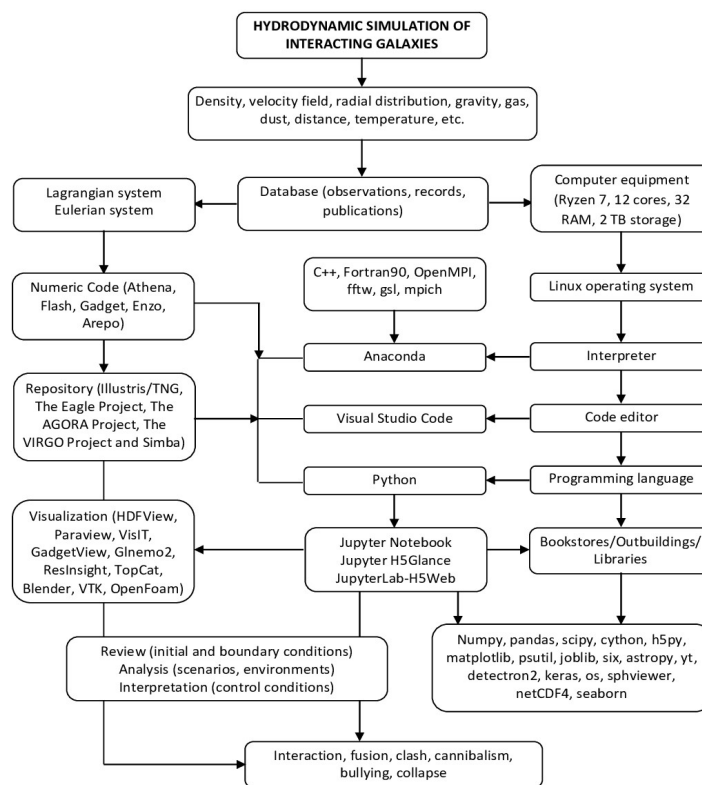


Fig. 1. Diagram of the methodology used (own elaboration)

Selection of galaxy pairs, processing and reduction. It started with the review of numerical codes [18]; an isolated galaxy was created with Enzo, Gadget-2 simulated a pair of interacting galaxies without the presence of gas and dust. To include the Arepo code approach, the IllustrisTNG database was used with 250 TB of data, including interactions ranging from 1 Gyr to less than 500 Myr [10]. Based on the Sublink merge tree methodology used in Ref. [8], in combination with the methodology used in Ref. [19], haloes were associated with their hosts and descendants, and at Jupyter-lab, haloes were identified with pairs of galaxies of similar masses, including interaction distance maxima.

For the visualization and interactive exploration of large data sets, such as those generated by simulations [20], the IllustrisTNG explore 2D and 3D interface was used, layers of different types of particles (gas, stars, dark matter and black holes) were superimposed. Free galaxies and satellite galaxies were taken into account, with massive haloes of $10^{12} M_{\odot}$ and the case of not containing dark matter were considered purely stellar clusters [21]. At 400 kpc/h, through visual identification, 210 haloes with uniform interaction were recognized, at $z = 0$, under criteria of morphology, gas displacement, formation of bridges and tidal tails.

Identifying pairs in filaments was avoided due to the dense areas of gas and dust. Galaxies with the presence of gas and halos with low star formation were selected to obtain average

temperatures of the order of 104 K [7]. Similar to classification made in Ref. [9], each image was visually classified as interacting or not, based on the presence of a near neighbor, perturbed disks, and/or tidal features. Subsequently, the mass was reduced from 10^{12} to $10^{10} M_{\odot}$.

Primary and secondary orbital motion was identified; with orbital decay, the pairs could interact or had interacted, so it was necessary to reduce the peripheral distance to 150 kpc. When considering the complete trajectories, samples that would not interact or that had had distant contact in the past were eliminated. To increase the reduction, it was inspected again and again, as some were in multiple subhaloes or were in the same group.

The sizes, distances, masses and their evolution over time were refined using Python. For the dataset of interest and the rendered images, 512 snapshots were generated and downloaded per galaxy, on average 19 GB per simulation review. The samples were no longer cut when central galaxies with satellites were detected, because they are not separated in the recorded observations [21].

The slices of interest were analyzed in Jupyter-lab and the snaps in Glnemo2 to identify interactive dynamic behavior, subsequently in VisIt and Paraview to detect variations or perceive attributes that were not observed in Glnemo2. The datasets and snapshots were also analyzed in HDFView.

Mechanics of pairs galaxies. The interaction speeds of $100 < V_{int} < 400$ km/s were discretized, with a similarity of masses and gas fraction greater than 20 %, in a high-velocity environment of almost frontal collision, and trajectories with traces of bridges or tails tidal [22].

In revising the interactions from $z = 0$ to $z = 10$, several pairs deconfigured the structures, causing a stretching of the field lines, and the vortex lines formed post-shock flows. These vortices were associated with tides, shear, and turbulence because they showed depletion and gas emissions [3, 23]. A normal, stationary alignment and a Mach number of 2 – 4 were needed for smooth interactions, which further reduced the initial samples. The post-shock wind was revised in prolonged interaction, generating a water hammer, the winds and jets aligned to generate a slowing of the flow patterns, this depended on the properties of the host galaxy.

Of the host galaxy, the circumgalactic neighborhood and the cosmic network were reviewed, the presence of disturbed or distorted filaments was tracked, to recognize the interaction force, such as the balance of forces of the tail or tidal bridges, defined as Q_{int} (with all masses as total mass [9]):

$$Q_{int} = \frac{F_{tidal} = \frac{M_n D_c}{R_{nc}^3}}{F_{bind} = \frac{M_c}{D_c^2}}, \quad (1)$$

where M_n is the mass of the neighboring galaxy; R_{nc} is the distance from the center of the galaxy to the neighboring one; M_c is the mass of the central galaxy; D_c is the diameter of the plant.

Under these criteria, the best pair that represented the interaction process was selected.

Hydrodynamics of the interacting gas. The equations of state and gravity were recognized, along with Poisson's equation, relaxation time, time to reach thermal equilibrium, and rate of energy change. The data sets were associated with the variables of the equations: conservation of mass, momentum and conservation of energy, which were of the following form:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2a)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \right) u^i + \frac{1}{\rho} \partial_j P^{ij} = g^i, \quad (2b)$$

$$\frac{3}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \right) \frac{T}{m} + \frac{1}{\rho} P^{ij} \partial_i u_j + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{q} = \frac{\varepsilon}{m}, \quad (2c)$$

where \mathbf{u} is the velocity of dark matter; P^{ij} is the pressure tensor; T is the temperature; \mathbf{q} is the heat flux; ε is the local warming rate.

Moreover, the velocity dispersion was taken to be 1D (for simplicity) [24].

The exclusion of current interactions was imposed in advance, and in those cases where

the distribution of gas in and around a satellite galaxy was confused or perturbed [13]. When analyzing gas, IllustrisTNG was considered to overproduce cold gas in massive galaxies and molecular gas in small ones [11].

Results and discussion

Samples of galaxy pairs. As in Ref. [25], the selection of pairs was sensitive to the criteria and methods used. For data analysis, even training with CNN has shown 72 % accuracy between interactions and noninteractions [10], resulting in 28 % uncertainty. As in Ref. [9], in 34% of cases, there were errors in visual identification, due to vision, interpretation and visualization, the errors had the following sources:

- i) finite resolution of the simulations;
- ii) the stellar material was not the best indicator of a tail tidal force;
- iii) the simulations instead of the observations;
- iv) in very large impacts, the tidal forces were not strong enough to generate visible bridges or tails;
- v) in cases of 1 Gyr the tide was partially noticeable, due to the evolution of the bridge or tail material that was deposited on the discs and could mix with the surrounding material.

The gas fraction ranged from 0.25 to 0.35, less than 10% of the paired samples contained no gas. The selected pairs had an asymmetry ranging from 18 to 74%, and only 26% reflected a symmetry being agree with that in Ref. [17]. A. B. Watts et al. described an asymmetry of more

Table 1

Positions and sizes of the pair of galaxies at different values of the redshift z

z	Position, ckpc/h			Size (particles)			
	x	y	z	Gas	Dark matter	Stars	Black holes
0.0	9796.38	31580.00	61031.80	111249	156742	32402	1
	9810.80	31577.40	61048.00	791	1724	12280	
0.5	51075.10	56805.90	41085.70	0	33	0	0
	51108.10	56944.60	40970.80		29		
1.0	63984.00	636.11	58526.30		30		
	64012.50	659.74	58565.70		29		
2.0	37898.40	42362.70	38639.50		23		
	22008.60	69636.30	14789.10	1932	7060	70	
3.0	24914.00	28079.20	36573.80	0	29	0	
	40989.50	34735.90	39956.60	992	1864	5	
4.0	3037.73	59471.70	64579.70	470	1388	8	
	3140.84	48911.40	63645.70	738	1089	5	
5.0	17824.60	47431.50	56736.60	15	21	0	
	17823.10	47399.80	56704.20	13	10		
6.0	40417.40	67385.70	35386.40	97	131	1	
	40401.40	67403.60	35880.20	44	112		
10	27507.70	54003.90	67587.70	38	44	0	
	28187.10	16769.50	53251.80	35	48	1	

Footnotes. 1. Here and in the other tables the data is presented for a pair of isolated interacting galaxies ID 473420-473421 (snapshots 99, 67, 50, 33, 25, 21, 17, 13 and 4). 2. For each value of z the numbers in the 1st and 2nd rows refer to galaxies ID 473420 and ID 473421, respectively.

Notation: ckpc/h is the comoving coordinate accepted in cosmology; where letter c means "comoving", kpc is kiloparsec, h is hour(s) in a cell, which is a spatial location within the periodic simulation domain of BoxSize.



Table 2

Masses, metallicity and star formation rates of the pair of galaxies at the redshift z

z	Mass, $10^{10} M_{\odot}/h$					Gas metallicity M_z/M_{total}	Star formation rate, M_{\odot}/yr
	Gas	Dark matter	Stars	Black holes	Wind		
0.0	11.374700	79.244700	2.254370	0.003639	0.001651	0.017736	24.549200
	0.087954	0.871610	0.806995	0.004752		0.011294	0.338937
0.5	0	0.016684	0	0		0	0
		0.014662					
1.0	0	0.015167	0	0		0	0
		0.014662					
2.0	0	0.011628	0	0		0.001747	0.089967
	0.209526	3.569360	0.006044				
3.0	0	0.014662	0	0	0	0	0
	0.111012	0.942391	0.000412				
4.0	0.051526	0.701737	0.000869	0		0.000568	0.009249
	0.079690	0.550570	0.000429				
5.0	0.001488	0.010617	0	0		0.001407	0.018829
	0.001333	0.005056					
6.0	0.010942	0.066230	0.000097	0		0.000660	0.018412
	0.004793	0.056624	0.000117				
10	0.003587	0.022245	0	0		0	0
	0.003486	0.024268	0.000128				0

Notations: M_{\odot}/yr , M_{\odot}/h are the solar mass by year and by hour in the cell (see notation to Table 1); M_z/M_{total} is the ratio of the mass of all metals M_z to total mass.

than 40% within a virial radius, with morphologies reminiscent the hydrodynamic interaction of gases.

Dynamics of interaction simulation. The gas flow generated a transition strip in the radial velocity field, with a velocity distribution dispersing between the two disks and towards the center of the galaxies. In regions with cold gas, defined trails and filaments, longer, larger and redder tidal tails, were identified that differed in past interactions compared to recent ones.

In perpendicular encounters, an irregular distribution of masses was obtained, with the rotational movement of the most massive galaxy predominating. By removing the gas from the parallel interaction simulations, slightly inclined orbits were identified, with compensation for energy, density and velocity of the particles. Velocity followed curved or parabolic orbits, higher masses generated lower velocities and vice versa. This allowed us to differentiate a local maximum in its relative velocity (pericenter) and a minimum in each apocenter [9].

Mechanics in the specific sample simulation. The pair ID 473420-473421 was the one that best represented the interaction; its parameters are listed in Tables 1 – 4.

According to the tables data, there is interaction of the galaxy pair at $z = 0.0$, 0.5 and 1.0 (current era, 5.216 Gyr, 7.925 Gyr). At $z = 2.0$, 3.0 and 4.0 they move away (10.519, 11.658 and 12.263 Gyr). At $z = 5.0$ and 6.0 there is interaction (12.626 and 12.871 Gyr ago), and they separate at $z = 10$ (13.071 Gyr ago), see Fig. 2.

Table 3

Speed of the pair of galaxies at the redshift z

z	Speed, km/s					
	x	y	z	Maximum	Dispersal	Max radial
0.0	-9.9233	325.0820	-81.7149	213.7140	124.4350	30.3153
	69.5782	325.0830	-76.3504	126.2480	73.1109	3.1939
0.5	18.1919	236.0840	113.0530	9.3480	5.3219	9.9155
	-20.1042	370.8730	106.8270	11.4675	5.9947	6.2147
1.0	113.9510	-154.9760	-156.2260	13.3961	6.5835	5.3254
	64.8812	-89.2324	-235.2910	10.7468	5.3715	7.8986
2.0	-91.6826	-58.4907	75.3331	14.1931	7.9692	2.9171
	-324.7330	213.6400	-16.7254	79.9984	49.7336	57.7372
3.0	-81.3137	162.9840	305.3210	12.3979	6.9828	10.2084
	-100.1590	44.0363	-91.9193	54.9958	40.0558	39.2967
4.0	6.9603	-108.6070	-45.8049	61.7656	36.9068	28.9783
	18.3043	85.7583	-151.3030	51.4435	29.4478	33.5619
5.0	49.0199	-46.2195	-157.8860	12.4697	7.5701	8.5875
	62.9138	-41.1166	-153.0230	13.8873	7.7348	7.8690
6.0	-88.5341	-11.9263	188.1560	28.0516	17.0778	10.5887
	-98.9697	-37.7205	127.6330	31.9846	18.8272	13.9484
10	-186.4820	57.2344	-18.4205	27.9581	16.0782	12.6381
	19.9795	28.3001	-2.7225	27.7100	15.6528	12.4080

Table 4

The stellar photometry and spin of the pair of galaxies at the redshift z

z	Spin projection, (kpc/h)·(km/s)			Stellar photometry, mag		
	x	y	z	U	B	R
0.0	-291.0730	2942.2300	1143.6600	-22.6033	-22.1590	-22.4746
	-4.2051	83.4657	51.8481	-19.2736	-19.2736	-20.1710
0.5	0.4490	0.1847	-4.5583	0	0	0
	0.0693	5.6761	2.3837			
1.0	-0.6634	-2.3124	-1.3589	0	0	0
	5.6909	-6.5446	-0.5885			
2.0	-0.6987	0.8323	4.3076	0	0	0
	-147.6000	43.1684	-8.8838			
3.0	-0.5921	-2.9726	-3.0945	0	0	0
	-84.5564	13.7292	-37.6379			
4.0	-18.8156	-4.8045	66.8842	-13.6737	-13.5620	-13.7512
	34.2060	-0.4913	22.9933			
5.0	0.4352	0.5800	-4.4037	0	0	0
	-2.4665	-0.7813	0.8567			
6.0	-1.7047	24.5405	-2.1670	-12.6724	-12.4701	-12.5300
	-1.0106	-2.3014	-2.7356			
10	-0.1994	-1.6702	-0.8099	-15.0174	-13.6546	-13.5246
	0.3973	-2.3438	-0.0715			

Footnotes. 1. Spin projections on the axes were computed for each as the weighted by mass sum of relative coordinates, multiplied by the relative velocity of all particles participating in the cell. 2. Mag units are taken as eight bands according to IllustrisTNG. Notations: U, B, R are ultraviolet, blue and red magnitudes.



The velocity pattern at $z = 0.0, 1.0$ and 5.0 was similar for both galaxies in the y and z directions, this reflected a more stable and balanced interaction. The maximum dispersion velocity was 124.35 and 73.11 km/s, respectively, for galaxies 473420 and 473421 at $z = 0$. The interaction resistance was very low of $\ln Q_{int} = 1.5$ for masses close to 10^{12} and 2.5 for 10^{10} , so only the most distant ones contributed to a small tidal field. For the hydrodynamic analysis, greater precision was confirmed when analyzing the interaction part of the particles and subsequently analyzing the hydrodynamic part [11].

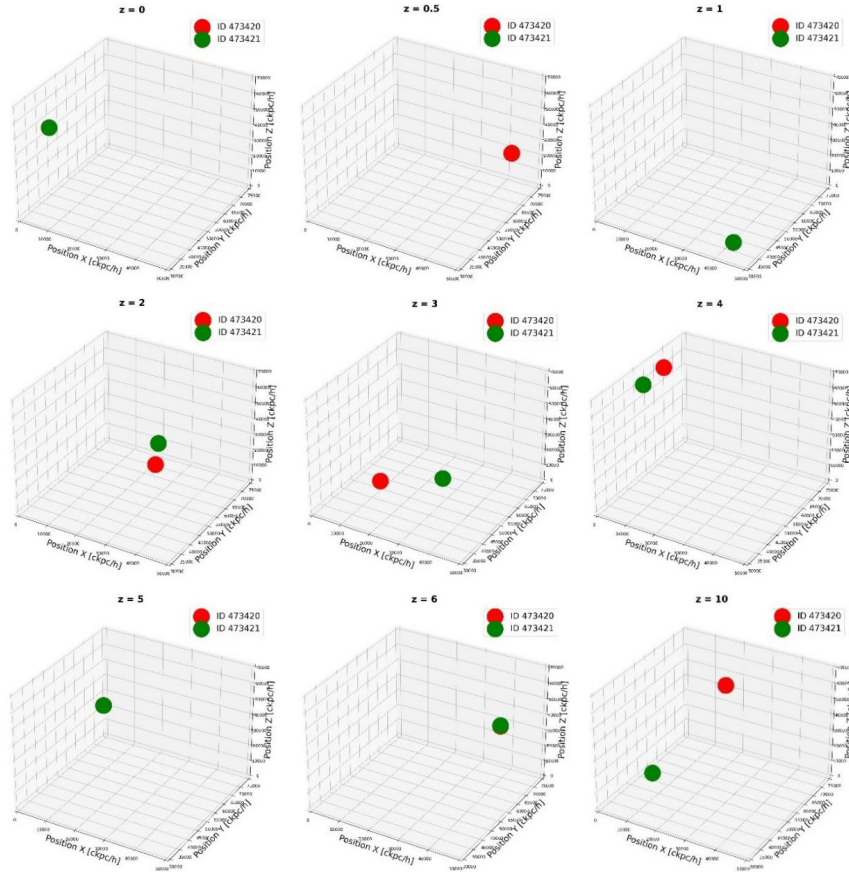


Fig. 2. Trajectory of snapshots 99, 67, 50, 33, 25, 21, 17, 13, 4 (own creation)

Gas hydrodynamics and the specific sample. Not all pairs contained gas, the halo finder did not associate gas particles despite the significant stellar masses. This represented 12 %, within the range of 7 % for Ref. [21]. Thus, gas averages were not appropriate for the interacting distributions [21]. Of the 300 snapshots examined, more than 60 % of the external gas had no effect on the internal one, the rebound caused changes in the relative speed, with small variations in angle and direction.

For the pair ID 473420-473421, the formation of tidal tails depended on the properties and geometry of the galaxies. The dominant metallicities produced massive star formation in the tidal tails, with strong interaction at $z = 1$ and 5 . The specific relative velocity was from 9.34 to 213.71 km/s from 0 to 13.071 Gyr. High speeds separated the dark matter from the hot gas and compressed it by rebound, for the formation of star-like bodies, according to Ref. [22]. The interaction decreased towards low mass regions, due to distorted morphologies.

Galaxy 473421, with fewer particles and a smaller disk, was dominated by dark matter, generating similar rotation curves at $z = 5$. Heterogeneous, discontinuous and dispersed interactions were part of the evolution [13]. In Fig. 3, dramatic morphological transformations are observed, with deformation and distribution of gas in the galaxies, framed with rounded edges in each image.

Gas content showed no correlation with morphology. The gas fractions were very high and depended on the speed, mass and size of the galaxies.

In Fig. 3, the material was initially uncoupled and recoupled hydrodynamically and the winds removed the metal content of the mass, to keep it in equilibrium during the interaction. According to Ref. [9], the gas masses were ejected from the star-forming regions in the interactions, and the wind speed was proportional to the dispersion speed of the dark matter.

In the density fields, radial motion generated dense sweep, drag, and tidal tails, so gas coupling was strong. This led to the transfer of the thermal and ionization state of the evolved gas. Density increased with size, with dispersion speed not so great; in brighter regions the effect of gravity was greater, compared to the external pressure of the system. According to Ref. [8], this could lead to a substantial improvement in the density of the interacting gas. The interactions resulted in gas flows, created turbulence and could compress the gas. This process may be involved in the formation of new bodies. Like the possible formation of stars in areas with excess gas or denser gas, 2/3 of the central part of the galaxies is formed in this pair.

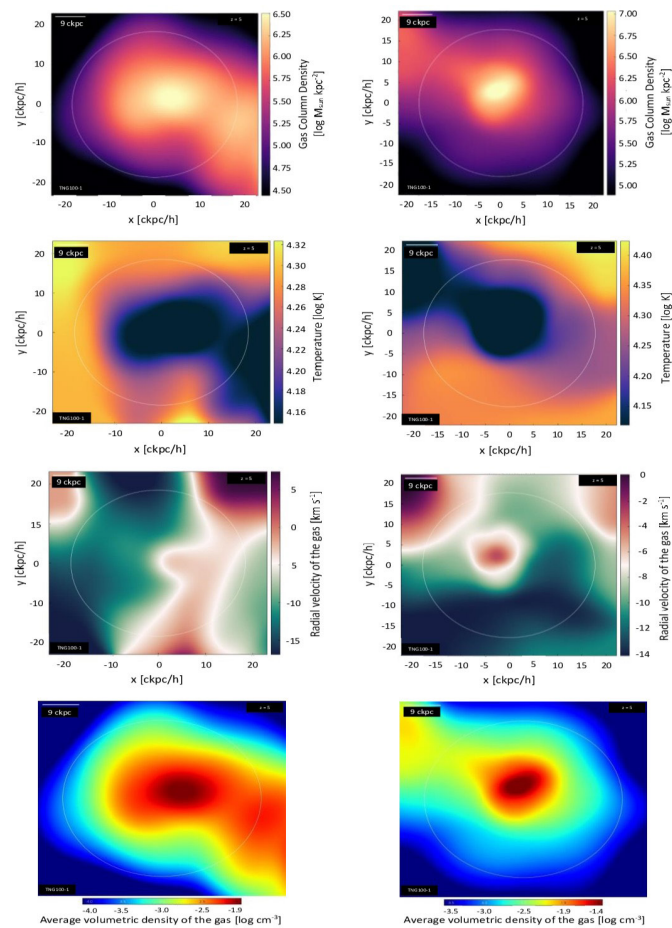


Fig. 3. Images of gas hydrodynamic parameters for a pair of interacting galaxies ID 473421 (left) and ID 473420 (right) based on simulation of TNG100-1 at $z = 5$. Parameters: cold gas density (1st row), gas temperature (2nd row), radial velocity (3rd row), volumetric density (4th row)

The gas entropy served as a good tool for diagnosing feedback (closed-loop) injection, because the gas was ejected by the shock which led to the emergence of wind with colossal kinetic energy not only due to the extinction of the masses, but also to the change in the thermodynamic properties of the gas elements itself, both inside galaxies and on their periphery. This affected ongoing star formation, with gas accreting up to several hundred kiloparsecs [7]. In terms of



massiveness, galaxy 473420 had a greater mass in the interaction process at $z = 1$ and 5, with little new gas which affected the kinetic feedback due to head-on collisions, with injection by sweeping and dragging of particles.

The gas metallicity was correlated with the radial velocity and flow direction along to the trajectories, as an indicator of the properties of the medium, the position and speed of the particles [6]. In interactions, the amount of gas participating in them exceeded the stellar mass, trajectory, density and temperature.

The hydrodynamic survey made it possible to trace the evolution before or after interaction, merger, contact or harassment, and the temporal influence of properties on galaxies, although the observations cannot trace the evolution due to the timing scheme. As in Ref. [19], the variety of tools and information provided by IllustrisTNG, made it possible to evaluate interactions, gas evolution and properties of galaxies (metallicity, morphology and star formation, orbital tracking).

Conclusions

Astrophysical and cosmological simulations require updated information, high-performance supercomputers and rigorous numerical codes for the analysis and interpretation of large data sets (gas, stars, black holes and dark matter), that, at different scales, shape the structure and evolution of the galaxies.

Of 210 samples of galaxy pairs, the visualization method presented disadvantages due to errors such as vision and interpretation of 34 %, less than 10 % did not present gas, and only 26 % reflected an interaction symmetry.

Of 300 snapshots, in more than 60 % the external gas did not influence the internal one, the interaction decreased towards low mass regions, due to distorted morphologies. The gas fractions depended on the speed, mass and size of the galaxies.

The pair that best represented the interaction evolution was ID 473420-473421 at $z = 0, 1$ and 5, where the distance between pairs of galaxies influenced the tidal tails, only at long distances was a relative degree of resistance to the interaction of 1.5 observed. The gas flow generated transitions in the radial velocity field between the two disks, with longer filaments in regions of cold gas compared to those of hot one.

The speed of the gases depended on their temperature and density, as well as on the rates of chemical reactions, which in turn depended on the rates of heating and cooling. These rates affected the interaction depending on the amount of added mass. In light interactions, bursts, weak flashes and short-lived asymmetries were observed, in interactions with a large amount of gas they were more prominent and lasting, until the system stabilized and the gas regrouped again, as shown in the pair ID 473420-473421.

Data availability

Related data is available at www.tng-project.org/, www.illustris-project.org/, <https://www.youtube.com/@ingenieriacienciasbasicasy2477/videos>

REFERENCES

1. **Fuentes-Carrera I., Amram P., Balkowski C., et al.**, Disentangling interacting galaxy pairs and entangling them back, *ASP Conf. Ser.* 390 (2008) 186–187.
2. **Paudel S., Duc P. A., Ree C. H.**, A case study for a tidal interaction between dwarf galaxies in UGC 6741, *Astron. J.* 149 (3) (2015) 114.
3. **Renaud F., Bournaud F., Agertz O., et al.**, A diversity of starburst-triggering mechanisms in interacting galaxies and their signatures in CO emission, *Astron. Astrophys.* 625 (13 May) (2019) A65.
4. **Zhang B-q., Cao Ch., Xu C. K., et al.**, The multi-object spectroscopy observation of seven interacting galaxy pairs: metallicity gradients and star formation distributions, *Publ. Astron. Soc. Pac.* 132 (1009) (2020) 034101.
5. **Spavone M., Iodice E., Capaccioli M., et al.**, VEGAS: A VST early-type galaxy survey. III. Mapping the galaxy structure, interactions, and intragroup light in the NGC 5018 group, *Astrophys. J.* 864 (2) (2018) 149.
6. **Péroux C., Nelson D., de Voort F., et al.**, Predictions for the angular dependence of the gas mass flow rate and metallicity in the circumgalactic medium, *MNRAS*. 2020. Vol. 499 (2, 21 Oct) (2020) 2462–2473.

7. **Zinger E., Pillepich A., Nelson D., et al.**, Ejective and preventative: The IllustrisTNG black hole feedback and its effects on the thermodynamics of the gas within and around galaxies, *MNRAS*. 499 (1, 10 Oct) (2020) 768–792.
8. **Hani M. H., Gosain H., Ellison S. L., et al.**, Interacting galaxies in the IllustrisTNG simulations – II: Star formation in the post-merge stage, *MNRAS*. 493 (3, 1 Apr) (2020) 3716–3731.
9. **Blumenthal K. A., Moreno J., Barnes J. E., et al.**, Galaxy interactions in IllustrisTNG-100, I: The power and limitations of visual identification, *MNRAS. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 492 (2, 1 Febr) (2020) 2075–2094.
10. **Wang I., Pearson W. J., Rodriguez-Gomez V.**, Towards a consistent framework of comparing galaxy merge in observations and simulations, *Astron. Astrophys.* 644 (03 Dec) (2020) A87.
11. **Davé R., Crain R. A., Stevens A. R. H., et al.**, Galaxy cold gas content in modern cosmological hydrodynamic simulations, *MNRAS*. 497 (1, 1 Sept) (2020) 146–166.
12. **Teófilo-Salvador E., Ambrocio-Cruz P., Rosado-Solis M.**, Methodological characterization and computational codes in the simulation of interacting galaxies, *Artif. Intell. Appl.* 2 (1) (2024) 45–58.
13. **Yun K., Pillepich A., Zinger E., et al.**, Jellyfish galaxies with the IllustrisTNG simulations: I. Gas-stripping phenomena in the full cosmological context, *MNRAS*. 483 (1, 11 Febr) (2019) 1042–1066.
14. **Armijos-Abendaco J., Lypez E., Llerena M., et al.**, Dust deficiency in the interacting galaxy NGC 3077, *Galaxies*. 5 (3) (2017) 53.
15. **Vogelsberger M., McKinnon R., O’Neil S., et al.**, Dust in and around galaxies: Dust in cluster environments and its impact on gas cooling, *MNRAS*. 487 (4, 21 Aug) (2019) 4870–4883.
16. **Millard J. S., B. Diemer D., Eales S. A., et al.**, IllustrisTNG and S2COSMOS: possible conflicts in the evolution of neutral gas and dust, *MNRAS. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 500 (1, 1 Jan) (2021) 871–888.
17. **Watts A.B., Power C., Catinella B., et al.**, Global HI asymmetries in IllustrisTNG: A diversity of physical processes disturb the cold gas in galaxies, *MNRAS*. 499 (4, 15 Oct) (2020) 5205–5219.
18. **Teófilo-Salvador E., Ambrocio-Cruz P., Rosado-Solis M.**, Introduction to Enzo for hydrodynamic simulations in astrophysics, *Electron. J. Comput. Inform. Biomed. Electronic. (ReCIBE)*. 11 (2) (2022) C3-17.
19. **Patton D. R., Wilson K. D., Metrow C. J., et al.**, Interacting galaxies in the IllustrisTNG simulations – I: Triggered star formation in a cosmological context // arXiv: 2003.00289v2 [Astrophysics of Galaxies] Preprint 30 March 2020. Pp. 1–19. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2003.00289>.
20. **Nelson D., Springel V., Pillepich A., et al.**, The IllustrisTNG simulations: Public data release, arXiv: 1812.05609v3 [Astrophysics of Galaxies] for this version. 2021. (29 Jan) (2021) 1–30; <https://doi.org/10.48550/arXiv.1812.05609>.
21. **Diemer B., Stevens A. R. H., Lagos C. P., et al.**, Atomic and molecular gas in IllustrisTNG galaxies at low redshift, *MNRAS*. 2019. Vol. 487 (2, 1 Aug) 1529–1550.
22. **Shin E.-J., Yung M., Kwon G., et al.**, Dark matter deficient galaxies produced via high-velocity galaxy collision in high-resolution numerical simulations, *Astrophys. J.* 899 (2) (2020) 25.
23. **Nolting C., Jones T. W., O’Neill B. J., Mendygral P. J.**, Interactions between radio galaxies and cluster shocks. I. Jet axes aligned with shock normal, *Astrophys. J.* 876 (2) (2019) 154.
24. **Famaey B., Khoury J., Penco R., A. Sharma A.**, Baryon-interacting dark matter: Heating dark matter and the emergence of galaxy scaling relations, *J. Cosmolog. Astropart. Phys.* 2020 (6) (2020) 025.
25. **Grylls P., Shankar F., Conselice C.**, The significant effects of stellar mass estimation on galaxy pair fractions, *MNRAS*. 99 (2, 1 Dec) (2020) 2265–2275.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Fuentes-Carrera I., Amram P., Balkowski C., Flores H., Puech M., Yang Y., Rosado M., Hernández-Toledo H.** Disentangling interacting galaxy pairs and entangling them back // *ASP Conference Series*. 2008. Vol. 390. Pathways through an Eclectic Universe. Pp. 186–187.
2. **Paudel S., Duc P. A., Ree C. H.** A case study for a tidal interaction between dwarf galaxies in UGC 6741 // *The Astronomical Journal*. 2015. Vol. 149. No. 3. P. 114.



3. **Renaud F., Bournaud F., Agertz O., Kraljic K., Schinnerer E., Bolatto A., Daddi E., Hughes A.** A diversity of starburst-triggering mechanisms in interacting galaxies and their signatures in CO emission // *Astronomy & Astrophysics*. 2019. Vol. 625. 13 May. P. A65.
4. **Zhang B-q., Cao Ch., Xu C. K., Zhou Z-m., Wu Y.** The multi-object spectroscopy observation of seven interacting galaxy pairs: Metallicity gradients and star formation distributions // *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*. 2020. Vol. 132. No. 1009. P. 034101.
5. **Spavone M., Iodice E., Capaccioli M., et al.** VEGAS: A VST early-type galaxy survey. III. Mapping the galaxy structure, interactions, and intragroup light in the NGC 5018 group // *The Astrophysical Journal*. 2018. Vol. 864. No. 2. P. 149.
6. **Péroux C., Nelson D., de Voort F., Pilleich A., Marinacci F., Vogelsberger M., Hernquist L.** Predictions for the angular dependence of the gas mass flow rate and metallicity in the circumgalactic medium // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2020. Vol. 499. No. 2. 21 October. Pp. 2462–2473.
7. **Zinger E., Pillepich A., Nelson D., Weinberger R., Pakmor R., Springel V., Hernquist L., Marinacci F., Vogelsberger M.** Ejective and preventative: The IllustrisTNG black hole feedback and its effects on the thermodynamics of the gas within and around galaxies // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2020. Vol. 499. No. 1. 10 October. Pp. 768–792.
8. **Hani M. H., Gosain H., Ellison S. L., Patton D. R., Torrey P.** Interacting galaxies in the IllustrisTNG simulations – II: Star formation in the post-merge stage // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2020. Vol. 493. No. 3. 1 April. Pp. 3716–3731.
9. **Blumenthal K. A., Moreno J., Barnes J. E., Hernquist L., Torrey P., Claytor Z., Rodriguez-Gomez V., Marinacci F., Vogelsberger M.** Galaxy interactions in IllustrisTNG-100, I: the power and limitations of visual identification // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2020. Vol. 492. No. 2. 1 February. Pp. 2075–2094.
10. **Wang I., Pearson W. J., Rodriguez-Gomez V.** Towards a consistent framework of comparing galaxy merge in observations and simulations // *Astronomy & Astrophysics*. 2020. Vol. 644. 03 December. P. A87.
11. **Davé R., Crain R. A., Stevens A. R. H., Narayanan D., Saintonge A., Catinella B., Cortese L.** Galaxy cold gas content in modern cosmological hydrodynamic simulations // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2020. Vol. 497. No. 1. 1 September. Pp. 146–166.
12. **Teófilo-Salvador E., Ambrocio-Cruz P., Rosado-Solis M.** Methodological characterization and computational codes in the simulation of interacting galaxies // *Artificial Intelligence and Applications*. 2024. Vol. 2. No. 1. Pp. 45 – 58.
13. **Yun K., Pillepich A., Zinger E., et al.** Jellyfish galaxies with the IllustrisTNG simulations: I. Gas-stripping phenomena in the full cosmological context // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2019. Vol. 483. No.1. 11 February. Pp. 1042–1066.
14. **Armijos-Abendaco J., Lypez E., Llerena M., Aldás F., Logan C.** Dust deficiency in the interacting galaxy NGC 3077 // *Galaxies*. 2017. Vol. 5. No. 3. P. 53.
15. **Vogelsberger M., McKinnon R., O’Neil S., Marinacci F., Torrey P., Kannan R.** Dust in and around galaxies: Dust in cluster environments and its impact on gas cooling// *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2019. Vol. 487. No. 4. 21 August. Pp. 4870–4883.
16. **Millard J. S., B. Diemer D., Eales S. A., Gomez H. L., Beeston R., Smith M. W. L.** IllustrisTNG and S2COSMOS: possible conflicts in the evolution of neutral gas and dust// *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2021. Vol. 500. No. 1. 1 January. Pp. 871–888.
17. **Watts A.B., Power C., Catinella B., Cortese L., Stevens A. R. H.** Global HI asymmetries in IllustrisTNG: a diversity of physical processes disturb the cold gas in galaxies // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2020. Vol. 499. No. 4. 15 October. Pp. 5205–5219.
18. **Teófilo-Salvador E., Ambrocio-Cruz P., Rosado-Solis M.** Introduction to enzo for hydrodynamic simulations in astrophysics // *Computaciyn e Informática [Computer Science & Informatics]*. 2022. Vol. 11. No. 2. P. C3-17.
19. **Patton D. R., Wilson K. D., Metrow C. J., Ellison S. L., Torrey P., Brown W., Hani M. H., McAlpine S., Moreno J., Woo J.** Interacting galaxies in the IllustrisTNG simulations – I: Triggered star formation in a cosmological context // *arXiv: 2003.00289v2 [Astrophysics of Galaxies] Preprint* 30 March 2020. Pp. 1–19. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2003.00289>.

20. Nelson D., Springel V., Pillepich A. et al. The IllustrisTNG simulations: Public data release // arXiv: 1812.05609v3[Astrophysics of Galaxies] for this version. 2021. 29 January. Pp. 1–30. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1812.05609>.

21. Diemer B., Stevens A. R. H., Lagos C. P., et al. Atomic and molecular gas in IllustrisTNG galaxies at low redshift // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. 2019. Vol. 487. No. 2. 1 August. Pp. 1529–1550.

22. Shin E.-J., Yung M., Kwon G., Kim J.-H., Lee J., Jo Y., Kiat O. B. Dark matter deficient galaxies produced via high-velocity galaxy collision in high-resolution numerical simulations // The Astrophysical Journal. 2020. Vol. 899. No. 2. P. 25.

23. Nolting C., Jones T. W., O’Neill B. J., Mendygral P. J. Interactions between radio galaxies and cluster shocks. I. Jet axes aligned with shock normal // The Astrophysical Journal. 2019. Vol. 876. No. 2. P. 154.

24. Famaey B., Khoury J., Penco R., A. Sharma A. Baryon-interacting dark matter: Heating dark matter and the emergence of galaxy scaling relations // Journal of Cosmology and Astroparticle Physics. 2020. Vol. 2020. No. 6. P. 025.

25. Grylls P., Shankar F., Conselice C. The significant effects of stellar mass estimation on galaxy pair fractions // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. 2020. Vol. 499. No. 2. 1 December. Pp. 2265–2275.2001.06017.

THE AUTHOR

TEÓFILO-SALVADOR Eduardo

National Autonomous University of Mexico (UNAM)

National School of Earth Sciences-UNAM

Scientific Research S/N, C. U., 04510, México

mca.ts.eduardo2015@gmail.com

ORCID: 0000-0001-8794-2938

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ТЕОФИЛО-САЛЬВАДОР Эдуардо – *PhD (науки о Земле), профессор Национального автономного университета Мексики (UNAM), профессор Национальной школы наук о Земле, UNAM; г. Мехико, Мексика.*

Scientific Research S/N, C. U., 04510, México

mca.ts.eduardo2015@gmail.com

ORCID: 0000-0001-8794-2938

Received 04.01.2024. Approved after reviewing 17.04.2024. Accepted 17.04.2024.

Статья поступила в редакцию 04.01.2024. Одобрена после рецензирования 17.04.2024. Принята 17.04.2024.

Научное издание

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

**«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
ТОМ 17, № 3, 2024**

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 ПИИ № 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. Яцуржинская* – 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 30.09.2024. Формат 60x84/8. 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 ВИНТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНТИ 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 закончиться **ДОСРОЧНО**.

Е-mail: physics@spbstu.ru,

Тел. редакции 8 (812) 552-62-16.

Сайт журнала: <https://physmath.spbstu.ru/>