

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



# НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

---

---

Физико-математические  
науки

---

---

**ТОМ 17, №4**  
**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.4,  
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-tekhnicheskie vedomosti SPb-GPU'.

The journal is registered with the Federal Service for Supervision in the Sphere of Telecom, Information Technologies and Mass Communications (ROSKOMNADZOR). Certificate 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 Politekhnicheskaya 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

Чижова А. А., Никольская А. А., Зайцева Е. В., Конаков А. А. <i>Электронная зонная структура гексагональных политипов кремния</i> .....	9
---	---

### Математическое моделирование физических процессов

Коёкин В. Ю., Булович С. В. <i>Математическое моделирование в двумерной постановке термогазодинамических процессов в роторно-лопастном двигателе с внешним подводом тепла</i> .....	20
---	----

Рис В. В., Галаев С. А., Левченя А. М. <i>Пространственно-периодическое течение и теплообмен в канале прямоугольного сечения с одной ребренной стенкой</i> .....	34
--	----

Алифов А. А. <i>Параметрические и автоколебания при нелинейном параметрическом воздействии и запаздывании в упругости</i> .....	48
---	----

Гамзаев Х. М. <i>Идентификация граничного режима в процессе вытеснения водой нефти из пласта</i> .....	57
--	----

### Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

Кораблев В. В., Рожанский В. А., Сарыгулов А. И. <i>Физико-технические проблемы становления термоядерной энергетики: от фундаментальных исследований к этапу промышленного освоения</i> .....	68
---	----

Кавеев А. К., Федоров В. В., Минив Д. В. <i>Формирование разбавленных нитридных нитевидных нанокристаллов <math>InAs_{1-x}N_x</math> по типу ядро-оболочка на кремнии</i> .....	88
---	----

### Приборы и техника физического эксперимента

Вакуленко А. Ф., Ванина П. Ю., Филимонов А. В., Вахрушев С. Б. <i>Модернизация методики получения температур фазового перехода с помощью атомно-силовой микроскопии пьезоотклика на примере исследования фазового перехода в монокристалле PZT</i> .....	98
--	----

Немаде К. Р., Махешваре П. Б. <i>Показатели работы подвешенного спинового клапана системы NiFe/Co-PANI/NiFe (статья на английском языке)</i> .....	106
--	-----

### Физическая электроника

Помозов Т. В., Мурадымов М. З., Ткач Е. А., Явор М. И. <i>Эффективность фокусирующей системы при транспортировке ионного тока в систему дифференциальной откачки масс-спектрометра</i> .....	114
--	-----

Головицкий А. П. <i>Ионная диффузия в периферийную область тлеющего разряда в электроотрицательных газах</i> .....	121
--	-----

### Ядерная физика

Музьяев Е. В., Бердников Я. А. <i>Асимметрия Сиверса в глубоконеупругом рассеянии заряженных лептонов на поперечно-поляризованных протонах</i> .....	130
--	-----

Шапаев Д. С., Бердников Я. А. <i>Рождение прямых фотонов во взаимодействиях ядер дейтерия при энергиях 13,5 и 27,0 ГэВ</i> .....	138
--	-----

**Механика**

**Фролов М. М., Савиковский А. В., Семенов А. С.** *Энергетический критерий разрушения на основе диссипативного неравенства* ..... 147

**Прикладная и вычислительная математика**

**Петухов Д. А., Фролов М. Е.** *Сравнение адаптивных алгоритмов решения плоских задач линейной теории упругости на основе элементов Равьяра – Тома нулевого и первого порядков* ..... 161

## Contents

### Condensed matter physics

- Chizhova A. A., Nikolskaya A. A., Zaitseva E. V., Konakov A. A.** *The electronic band structure of hexagonal silicon polytypes* ..... 9

### Simulation of physical processes

- Koyokin V. Yu., Bulovich S. V.** *2D-statement simulation of thermogasdynamic processes in a rotary-blade engine with external heat supply* ..... 20

- Ris V. V., Galaev S. A., Levchenya A. M.** *A spatially periodic flow and heat transfer in a rectangular channel with one ribbed wall* ..... 34

- Alifov A. A.** *Parametric and self-excited oscillations under nonlinear parametric action and lag in elasticity* ..... 48

- Gamzaev Kh. M.** *Identification of the boundary regime in the process of water-oil displacement from the reservoir* ..... 57

### Atom physics and physics of clusters and nanostructures

- Korablev V. V., Rozhansky V. A., Sarygulov A. I.** *Physical and technical problems of fusion energy development: From fundamental research to the stage of industrial opening up* ..... 68

- Kaveev A. K., Fedorov V. V., Miniv D. V.** *Formation of diluted nitride  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  core – shell nano-wires on silicon* ..... 88

### Experimental technique and devices

- Vakulenko A. F., Vanina P. Yu., Filimonov A. V., Vakhrushev S. B.** *Modernization of the methodology for obtaining phase transition temperatures using the piezoresponse force microscopy exemplified by study of a phase transition in the PZT single crystal* ..... 98

- Nemade K. R., Maheshwary P. B.** *Vertical spin valve performance of NiFe/Co-PANI/NiFe system* ... 106

### Physical electronics

- Pomozov T. V., Muradymov M. Z., Tkach E. A., Yavor M. I.** *The efficiency of a focusing system when ion current transporting to the differential pumping system of a mass spectrometer* ..... 114

- Golovitskii A. P.** *Ionic diffusion into the peripheral area of a glow discharge in the electronegative gases* ..... 121

### Nuclear physics

- Muzyaev E. V., Berdnikov Ya. A.** *The Sivers asymmetry in deep inelastic charged lepton scattering on a transverse polarized proton target* ..... 130

- Shapaev D. S., Berdnikov Ya. A.** *The creation of direct photons during interactions of deuterium nuclei at energies of 13.5 GeV and 27.0 GeV* ..... 138

**Mechanics**

**Frolov M. M., Savikovskii A. V., Semenov A. S.** *An energy fracture criterion based on dissipative inequality* ..... 147

**Applied and computational mathematics**

**Petukhov D. A., Frolov M. E.** *A comparison of adaptive algorithms for solving plane problems in the linear elasticity theory using the zero- and first-order Raviart – Thomas elements* ..... 161



## Физика конденсированного состояния

Научная статья

УДК 538.915

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17401>

### ЭЛЕКТРОННАЯ ЗОННАЯ СТРУКТУРА ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ ПОЛИТИПОВ КРЕМНИЯ

**А. А. Чижова** <sup>✉</sup>, **А. А. Никольская**,  
**Е. В. Зайцева**, **А. А. Конаков**

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,  
г. Нижний Новгород, Россия  
<sup>✉</sup> [asyna271828@mail.ru](mailto:asyna271828@mail.ru)

**Аннотация.** Работа посвящена расчетам и анализу электронной зонной структуры для гексагональных (2H, 4H, 6H) и ромбоэдрических (9R, 15R, 21R) политипов кремния с использованием метода эмпирического псевдопотенциала (МЭП). Расчетные результаты для структур 3C, 2H и 4H хорошо согласуются с экспериментальными данными. Расчетные данные для структур 6H, 15R и 21R были получены и проанализированы впервые. Зонная структура для политипа 9R, рассчитанная МЭП, почти идентична полученной методом теории функционала плотности. Такой результат указывает на возможность применения МЭП для построения зонных схем различных политипов. Отмечены преимущества МЭП перед другими методами. Исследованы зависимости ширины прямой и непрямоугольной энергетических щелей от степени гексагональности кристаллов. Установлено частичное «выпрямление» зонной структуры при повышении этой степени у объектов.

**Ключевые слова:** кремний, зонная структура, метод псевдопотенциала, политип, гексагональность

**Финансирование.** Исследование выполнялось при финансовой поддержке Российского научного фонда (соглашение № 22-79-00281), а также в рамках госзадания FSWR-2023-0052.

**Для цитирования:** Чижова А. А., Никольская А. А., Зайцева Е. В., Конаков А. А. Электронная зонная структура гексагональных политипов кремния // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 9–19. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17401>

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.17401>

### THE ELECTRONIC BAND STRUCTURE OF HEXAGONAL SILICON POLYTYPES

**A. A. Chizhova** <sup>✉</sup>, **A. A. Nikolskaya**,  
**E. V. Zaitseva**, **A. A. Konakov**

Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Nizhny Novgorod, Russia  
<sup>✉</sup> [asyna271828@mail.ru](mailto:asyna271828@mail.ru)

**Abstract.** This work is devoted to calculations and an analysis of the electronic band structure (BS) for hexagonal (2H, 4H, 6H) and rhombohedral (9R, 15R, 21R) silicon polytypes

using the empirical pseudopotential method (EPM). The calculation results for 3C, 2H and 4H have been in good agreement with experimental data. The data for 6H, 15R and 21R were obtained and analyzed for the first time. The BS for the 9R polytype calculated by EPM was almost identical to that obtained by the density functional theory method. This result indicates the possibility of using EPM for constructing BSs of various polytypes. The advantages of EPM over others were noted. The dependences of the widths of the direct and indirect energy gaps on the of crystal hexagonality degree were also studied. A partial “straightening” of the BS was established with increasing this degree of the objects.

**Keywords:** silicon, band structure, pseudopotential method, polytype, hexagonality

**Funding:** The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 22-79-00281), and also within the framework of the state assignment FSWR-2023-0052.

**For citation:** Chizhova A. A., Nikolskaya A. A., Zaitseva E. V., Konakov A. A., The electronic band structure of hexagonal silicon polytypes, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 9–19. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17401>

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

## Введение

Различные модификации хорошо известных полупроводников, таких как кремний, привлекают внимание ученых в связи с поисками путей улучшения их излучательных свойств. В настоящее время уже получено большое количество различных политипов полупроводников IV группы [1], в частности ромбоэдрическая фаза кремния 9R [2]. На основании теоретических [3, 4] и экспериментальных [5] данных можно считать, что некоторые модификации способны обеспечивать более эффективное возбуждение люминесценции, по сравнению с алмазоподобной кубической фазой. Есть основания полагать, что в гексагональных политипах полупроводников IV группы происходит эффективное «выпрямление» зонной структуры [6]: ширина запрещенной зоны уменьшается, сокращается разница в энергии между минимумом в зоне проводимости и точкой  $\Gamma$  зоны Бриллюэна, вплоть до того, что полупроводник может стать прямозонным. В частности, германий в структуре лонсдейлита (2H) становится прямозонным материалом [6 – 10].

В данной работе акцент сделан на исследовании электронных свойств кремния, поскольку это основной материал микроэлектроники. Однако его применение в современных оптоэлектронных интегральных схемах затруднено в силу его непрямозонности: алмазоподобный кремний (с кубической структурой 3C) обладает низкой излучательной способностью, в связи с чем можно либо применять известные прямозонные материалы и при этом неизбежно сталкиваться с проблемами совместимости и быстродействия, либо искать способы модификации кремния. На данный момент опубликован ряд работ, в которых изложены методики получения и использования кремния в гексагональных фазах [5, 11 – 18].

Цель данного расчетного исследования – установить взаимосвязь кристаллической структуры с электронным зонным спектром для нескольких политипов кремния.

Расчеты проводились методом эмпирического псевдопотенциала, который достаточно точно описывает зонные структуры 3C- и 2H-политипов полупроводников IV группы [6] и ряда бинарных соединений [19]. При этом указанный метод впервые был использован для ромбоэдрических политипов.

## Метод эмпирического псевдопотенциала (МЭП)

Суть метода псевдопотенциала состоит в замене истинного потенциала валентных электронов более слабым эффективным потенциалом, называемым псевдопотенциалом [1].

Согласно методу, одноэлектронное уравнение Шрёдингера может быть записано в следующем виде:

$$\left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V_p \right) \varphi_k(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \varphi_k(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где  $\varphi_k$  – псевдоволновая функция,  $V_p$  – плавноизменяющийся кристаллический псевдопотенциал,  $E_n$  – собственные значения энергии электрона,  $\hat{\mathbf{p}}$  – оператор импульса,  $m_0$  – масса свободного электрона.

В общем случае  $V_p$  представляет собой линейную комбинацию атомных потенциалов  $V_a$ , и его можно выразить как сумму по векторам трансляции  $\mathbf{R}$  и атомных базисных векторов  $\boldsymbol{\tau}_j$  в элементарной ячейке:

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} \sum_{j=1}^N V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \boldsymbol{\tau}_j), \quad (2)$$

где  $N$  – количество атомов в элементарной ячейке.

Ввиду периодичности потенциал (2) может быть разложен в ряд Фурье:

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_0(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}), \quad (3)$$

где  $\mathbf{G}$  – векторы обратной решетки,  $V_0$  – коэффициенты Фурье.

Коэффициенты  $V_0$  можно определить как

$$V_0(\mathbf{G}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{r} V_p(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G}\mathbf{r}), \quad (4)$$

где  $\Omega$  – объем элементарной ячейки кристалла.

Сумма по  $j$ -атомам в элементарной ячейке, фигурирующая в выражении (2), учтена в ряду (3) неявным образом.

Традиционно метод эмпирического псевдопотенциала применялся для тетраэдрических полупроводников [20]. В структуре алмаза С или цинковой обманки ZnS, на элементарную ячейку приходится два атома. При выборе начала отсчета между ними, базисные векторы можно записать как

$$\boldsymbol{\tau}_1 = -\boldsymbol{\tau}_2 \equiv \boldsymbol{\tau},$$

где  $\boldsymbol{\tau} = a_n \left\{ \frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8} \right\}$  (в единицах параметра решетки,  $a_c = 5,431 \text{ \AA}$  кубического кристалла).

В получившемся выражении Фурье-коэффициенты (4) можно переписать через симметричный  $V_s(\mathbf{G})$  и антисимметричный  $V_A(\mathbf{G})$  форм-факторы:

$$V_0(\mathbf{G}) = \cos(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}) V_s(\mathbf{G}) + \sin(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}) V_A(\mathbf{G}), \quad (5)$$

где  $\cos(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau})$ ,  $\sin(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau})$  – симметричный и антисимметричный структурные факторы, соответственно.

Форм-факторы рассматриваются как регулируемые параметры, которые подбираются так, чтобы рассчитанная зонная структура соответствовала доступным экспериментальным данным. Для материалов со структурой алмаза, в элементарной ячейке которых содержатся два одинаковых атома и присутствует центр симметрии,  $V_A(\mathbf{G}) = 0$  и структурный фактор остается единственным:  $\cos(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau})$ .

Для описания политипов кремния с гексагональной и ромбоэдрической кристаллической структурой был использован псевдопотенциал следующего вида [6]:

$$V_p(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{G}} \sum_{j=1}^N V_f(\mathbf{G}) \exp[i\mathbf{G}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\tau}_j)], \quad (6)$$

где форм-факторы псевдопотенциала определяются модельным выражением

$$V_f(\mathbf{G}) = \frac{x_1 \zeta + x_2}{1 + \exp(x_3 \zeta^2 + x_4)}, \quad (7)$$

в котором  $\zeta = \left| \mathbf{G} \cdot \frac{a_i}{2\pi} \right|^2$ , а набор параметров  $x_i$  ( $i = 1 \div 4$ ) подбирается так, чтобы в случае структуры алмаза совпадать с симметричными форм-факторами  $V_S(\mathbf{G})$  для кубического кремния.

Их значения, определенные в статье [6], приведены в табл. 1 ( $R_y$  – энергия Ридберга).

Таблица 1

**Значения форм-факторов псевдопотенциала для кремния [6]**

Параметр	Единица измерения	Значение параметра
$x_1$	$R_y$	8,2808
$x_2$		-54,1842
$x_3$	–	0,0116
$x_4$		4,7922

Примечание.  $R_y$  – ридберг (внесистемная единица энергии, соответствующая энергии ионизации атома водорода).

В структуре лонсдейлита (полиморфная модификация углерода типа вюрцита) ориентация связей, не параллельных направлению [0001], изменяется на каждом бислое, а периодичность возникает уже после двух бислоев (структура 2Н). В первом случае бислои можно условно назвать кубическими, во втором – гексагональными. В других гексагональных (Н) или ромбоэдрических (R) поли типах вдоль осей симметрии 3-го или 6-го порядков чередуются кубические и гексагональные бислои.

Далее полиморфные модификации будем классифицировать, в частности, степенью гексагональности, т. е. долей гексагональных бислоев в элементарной ячейке кристалла.

Полиморфные модификации были подобраны таким образом, чтобы можно было проследить изменения их зонной структуры в зависимости от степени гексагональности, начиная от кубической структуры 3С (0 %) и заканчивая структурой лонсдейлита 2Н (100 %).

В табл. 2 представлены следующие исходные расчетные параметры: степень гексагональности структуры, параметры элементарной ячейки  $a_0$  и  $c_0$  в гексагональной установке, а также количество плоских волн (является своим для каждого поли типа), использованных при расчете методом псевдопотенциала.

Разное число плоских волн для каждой структуры обусловлено изменением размеров зоны Бриллюэна. Отметим, что все структуры, для которых выполнялся расчет, являются центросимметричными.

Полученные расчетные результаты для 3С- и 2Н- структур сопоставлялись с экспериментальными данными. В частности, полученные значения ширины запрещенной зоны  $E_g$  и величины прямой энергетической щели  $E_d$  (в точке Г зоны Бриллюэна) для 3С-кремния составили 1,106 и 3,475 эВ соответственно, что неплохо согласуется с известными из эксперимента значениями 1,11 эВ [21] и 3,31 эВ [22], полученными при комнатной температуре.

Для фазы кремния 2Н нам не удалось найти литературных источников, содержащих систематически надежные результаты измерения параметров энергетической зонной структуры; вероятно, это связано с их метастабильностью. Однако мы сравнили результаты наших вычислений для 2Н-Si с имеющимися в литературе расчетными данными. В частности, наши расчетные значения  $E_g = 0,812$  эВ и  $E_d = 1,501$  эВ находятся в превосходном согласии с полученными ранее в работе [6] методом эмпирического псевдопотенциала, где  $E_g = 0,795$  эВ и  $E_d = 1,481$  эВ.

С помощью метода эмпирического псевдопотенциала мы построили зонные диаграммы для ряда политипов кремния. Расчеты выполнялись для кристаллических структур тригональной и гексагональной сингоний с осями симметрии 3-го и 6-го порядков соответственно. Такие политипы отличаются от политипа алмаза (кубическая структура) только способом соединения атомарных бислоев вдоль направления высокой симметрии.

В кубическом кремнии химические связи, не параллельные направлению [111], не изменяют своей ориентации, и периодичность вдоль этого направления достигается после трех бислоев (структура 3С).

Таблица 2

**Параметры для расчета электронных зонных структур  
различных поли типов кремния и их значения**

Параметр	Значение параметра для поли типа							
	3С	2Н	4Н	6Н	9R	15R	21R	
Пространственная группа симметрии	$Fd-3m$	$R\bar{6}_3/mmc$			$R-3m$			
Степень гексагональности, %	0	100,00	50,00	33,33	66,66	40,00	28,57	
Параметры элементарной ячейки, Å:								
	$a_0$	5,431	3,836	3,806	3,810	3,819	3,819	3,819
	$c_0$	5,431	6,264	12,508	18,732	28,071	46,784	65,499
Количество плоских волн	259	273	343	525	1191	1327	1275	

На рис. 1 показаны зонные диаграммы, рассчитанные нами для гексагональных фаз кремния 4Н и 6Н. Зонную структуру 4Н-кремния можно сравнить с зонной структурой, рассчитанной в работе [23] методом функционала плотности. Эти диаграммы, рассчитанные разными методами, имеют аналогичное строение: электронная структура 4Н также является непрямозонной и минимум зоны проводимости находится возле М-точки. Значения  $E_g$  и  $E_d$ , полученные нами, хорошо согласуются с представленными в статье [23]:  $E_g = 1,24$  эВ и  $E_d = 1,85$  эВ. Различие результатов можно объяснить разницей методов, использованных для расчета, а также небольшим расхождением в исходных значениях параметров элементарной ячейки. Стоит отметить, что в статье [23] значения прямой и непрямой энергетических щелей представлены в сравнении с кубическим поли типом 3С, причем различия в энергиях для данных фаз аналогичны полученным нами.

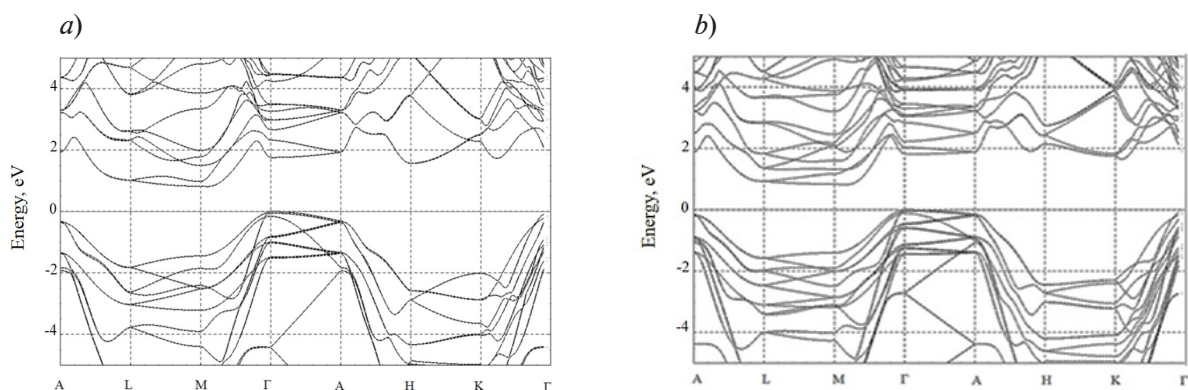


Рис. 1. Зонные структуры 4Н-Si (a) и 6Н-Si (b), минимумы зон проводимости лежат вблизи точек М.

$$E_g = 0,812 \text{ эВ}, E_d = 1,760 \text{ эВ (a)} \text{ и } E_g = 0,814 \text{ эВ}, E_d = 1,814 \text{ эВ (b)}$$

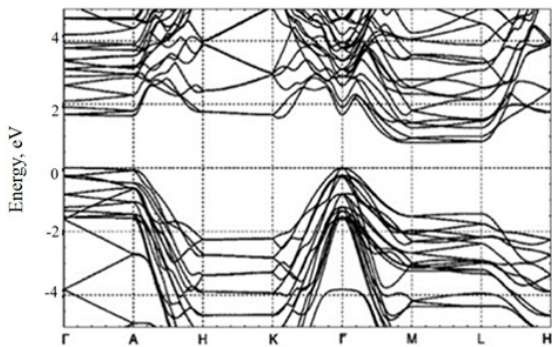


Рис. 2. Зонная структура объемного полита типа 9R-Si, рассчитанная по методу псевдопотенциала; минимум зоны проводимости лежит вблизи точки М.  
 $E_g = 0,796$  эВ,  $E_d = 1,682$  эВ

На рис. 2 показана зонная диаграмма 9R-Si, рассчитанная нами с помощью метода псевдопотенциала, которую можно сравнить с таковой, полученной расчетным путем по методу теории функционала плотности (ТФП) [24]. Зонные схемы имеют подобное строение.

В табл. 3 представлены результаты расчетов энергии потолка валентной зоны  $E_v$  и дна зоны проводимости  $E_c$  для полита типа 9R-Si с использованием метода эмпирического псевдопотенциала.

Значения ширины запрещенной зоны, полученные расчетом по методу эмпирического псевдопотенциала, обычно оказываются несколько меньше, чем по методам теории функционала

Таблица 3

**Значения краев энергетической зоны в точках высокой симметрии полита типа 9R-Si, рассчитанные методом псевдопотенциала**

Точка высокой симметрии в зоне Бриллюэна	Энергия, эВ	
	$E_v$	$E_c$
Г	0	1,682
А	-0,075	1,644
Н	-2,247	1,762
К	-2,216	1,671
Л	-1,435	0,836
М	-1,529	0,796

плотности, в частности, наши результаты для 9R-Si, которые составляют  $E_g = 0,796$  эВ и  $E_d = 1,682$  эВ, оказались меньше, по сравнению с  $E_g = 1,06$  эВ и  $E_d = 1,70$  эВ, рассчитанными из первых принципов. Такая разница может быть связана, во-первых, с тем, что использованный метод псевдопотенциала был параметризован по ширине запрещенной зоны 3C-Si при комнатной температуре, которая несколько ниже, чем при нулевой (1,11 против 1,17 эВ), во-вторых, связан с погрешностью использованного нами алгоритма переноса псевдопотенциалов с кубической фазы на гексагональные. В частности, метод ТФП более строго учитывает перераспределение электронной плотности и взаимодействие в системе валентных электронов, в то время как в МЭП моделируется суммарный псевдопотенциал электронов остова и валентных электронов. Тем не менее, метод псевдопотенциала позволяет получить довольно точную картину зонной структуры за значительно меньшее время и использование вычислительных ресурсов.

Важно отметить, что зонные диаграммы для некоторых политипов с гексагональной (6H-Si) и ромбоэдрической (15R-Si, 21R-Si) решетками (см. рис. 1, b и 3, соответственно) были рассчитаны впервые.

Если объединить данные, представленные на рис. 1 – 3, то можно построить график зависимости ширины запрещенной зоны энергий для кристаллов гексагональных политипов кремния от степени гексагональности кристалла, которая простирается от кубической 3C-фазы, обладающей нулевой «долей», до фазы лонсдейлита 2H со 100%-ой «долей»

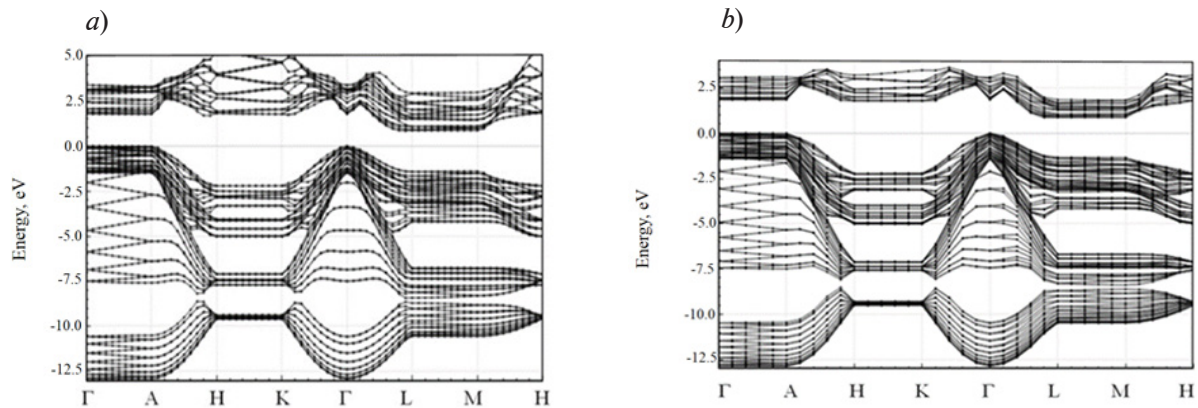


Рис. 3. Зонные структуры 15R-Si (a) и 21R-Si (b), минимумы зон проводимости лежат вблизи точек M.  
 $E_g = 0,839$  эВ,  $E_d = 1,770$  эВ (a) и  $E_g = 0,880$  эВ,  $E_d = 1,850$  эВ (b)

гексагональности (рис. 4). Видно, что повышение степени гексагональности элементарной ячейки приводит к уменьшению разницы между прямой и непрямой энергетическими щелями.

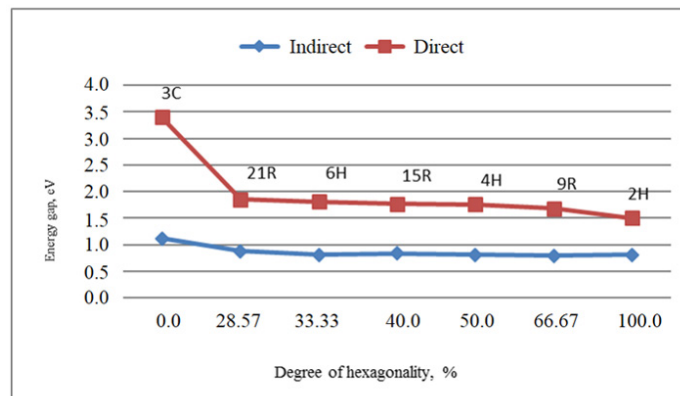


Рис. 4. Графики зависимости ширины запрещенной зоны и прямой энергетической щели в различных поли типах кремния от степени их гексагональности (рассчитаны методом эмпирического псевдопотенциала)

### Заключение

В работе проведен расчет зонной структуры для различных поли типов кремния с использованием метода эмпирического псевдопотенциала, который, как показывает опыт, проще в реализации и занимает существенно меньше машинного времени, чем, например, аналогичный расчет по методу теории функционала плотности. Для поли типов 2H, 4H, 3C и 9R результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными и подобными расчетами, выполненными в работах [6, 23, 24].

Выполненные расчеты для структур 4H, 6H, 9R, 15R и 21R позволили сделать несколько выводов.

Во-первых, все рассмотренные фазы кремния являются непрямозонными.

Во-вторых, повышение степени гексагональности элементарной ячейки приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны (непрямой).

В-третьих, разница между прямой и непрямой энергетическими щелями оказывается меньше в случае большей степени гексагональности материала. Другими словами, увеличение степени гексагональности приводит к «выпрямлению» зонной структуры материала, что, однако, не позволяет полностью решить проблему непрямозонности кремниевой электронной структуры.

Для возможного решения данной проблемы следует рассмотреть твердый раствор германий-кремний, так как для германия наблюдается полное выпрямление зонной структуры уже для поли типа 9R [24].

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wen B., Zhao J., Bucknum M. J., Yao P., Li T. First-principles studies of diamond polytypes // *Diamond and Related Materials*. 2008. Vol. 17. No. 3. Pp. 356–364.
2. Королев Д. С., Никольская А. А., Кривулин Н. О., Белов А. И., Михайлов А. Н., Павлов Д. А., Тетельбаум Д. И., Соболев Н. А., Kumar M. Формирование гексагональной фазы кремния 9R при ионной имплантации // *Письма в Журнал технической физики*. 2017. Т. 43. № 16. С. 87–92.
3. Rödl C., Sander T., Bechstedt F., Vidal J., Olsson P., Laribi S., Guillemoles J.-F. Wurtzite silicon as a potential absorber in photovoltaics: Tailoring the optical absorption by applying strain // *Physical Review B*. 2015. Vol. 92. No. 4. P. 045207.
4. Raffy C., Furthmüller J., Bechstedt J. Properties of hexagonal polytypes of group-IV elements from first-principles calculations // *Physical Review B*. 2002. Vol. 66. No. 7. P. 075201.
5. Bandet J., Despax B., Caumont M. Vibrational and electronic properties of stabilized wurtzite-like silicon // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2002. Vol. 35. No. 3. Pp. 234–239.
6. De A., Pryor C. E. Electronic structure and optical properties of Si, Ge and diamond in the lonsdaleite phase // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2014. Vol. 26. No. 4. P. 045801.
7. Chen P.-S., Fan S.-T., Lan H.-S., Liu C. W. Band calculation of lonsdaleite Ge // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2017. Vol. 50. No. 1. P. 015107.
8. Rödl C., Furthmüller J., Suckert J.R., Armuzza V., Bechstedt F., Botti S. Accurate electronic and optical properties of hexagonal germanium for optoelectronic applications // *Physical Review Materials*. 2019. Vol. 3. No. 3. P. 034602.
9. Suckert J. R., Rödl C., Furthmüller J., Bechstedt F., Botti S. Efficient strain-induced light emission in lonsdaleite germanium // *Physical Review Materials*. 2021. Vol. 5. No. 2. P. 024602.
10. Fadaly E. M. T., Dijkstra A., Suckert J. R., et al. Direct-bandgap emission from hexagonal Ge and SiGe alloys // *Nature*. 2020. Vol. 580. No. 7802. Pp. 205–209.
11. Zhang Y., Iqbal Z., Vijayalakshmi S., Grebel H. Stable hexagonal-wurtzite silicon phase by laser ablation // *Applied Physics Letters*. 1999. Vol. 75. No. 18. Pp. 2758–2760.
12. Nikolskaya A. A., Korolev D. S., Mikhaylov A. N., Belov A. I., Konakov A. A., Chigirinsky Yu. I., Sushkov A. A., Pavlov D. A., Tetelbaum D. I. Mechanism of formation of light-emitting silicon hexagonal phase 9R-Si // *Journal of Physics: Conference Series*. 2019. Vol. 1410. 20 December. P. 012037.
13. Scalise E., Sarikov A., Barbisan L., Marzegalli A., Migas D. B., Montalenti F., Miglio L. Thermodynamic driving force in the formation of hexagonal-diamond Si and Ge nanowires // *Applied Surface Science*. 2021. Vol. 545. 15 April. P. 148948.
14. Gordeeva T., Kulnitskiy B., Popov M., Ovsyannikov D., Blank V. High-pressure Si phases and the mutual orientation of their structures. HRTEM Studies // *Physics of Solid State*. 2021. Vol. 63. No. 6. Pp. 844–849.
15. Fan L., Yang D., Li D. A review on metastable silicon allotropes // *Materials*. 2021. Vol. 14. No. 14. P. 3964.
16. Кульницкий Б. А., Гордеева Т. А., Овсянников Д. А., Попов М. Ю., Бланк В. Д. Фазовые превращения элементов IV группы: углерод, кремний, германий при воздействии циклических напряжений до 6 ГПа // *Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология*. 2020. Т. 63. № 12. С. 10–15.
17. Lee Y., Woo Y., Lee D.-K., Kim I. Fabrication of quasi-hexagonal Si nanostructures and its application for flexible crystalline ultrathin Si solar cells // *Solar Energy*. 2020. Vol. 208. 15 September. Pp. 957–965.
18. Shin S., Kim K. H., Lee G. S., Lee J. H., Ahn H. S., Cha H. Y. Electrical properties of 2H-Si microwire grown by mixed-source hydride vapor phase epitaxy // *Results in Physics*. 2022. Vol. 40. September. P. 105857.
19. De A., Pryor C. E. Predicted band structures of III–V semiconductors in the wurtzite phase // *Physical Review B*. 2012. Vol. 81. No. 15. P. 155210.



20. **Cohen M. L., Bergstresser T. K.** Band structures and pseudopotential form factors for fourteen semiconductors of the diamond and zinc-blende structures // *Physical Review*. 1966. Vol. 141. No. 2. Pp. 789–796.
21. **Welber B., Kim C. K., Cardona M., Rodriguez S.** Dependence of the indirect energy gap of silicon on hydrostatic pressure // *Solid State Communications*. 1975. Vol. 17. No. 8. Pp. 1021–1024.
22. **Jellison G. E., Modine F. A.** Optical functions of silicon between 1.7 and 4.7 eV at elevated temperatures // *Physical Review B*. 1983. Vol. 27. No. 12. P. 7466.
23. **Zhang X., Kioupakis E.** Electronic, direct optical, and phonon-assisted optical properties of 4H Si from first principles // *AIP Advances*. 2024. Vol. 14. No. 3. P. 035149.
24. **Nikolskaya A. A., Korolev D. S., Mikhaylov A. N., et al.** Light-emitting 9R-Si phase formed by Kr<sup>+</sup> ion implantation into SiO<sub>2</sub>/Si substrate // *Applied Physics Letters*. 2018. Vol. 113. No. 18. P. 182103.

## REFERENCES

1. **Wen B., Zhao J., Bucknum M. J., et al.**, First-principles studies of diamond polytypes, *Diam. Relat. Mater.* 17 (3) (2008) 356–364.
2. **Korolev D. S., Nikolskaya A. A., Krivulin N. O., et al.**, Formation of hexagonal 9R silicon polytype by ion implantation, *Techn. Phys. Lett.* 43 (8) (2017) 767–769.
3. **Rödl C., Sander T., Bechstedt F., et al.**, Wurtzite silicon as a potential absorber in photovoltaics: Tailoring the optical absorption by applying strain, *Phys. Rev. B*. 92 (4) (2015) 045207.
4. **Raffy C., Furthmüller J., Bechstedt J.**, Properties of hexagonal polytypes of group-IV elements from first-principles calculations, *Phys. Rev. B*. 66 (7) (2002) 075201.
5. **Bandet J., Despax B., Caumont M.**, Vibrational and electronic properties of stabilized wurtzite-like silicon, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 35 (3) (2002) 234–239.
6. **De A., Pryor C. E.**, Electronic structure and optical properties of Si, Ge and diamond in the lonsdaleite phase, *J. Phys. Cond. Matt.* 26 (4) (2014) 045801.
7. **Chen P.-S., Fan S.-T., Lan H.-S., Liu C. W.**, Band calculation of lonsdaleite Ge, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 50 (1) (2017) 015107.
8. **Rödl C., Furthmüller J., Suckert J.R., et al.**, Accurate electronic and optical properties of hexagonal germanium for optoelectronic applications, *Phys. Rev. Mater.* 3 (3) (2019) 034602.
9. **Suckert J. R., Rödl C., Furthmüller J., et al.**, Efficient strain-induced light emission in lonsdaleite germanium, *Phys. Rev. Mater.* 5 (2) (2021) 024602.
10. **Fadaly E. M. T., Dijkstra A., Suckert J. R., et al.**, Direct-bandgap emission from hexagonal Ge and SiGe alloys, *Nature*. 580 (7802) (2020) 205–209.
11. **Zhang Y., Iqbal Z., Vijayalakshmi S., Grebel H.**, Stable hexagonal-wurtzite silicon phase by laser ablation, *Appl. Phys. Lett.* 75 (18) (1999) 2758–2760.
12. **Nikolskaya A. A., Korolev D. S., Mikhaylov A. N., et al.**, Mechanism of formation of light-emitting silicon hexagonal phase 9R-Si, *J. Phys. Conf. Ser.* 1410 (20 Dec) (2019) 012037.
13. **Scalise E., Sarikov A., Barbisan L., et al.**, Thermodynamic driving force in the formation of hexagonal-diamond Si and Ge nanowires, *Appl. Surf. Sci.* 545 (15 April) (2021) 148948.
14. **Gordeeva T., Kulnitskiy B., Popov M., et al.**, High-pressure Si phases and the mutual orientation of their structures. HRTEM studies, *Phys. Solid State*. 63 (6) (2021) 844–849.
15. **Fan L., Yang D., Li D.**, A review on metastable silicon allotropes, *Materials*. 14 (14) (2021) 3964.
16. **Kulnitskiy B. A., Gordeeva T. A., Ovsyannikov D. A., et al.**, Phase transformations of group IV elements: carbon, silicon, germanium after treatment under cyclic stresses up to 6 GPa, *Chem. Chem. Tech.* 63 (12) (2020) 10–15 (in Russian).
17. **Lee Y., Woo Y., Lee D.-K., Kim I.**, Fabrication of quasi-hexagonal Si nanostructures and its application for flexible crystalline ultrathin Si solar cells, *Sol. Energy*. 208 (15 Sept) (2020) 957–965.
18. **Shin S., Kim K. H., Lee G. S., et al.**, Electrical properties of 2H-Si microwire grown by mixed-source hydride vapor phase epitaxy, *Res. Phys.* 40 (Sept) (2022) 105857.
19. **De A., Pryor C. E.**, Predicted band structures of III–V semiconductors in the wurtzite phase, *Phys. Rev. B*. 81 (15) (2012) 155210.
20. **Cohen M. L., Bergstresser T. K.**, Band structures and pseudopotential form factors for fourteen semiconductors of the diamond and zinc-blende structures, *Phys. Rev.* 141 (2) (1966) 789–796.

21. Welber B., Kim C. K., Cardona M., Rodriguez S., Dependence of the indirect energy gap of silicon on hydrostatic pressure, *Solid State Commun.* 17 (8) (1975) 1021–1024.
22. Jellison G. E., Modine F. A., Optical functions of silicon between 1.7 and 4.7 eV at elevated temperatures, *Phys. Rev. B.* 27 (12) (1983) 7466.
23. Zhang X., Kioupakis E., Electronic, direct optical, and phonon-assisted optical properties of 4H Si from first principles, *AIP Advances.* 14 (3) (2024) 035149.
24. Nikolskaya A. A., Korolev D. S., Mikhaylov A. N., et al., Light-emitting 9R-Si phase formed by Kr<sup>+</sup> ion implantation into SiO<sub>2</sub>/Si substrate, *Appl. Phys. Lett.* 113 (18) (2018) 182103.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ЧИЖОВА Анастасия Андреевна** – младший научный сотрудник кафедры теоретической физики Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия.

603950, Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23  
asyna271828@mail.ru  
ORCID: 0009-0000-1236-0319

**НИКОЛЬСКАЯ Алена Андреевна** – кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник кафедры теоретической физики Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия.

603950, Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23  
alena.nikolskaya.1994@mail.ru  
ORCID: 0000-0001-6059-6684

**ЗАЙЦЕВА Екатерина Владимировна** – 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  
evzaitseva@mail.ru  
ORCID: 0009-0009-4269-4585

**КОНАКОВ Антон Алексеевич** – кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой 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

#### THE AUTHORS

**CHIZHOVA Anastasia A.**

*Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod*  
23 Gagarin Ave., Nizhny Novgorod, 603950, Russia  
asyna271828@mail.ru  
ORCID: 0009-0000-1236-0319

**NIKOLSKAYA Alena A.**

*Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod*  
23 Gagarin Ave., Nizhny Novgorod, 603950, Russia  
alena.nikolskaya.1994@mail.ru  
ORCID: 0000-0001-6059-6684

**ZAITSEVA Ekaterina V.**

*Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod*  
23 Gagarin Ave., Nizhny Novgorod, 603950, Russia  
evzaitseva@mail.ru  
ORCID: 0009-0009-4269-4585

**KONAKOV Anton A.**

*Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod*  
23 Gagarin Ave., Nizhny Novgorod, 603950, Russia  
konakov\_anton@mail.ru  
ORCID: 0000-0001-8850-2651

*Статья поступила в редакцию 23.05.2024. Одобрена после рецензирования 04.07.2024.  
Принята 04.07.2024.  
Received 23.05.2024. Approved after reviewing 04.07.2024. Accepted 04.07.2024.*

# Математическое моделирование физических процессов

Научная статья

УДК 621.412

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17402>

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ДВУМЕРНОЙ ПОСТАНОВКЕ ТЕРМОГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В РОТОРНО-ЛОПАСТНОМ ДВИГАТЕЛЕ С ВНЕШНИМ ПОДВОДОМ ТЕПЛА

**В. Ю. Коёкин** , **С. В. Булович**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

 [koiokin@mail.ru](mailto:koiokin@mail.ru)

**Аннотация.** С целью математического описания и анализа характеристик роторно-лопастного двигателя с внешним подводом тепла (РЛДВПТ), рассмотрена двумерная модель этого механизма. Численное моделирование учитывало движение рабочих камер двигателя и изменение их формы. В случае контакта рабочей камеры с окнами газораспределения в корпусе двигателя происходило либо перемещение рабочего тела в теплообменные аппараты, либо наполнение рабочей камеры газом. Подробно исследовано формирование и развитие структуры струйного течения в массообменном процессе двигатель – теплообменник. Процесс теплообмена в горячем и холодном теплообменниках двигателя моделировали при помощи коэффициента объемной теплоотдачи, учитывали также гидравлическое сопротивление этих устройств. Результаты исследования процессов тепло- и массообмена в РЛДВПТ были представлены в виде циклограмм и индикаторных диаграмм. Проведено сравнение с соответствующими результатами, полученными упрощенным способом – методом узловых значений функций.

**Ключевые слова:** роторно-лопастной двигатель с внешним подводом тепла, математическое моделирование, численное интегрирование

**Для цитирования:** Коёкин В. Ю., Булович С. В. Математическое моделирование в двумерной постановке термогазодинамических процессов в роторно-лопастном двигателе с внешним подводом тепла // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 20–33. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17402>

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.17402>

## 2D-STATEMENT SIMULATION OF THERMOGASDYNAMIC PROCESSES IN A ROTARY-BLADE ENGINE WITH EXTERNAL HEAT SUPPLY

**V. Yu. Koyokin** , **S. V. Bulovich**

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

 [koiokin@mail.ru](mailto:koiokin@mail.ru)

**Abstract.** To analyze the characteristics of a rotor-blade engine with external heat supply, a 2D model of this mechanism is considered. The simulation took into account the movement of

the working chambers of the engine and the change in their shape. When the chamber came into contact with the gas distribution windows, either gas was transferred to the heat exchangers or the chamber was filled with gas. The formation and development of the jet flow structure in the mass transfer process of an engine – heat exchanger was investigated. The heat transfer process in the engine heat exchangers was modeled using the volumetric heat transfer coefficient, and their hydraulic resistance was also taken into account. The results of the study of heat and mass transfer processes in the engine were presented in the form of cyclograms and indicator diagrams. A comparison was made with the results obtained using the nodal value method.

**Keywords:** rotary-blade engine with external heat supply, simulation, numerical integration

**For citation:** Koyokin V. Yu., Bulovich S. V., 2D-statement simulation of thermogas-dynamic processes in a rotary-blade engine with external heat supply, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 20–33. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17402>

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 во многих областях транспорта, техники и производства продукции используются двигатели внутреннего сгорания (ДВС). Начиная с конца XIX века, с момента появления машин, работающих по циклу Отто и циклу Дизеля, весь технический прогресс был направлен на совершенствование конструкций, в которых топливная смесь сгорает непосредственно в рабочей камере.

Однако современные тенденции развития энергетики направлены на поиск нетрадиционных источников энергии. Такое обстоятельство побуждает вернуться к предшественникам ДВС: двигателям с внешним подводом тепла (ДВПТ). Развитие науки о материалах и предложение принципиально новых конструкций ДВПТ позволяют рассматривать двигатели данного типа как основную, наиболее эффективную альтернативу ДВС. В отличие от ДВС, которые, как правило, работают на одном конкретном топливе, двигатели с внешним подводом тепла не имеют жесткой привязки к источнику тепловой энергии, и в перспективе могут использоваться совместно с атомным источником энергии или получать тепловую энергию от Солнца. В будущем такая особенность может заметно сократить потребление невозобновляемых источников энергии и сыграть большую роль в разрешении энергетического кризиса, связанного с истощением ресурсов.

Наиболее распространенным из двигателей с внешним подводом тепла является двигатель Стирлинга. Этот двигатель имеет богатую историю развития и совершенствования; на данный момент он применяется во многих сферах жизнедеятельности человека [1].

В данной работе рассматривается роторно-лопастной двигатель с внешним подводом тепла (РЛДВПТ) [2]. Как этот, так и двигатель Стирлинга имеют замкнутые термодинамические циклы и простые аналогичные принципы работы, которые заключаются в преобладании механической работы, получаемой при расширении нагретого газа, над работой, затрачиваемой на сжатие холодного газа.

Схематическое изображение РЛДВПТ приведено на рис. 1,а. Конструкция двигателя представляет собой замкнутый цилиндрический корпус с четырьмя камерами 1 – 4. В начальном положении, показанном на рисунке, и на момент начала каждого следующего цикла работы, камеры 1, 3 имеют максимальный объем, камеры 2, 4 – минимальный. В процессе работы изменение объема рабочих камер происходит за счет вращения лопастных пар 7, 9 и 8, 10 с переменным значением угловой скорости, что приводит к их колебательному движению относительно друг друга. Через окна, расположенные на ободе корпуса, происходит коммутация рабочих камер с горячим (5) и холодным (6) теплообменниками. Размер и положение, например окна входа в нагреватель, определяется двумя углами, обозначенными на рисунке как  $\beta_{11}$  и  $\beta_{12}$ . По такому же принципу задано положение и остальных окон газообмена двигателя с теплообменными аппаратами.  $\Psi_l$  – размер лопасти по угловой координате,  $\Psi_{\min}$  – минимальный угол сближения лопастей.

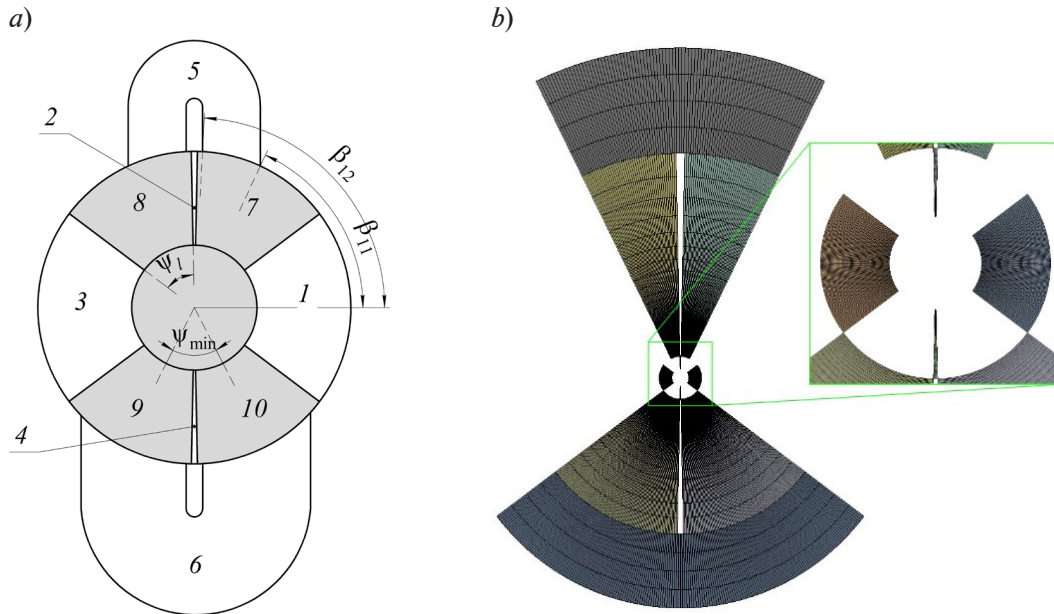


Рис. 1. Схема роторно-лопастного двигателя (а) и расчетная область с элементами дискретизации (b):

1-4 – камеры; 5, 6 – соответственно горячий и холодный теплообменники; 7-9 и 8-10 – лопастные пары;  $\Psi_l$  – размер лопасти по угловой координате;  $\Psi_{\min}$  – минимальный угол сближения лопастей;  $\beta_{11}, \beta_{12}$  – углы, определяющие размер и положение окна входа в нагреватель

На рис. 1, b приведена расчетная область, которая использована для численного интегрирования системы уравнений Навье – Стокса методом контрольного объема. Вычисления проводились в двумерной постановке (использована структурированная сетка с четырехугольными элементами).

Применение в конструкции двигателя кулачкового механизма для управления скоростью движения лопасти, разработанного специально для него [3], обеспечивает хорошее равновесие всех деталей и низкий уровень вибраций. Такой механизм преобразования вращения вала с постоянной угловой скоростью в знакопеременное ускоренное движение лопастных пар приводит к следующему закону изменения положения торцевых плоскостей, которые ограничивают камеру I:

$$\begin{aligned} \varphi_1(\alpha) &= \alpha - \frac{1}{2} \left[ \frac{\pi}{2} + \left( \frac{\pi}{2} - \Psi_{\min} \right) \cos(2\alpha) - \Psi_l \right], \\ \varphi_2(\alpha) &= \alpha + \frac{1}{2} \left[ \frac{\pi}{2} + \left( \frac{\pi}{2} - \Psi_{\min} \right) \cos(2\alpha) - \Psi_l \right], \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\alpha$  – угловая координата поворота вала;  $\varphi_1, \varphi_2$  – положения задней и передней торцевых плоскостей камеры I, соответственно.

Положение торцевых плоскостей остальных камер также однозначно определяется, если учесть, что камеры по углу поворота вала сдвинуты друг относительно друга на угол  $\pi/2$ .

Проектирование и расчет характеристик двигателя представляет собой поэтапный процесс, развитие которого заключается в постепенном усложнении математических моделей с целью учета большего количества явлений и полноты их описания. В частности, авторами работы [4] приводится иерархия и краткое описание моделей для расчета характеристик двигателя Стирлинга, которые могут быть применены и для описания процессов в РЛД.

Отправной точкой в математическом моделировании периодического процесса служит индикаторная диаграмма, которая нашла широкое применение для поршневых механизмов. В монографии [5] представлен вид идеального термодинамического цикла РЛДВПТ, на основе которого проводится первичный расчет характеристик двигателя. Идеализация



процессов тепло- и массообмена существенно упрощает рассматриваемые явления. В первую очередь из рассмотрения исключены масштабы времени. В результате пренебрегают такими характеристиками, как скорость газообменных процессов при контакте рабочей камеры с теплообменными аппаратами и конечным временем контакта рабочего тела с теплообменными поверхностями. Размер теплообменных аппаратов полагают бесконечно большим.

Способ расчета, основанный на методе узловых значений функций, лишен перечисленных недостатков. В этом случае используют масштаб времени, связанный со скоростью движения газа. Время релаксации поля температуры в теплообменном аппарате зависит от его объема и величины коэффициента объемной теплоотдачи. Подробное изложение метода узловых значений функций, использованного для расчета характеристик РЛДВПТ, содержится в работах [6, 7]. В определенном смысле указанный метод представляет собой предельный вариант метода контрольного объема (МКО), в котором каждый элемент двигателя с определенным функциональным назначением представляется одной ячейкой расчетной сетки.

Однако очевидно, что в методе узловых значений функций отсутствует возможность учесть пространственное распределение газодинамических функций в пределах выбранного элемента. Невозможно учитывать геометрические особенности, которые связаны с перемещением рабочих камер двигателя и изменением их формы. В дополнение к этому, уравнение количества движения рассматривается в упрощенной постановке, когда определяется только расходная составляющая вектора скорости и ее величина зависит от приложенного перепада давления.

Математическое моделирование процессов в рабочей камере РЛДВПТ в двумерной постановке было выполнено в работах [8, 9]. Внимание авторов было акцентировано на особенностях теплопередачи между газом и ограничивающими стенками. При этом форма рабочей камеры претерпела сильное упрощение, и был исключен из рассмотрения процесс контакта рабочей камеры с теплообменными аппаратами. В трудах конференции [10] представлена методика моделирования РЛДВПТ в двумерной постановке средствами пакета программ Ansys Fluent. Она позволяет при помощи встроенных процедур учитывать вращение ротора, изменение объема рабочей камеры и массообмен между элементами двигателя.

Целью данной работы было подробное изложение алгоритма численного интегрирования системы уравнений Навье – Стокса применительно к описанию циклических процессов, происходящих в РЛДВПТ, в двумерной постановке.

Кроме того, стояла задача оценить влияние пространственных градиентов термодинамических величин на характеристики двигателя, для чего было проведено сравнение полученных данных с результатами моделирования методом узловых значений функций.

### Постановка задачи и математическая модель

Математическое моделирование работы РЛДВПТ проводилось в пакете ANSYS Fluent 2022 R2. Расчетная область (см. рис. 1, *b*) включает в себя четыре рабочие камеры и два теплообменных аппарата. Для постановки задачи мы воспользовались значениями геометрических и режимных параметров из работы [5].

### Значения геометрических параметров

Угловой размер лопастей двигателя .....	$\Psi_l = 52,0^\circ$
Минимальный угол между осями поршней .....	$\Psi_{\min} = 54,1^\circ$
Радиус ротора двигателя .....	$R_2 = 50 \text{ мм}$
Радиус обода корпуса .....	$R_1 = 125 \text{ мм}$
Размер области в направлении оси $z$ .....	$w = 120 \text{ мм}$
Объем нагревателя .....	$V_h = 0,2 \text{ м}^3$
Объем холодильника .....	$V_c = 0,2 \text{ м}^3$
Угловые положения $i$ -го окна $\beta_{ij}$ .....	$\beta_{11}^c = 64,00^\circ, \beta_{12}^c = 88,90^\circ,$ $\beta_{21} = 91,10^\circ, \beta_{22} = 116,00^\circ, \beta_{31} = 216,95^\circ, \beta_{32} = 268,90^\circ, \beta_{41} = 271,10^\circ, \beta_{42} = 323,05^\circ,$ где $j = 1$ и $j = 2$ отвечают началу и концу окна, соответственно.

Следует отметить, что в двумерной постановке задачи данный размер  $w$  не участвует, однако он учитывается при обработке результатов для корректного сравнения с методом сосредоточенных параметров. Боковые стенки теплообменных аппаратов расположены перпендикулярно к ободу корпуса, остальные стенки теплообменного аппарата образованы дугами окружностей. Рабочее тело – воздух.

Рассмотрено ламинарное течение сжимаемого идеального газа.

Система дифференциальных уравнений Навье – Стокса состоит из уравнений баланса массы, импульса и энергии:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \\ \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \underline{\boldsymbol{\tau}} + \mathbf{S}_v, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} H) = \nabla \cdot (\mathbf{q} + \underline{\boldsymbol{\tau}} \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{S}_q, \end{cases} \quad (2)$$

где  $\mathbf{v}$  – вектор скорости;  $\rho$  – плотность;  $p$  – давление;  $T$  – температура;  $\underline{\boldsymbol{\tau}}$  – тензор напряжений;  $E$  – полная энергия;  $H$  – полная энтальпия;  $\mathbf{q}$  – вектор плотности теплового потока.

Замыкание системы уравнений (2) обеспечивается следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \underline{\boldsymbol{\tau}} &= \mu \left( (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{v} \mathbf{I} \right), \\ E &= c_v T + \frac{|\mathbf{v}|^2}{2}, \quad H = E + \frac{p}{\rho}, \quad \mathbf{q} = -k \nabla T, \end{aligned}$$

где  $c_v$  – удельная теплоемкость при постоянном объеме,  $\mu$  – динамическая вязкость,  $\mathbf{I}$  – единичный тензор,  $k$  – коэффициент теплопроводности.

Система уравнений (2) дополняется термодинамическим уравнением состояния в форме закона Менделеева – Клапейрона  $p = R \rho T$  ( $R$  – индивидуальная газовая постоянная).

Описание теплообмена в нагревателе и холодильнике проводилось при помощи коэффициента объемной теплоотдачи  $\alpha_v = 1000 \text{ Вт}/(\text{м}^3 \cdot \text{К})$ , аналогично тому, как это сделано в статье [7].

Для этого в уравнение баланса энергии для теплообменных аппаратов было добавлено источниковое слагаемое следующего вида:

$$\mathbf{S}_q = \alpha_v (T_w - T), \quad (3)$$

где  $T_w$  – температура стенки в теплообменном аппарате.

Значение этого параметра в нагревателе задавалось равным  $T_{w,h} = 635,18 \text{ К}$ , в холодильнике –  $T_{w,c} = 276,22 \text{ К}$ .

Гидравлическое сопротивление в теплообменном аппарате учитывали через задание функции

$$\mathbf{S}_v = -K \rho |\mathbf{v}| \mathbf{v}, \quad (4)$$

где величина коэффициента  $K$  была принята равной  $10 \text{ м}^{-1}$ .

Источниковые слагаемые (3) и (4) были добавлены в уравнения системы (2) при помощи процедуры задания пользовательских функций (UDF).

Для задания движения прямолинейных участков стенок рабочей камеры в окружном направлении был создан файл со значениями угловой скорости, зависящими от времени. Текущие значения для угловой скорости вращения лопасти были получены дифференцированием по времени выражения (1). Для рассмотренного в работе варианта расчета характеристик РЛДВПТ угловая скорость движения ротора была задана равной  $\omega = 10\pi \text{ рад/с}$ . Реализация этой процедуры в пакете Fluent была выполнена путем задания профиля в модуле Dynamic Mesh.



Коммутация рабочей камеры через окна с теплообменными аппаратами поддерживалась при помощи процедуры сеточных интерфейсов. При контакте различных элементов расчетной области участок интерфейса в зоне соприкосновения был пронизан для рабочего тела. В остальных ситуациях интерфейс реализует граничное условие адиабатической твердой стенки.

Исходная сетка для дискретизации расчетной области была сформирована в модуле Fluent Meshing пакета программ Ansys. В рабочих камерах строилась равномерная сетка по угловой координате и в радиальном направлении. В теплообменниках сетка имела сгущение в радиальном направлении к корпусу двигателя. Коэффициент сгущения сетки в теплообменниках задавался равным 1,37.

Такая стратегия в организации элементов дискретизации расчетной области обеспечила равенство в размере ячеек, расположенных в окрестности интерфейса по разные стороны окна коммутации. Были проведены предварительные расчеты с разным начальным количеством элементов дискретизации области. Асимптотическое поведение решения задачи было получено на сетке с размером ячеек в рабочих камерах в угловом направлении 0,01 рад и 1,25 мм в радиальном направлении. Общее число ячеек сетки в процессе решения задачи изменялось и составляло приблизительно 28 тыс.

В процессе движения рабочих камер в окружном направлении и изменения их размеров по угловой координате расчетная сетка перестраивалась. Для этого использовался метод динамического наслоения (*англ. Layering*). Процедура затрагивает ячейки, которые примыкают к движущейся границе расчетной области. Метод заключается в объединении ячеек на границе области с ячейками следующего ряда, если контролируемый размер ячейки становится меньше заданной величины. В случае если этот параметр превышает заданную величину, производится деление ячейки в выбранном соотношении. При этом для исключения ситуации «перехлеста» сеточных линий и возникновения отрицательных объемов, шаг интегрирования по времени для выбранной расчетной сетки задавался равным  $2 \cdot 10^{-5}$  с.

На всех границах расчетной области ставилось условие прилипания и тепловой изоляции.

В качестве начальных условий для термодинамических функций в рабочих камерах и теплообменных аппаратах были заданы поля давления и температуры, соответствующие установившемуся решению, предварительно полученному по методу узловых значений функций [7].

### Результаты и их обсуждение

Как отмечалось во введении, моделирование в двумерной постановке, в отличие от моделирования по методу сосредоточенных параметров, позволяет получить представление о пространственном распределении газодинамических функций. Детализация массообменных процессов между элементами РЛДВПТ проявляется в виде струйных течений. Поле температуры предоставляет информацию о возникающих слоях смешения и локальных характеристиках процесса теплообмена между газом и поверхностями нагрева. На рис. 2 показаны зависимости от времени среднемассовых значений температуры на входной и выходной границах горячего теплообменного аппарата. Оба графика начинаются из общей точки, характеризующей значение температуры в горячем теплообменнике, полученное по методу сосредоточенных параметров. Аналогичный процесс «расслоения» значений температуры на входе и выходе происходит в холодном теплообменнике.

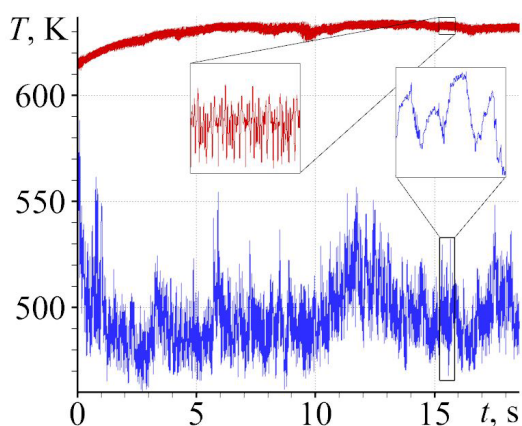


Рис. 2. Изменения во времени среднемассового значения температуры на входной (синяя кривая) и выходной (красная кривая) границах горячего теплообменника

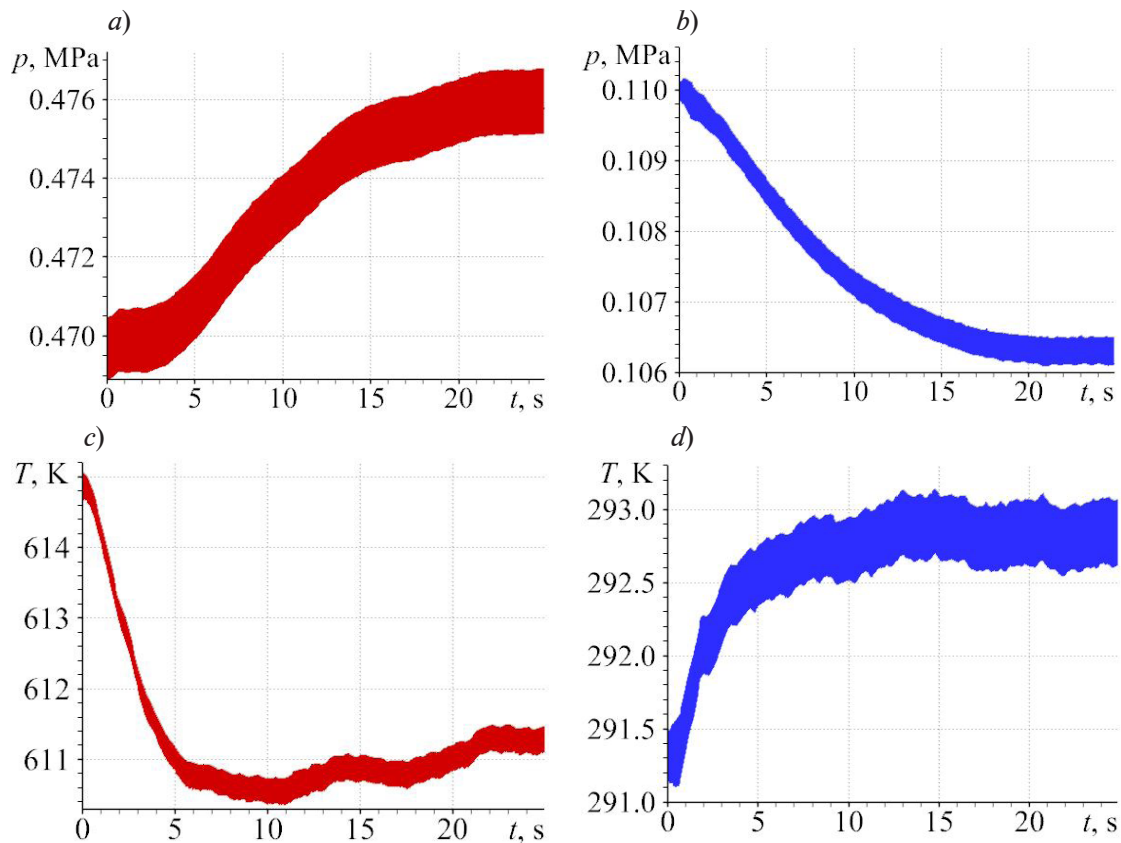


Рис. 3. Изменения во времени среднemasовых значений давления (a, b) и температуры (c, d) в горячем (a, c) и холодном (b, d) теплообменных аппаратах

Продолжительность переходного процесса установления значений давления (рис. 3, a,b) и температуры (рис. 3, c,d), усредненных по массе, в теплообменном аппарате определяется временем релаксации. При этом можно выделить несколько масштабов времени, характеризующих скорости протекания рассматриваемых процессов.

В частности, длительность процесса тепловой релаксации между газом и теплообменным аппаратом характеризуется временем, оценки которого для выбранных значений определяющих параметров задачи дают следующие значения:

$$\rho_{hot} \cdot c_p / \alpha_v \approx 3,0 \text{ с}, \rho_{cold} \cdot c_p / \alpha_v \approx 1,5 \text{ с}$$

для нагревателя (hot) и для холодильника (cold), соответственно.

Другой масштаб времени – гидродинамический – в общем случае определяется отношением линейного размера к скорости движения среды. Применительно к решаемой задаче, исходя из физики прерывистого процесса поступления газа, гидродинамическое время можно сопоставить со временем замещения массы газа в теплообменном аппарате «новым» газом, который поступает из рабочих камер. С учетом того, что за один период с теплообменным аппаратом контактируют четыре камеры, значения данной величины составляют соответственно для горячего и холодного теплообменника

$$\frac{m_{hot}}{4 \cdot m_{ch}} \cdot \tau \approx 21 \text{ с} \text{ и } \frac{m_{cold}}{4 \cdot m_{ch}} \cdot \tau \approx 10 \text{ с},$$

где  $m_{hot}$ ,  $m_{cold}$  – массы газа в горячем и холодном теплообменнике;  $m_{ch}$  – масса газа в рабочей камере после ее наполнения рабочим телом из холодильника или нагревателя (в установившемся режиме эти величины равны между собой);  $\tau$  – период,  $\tau = 2\pi/\omega$ .

Полученные оценки характерных времен подтверждаются наблюдаемыми результатами поведения функций.

Поведение кривых на графиках (см. рис. 2 и 3) свидетельствует о существенных колебаниях осредненных значений газодинамических функций в теплообменных аппаратах



даже на протяжении одного цикла. При детальном рассмотрении (один период в виде фрагмента на рис. 2), на кривой синего цвета хорошо различимы четыре характерных возмущения, которые связаны с коммутацией рабочих камер с теплообменным аппаратом. Нестационарное струйное течение, при этом возникающее, возбуждает акустические колебания газа во внутреннем пространстве теплообменного аппарата.

В рассматриваемой задаче акустические колебания, приводящие к релаксации поля давления в элементах конструкции РЛДВПТ, являются самым быстротекущим процессом. При численном решении дифференциальных уравнений его корректное представление обеспечивается выбором шага интегрирования по времени.

В силу симметрии элементов конструкции двигателя и периодичности процессов, в нем происходящих, можно считать, что все четыре камеры РЛДВПТ на установившемся режиме работы эквивалентны между собой. Различаются они тем, что при построении зависимости какой-либо термодинамической переменной от угловой координаты положения ротора значения функций в смежных камерах сдвинуты на величину  $\pi/2$ . Поэтому в дальнейшем рассматривается только камера 1, имеющая максимальный размер в начале каждого периода.

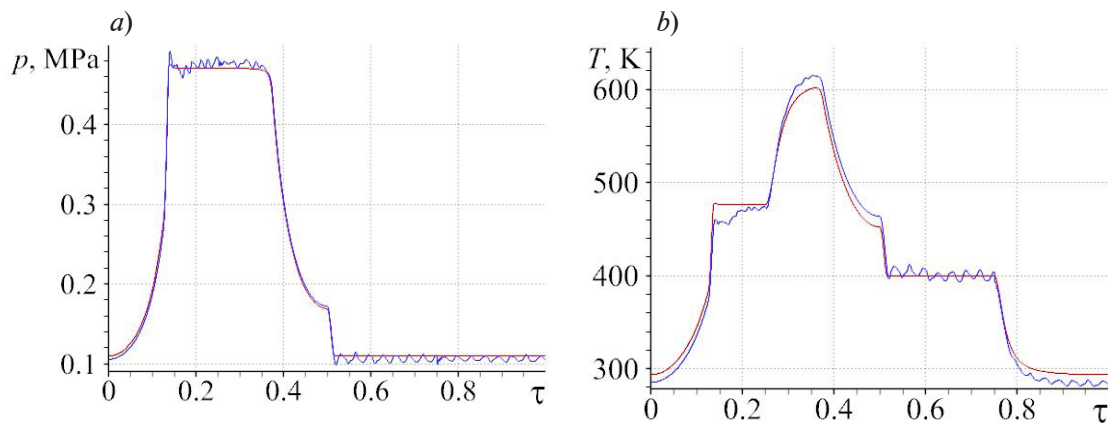


Рис. 4. Зависимости от времени среднемассовых значений давления (а) и температуры (б) в камере 1 за период.

Данные получены моделированием в двумерной постановке (синие линии) и методом узловых значений (красные линии)

Графики на рис. 4 демонстрируют различие зависимостей среднемассовых значений давления и температуры в камере 1 за один период; эти данные получены по методике сосредоточенных значений функций и в результате решения двумерной задачи. Заметное различие в среднемассовых температурах, полученных разными методами, связано с существованием градиента температуры в теплообменном аппарате при расчетах по двумерной модели. На этапе наполнения камеры из нагревателя (временной интервал  $0,250\tau - 0,375\tau$ ) в камеру поступает рабочее тело с температурой, которая выше температуры газа, по сравнению с оценкой по методу сосредоточенных параметров (см. рис. 2). В результате этого наблюдается сильное различие среднемассовых температур на этапе адиабатического расширения ( $0,375\tau - 0,500\tau$ ). Аналогичная ситуация происходит на этапах наполнения камеры из холодильника ( $0,750\tau - 1,000\tau$ ) и адиабатического сжатия ( $0,000\tau - 0,125\tau$ ). Также на такте выпуска рабочего тела из камеры в нагреватель ( $0,125\tau - 0,250\tau$ ) наблюдается заметное отклонение среднемассовых значений от величин, полученных в рамках упрощенной методики. Различия между среднемассовыми значениями давления в приведенном масштабе менее заметны.

Помимо этого, на такте выпуска рабочего тела из камеры в холодильник ( $0,500\tau - 0,750\tau$ ) и на такте наполнения камеры рабочим телом из холодильника ( $0,750\tau - 1,000\tau$ ) наблюдаются повторяющиеся возмущения термодинамических функций, имеющих волновую природу. Возникающий колебательный процесс поведения функций объясняется нелинейной скоростью изменения объема рабочей камеры. Ускоренное перемещение лопастей двигателя приводит к генерации волн сжатия и разрежения. Система, состоящая

из камеры переменного объема и холодного теплообменника, при определенном сочетании параметров, обладает резонансными свойствами.

На рис. 5 приведена зависимость расхода газа через контрольную поверхность газообмена камеры 1 (интерфейс) с теплообменными аппаратами. Отрицательные значения соответствуют истечению газа из камеры, положительные – ее наполнению. Фазы адиабатического сжатия и расширения газа, когда камера изолирована от контакта с теплообменными аппаратами, представлены нулевыми значениями расхода.

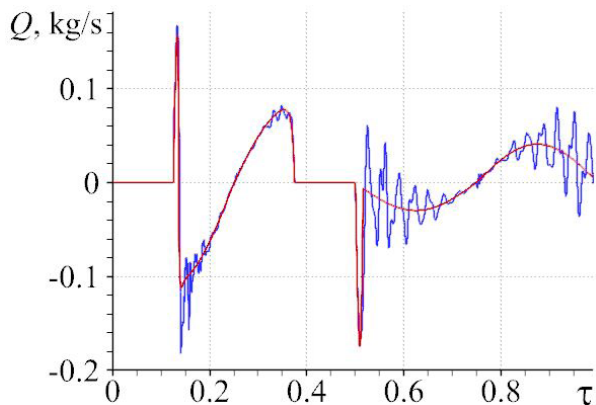


Рис. 5. Зависимости от времени массового расхода газа через контрольную поверхность камеры 1 за период.

Данные получены моделированием в двумерной постановке (синие линии) и методом узловых значений (красные линии)

направлена внутрь теплообменника (см. рис. 5). Следует отметить, что во всех случаях реализуется дозвуковой режим течения рабочего тела.

На рис. 6 приведены двумерные поля температуры и мгновенные линии тока в различные моменты времени. Серия иллюстраций на рис. 6,а, которая включает четыре последовательные стадии изменения объема рабочей камеры от момента контакта камеры с окном до уменьшения ее объема в четыре раза, демонстрирует истечение газа из камеры в горячий теплообменный аппарат. Серия на рис. 6,б относится к наполнению рабочей камеры газом из горячего теплообменника. Аналогичные процессы истечения газа в холодный теплообменный аппарат и наполнение рабочей камеры газом из холодного теплообменника проиллюстрированы на рис. 6,с и д, соответственно.

Результаты моделирования на рис. 6,а свидетельствуют, что быстрое повышение давления, связанное с затеканием газа в камеру, и последующий рост давления в камере из-за уменьшения ее объема, приводят в конечном счете к вытеснению рабочего тела в нагреватель. Однако смена направления течения газа порождает сильную неоднородность значений температуры в нагревателе.

Наличие в камере мертвого объема приводит к тому, что часть рабочего тела не участвует в массообменных процессах с теплообменными аппаратами. Указанное явление можно наблюдать на рис. 6,б, д, где иллюстрируется процесс наполнения рабочей камеры газом. В части камеры (окрестность ротора) остается рабочее тело, имеющее температуру, отличающуюся от температуры газа, поступающего в камеру.

Двумерные расчеты выявляют образование не только нестационарных пристенных струйных течений, но и генерацию вихревых структур в пространстве, окружающем струю. Возникающее сложное вихревое движение способствует выравниванию температуры.

На рис. 7 представлена индикаторная диаграмма, полученная в результате численного интегрирования системы уравнений Навье – Стокса в двумерной постановке и в рамках метода узловых значений функций. При сравнении результатов расчета по двум методам важно отметить изменение уровня давления в теплообменных аппаратах (см. рис. 3,а, б). Вследствие такого изменения различаются процессы адиабатического сжатия и

Следует обратить внимание на момент контакта рабочей камеры с окном входа в горячий теплообменник. Интенсивное движение газа начинается с формирования пристенной струи рабочего тела, направленной внутрь камеры. Процесс отражен в виде кратковременного пика «вверх» в момент  $t = 0,125\tau$  (см. рис. 5). Возникновение такой ситуации свидетельствует либо о неоптимальном расположении окна теплообменного аппарата на корпусе двигателя (сжатие газа в камере недостаточно для истечения из камеры), либо о нерасчетном режиме работы.

Второй пик на графике массового расхода («вниз») возникает в начале такта коммутации камеры с холодильником. В этом случае возникает ситуация быстрого выхлопа, так как давление в камере выше, чем в теплообменном аппарате для отвода тепла. Образованная при этом пристенная струя

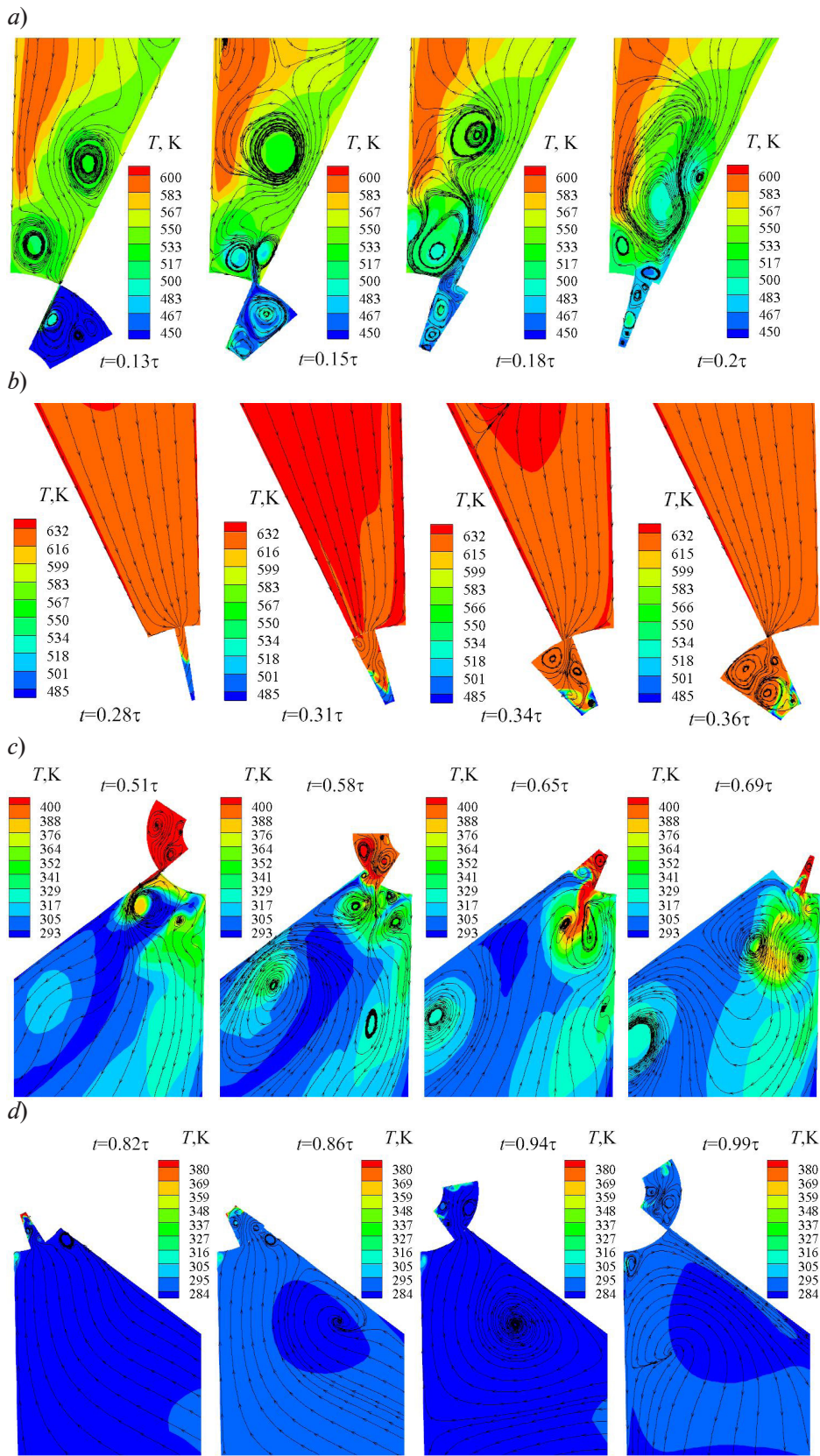


Рис. 6. Температурные поля и мгновенные линии тока в различные моменты контакта камеры с окнами входа в нагреватель (a) и выхода из него (b), окнами входа в холодильник (c) и выхода из него (d)

расширения. В целом, как можно судить по  $pV$ -диаграмме для низкооборотного режима работы РЛДВПТ, метод узлового значения функций удовлетворительно описывает характеристики работы двигателя.

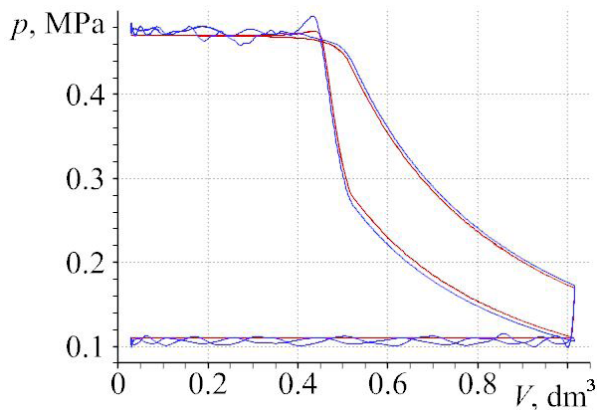


Рис. 7. Сопоставление  $pV$ -диаграмм для камеры I (см. рис. 1), построенных в результате моделирования по двумерной модели (синяя линия) и по методу узловых значений (красная линия)

Одной из основных интегральных характеристик двигателя является работа  $A_0$ , которую он совершает за период:

$$A_0 = \int_t^{t+\tau} W(t) dt. \quad (5)$$

Величина мгновенной мощности  $W$ , которую совершает рабочее тело в камере, была вычислена для двумерного случая путем сложения мгновенных мощностей, совершаемых передней и задней стенками камеры:

$$W = \int_{R_1}^{R_2} p_{w,1} \cdot r \omega_1 \cdot w dr - \int_{R_1}^{R_2} p_{w,2} \cdot r \omega_2 \cdot w dr, \quad (6)$$

где  $p_{w,1(2)}$ ,  $\omega_{1(2)}$  – давление и угловая скорость на передней (с индексом 1) либо задней (с индексом 2) стенках камеры.

Для метода узловых значений функций, где распределение давления в камере в каждый момент времени предполагается однородным, формула (6) упрощается до выражения

$$W = p \cdot (\omega_1 - \omega_2) w \frac{R_2^2 - R_1^2}{2}. \quad (7)$$

В рамках двумерной модели, значение величины работы, полученное при осреднении за промежутки времени, равный 5 с (21-я – 25-я с, 20 циклов), составило  $A_0 = 57,6$  Дж. Оценка же работы по методу сосредоточенных параметров дала значение 51,5 Дж. Различие полученных данных не превосходит 11 %.

К близким результатам можно прийти, если проанализировать мощности тепловыделения в теплообменных аппаратах (рис. 8). Начальным значениям графиков на рис. 8 соответствуют мгновенные мощности тепловыделения, полученные методом сосредоточенных параметров. Поведение кривых на рис. 8 наглядно демонстрирует различие оценок работы, получаемых по разным моделям.

Двумерная модель не только уточняет позиции рабочих точек на индикаторной диаграмме, но и позволяет оценивать гидравлические потери в рассматриваемой системе. Для этого необходимо перейти от оценки величины работы, где используются значения

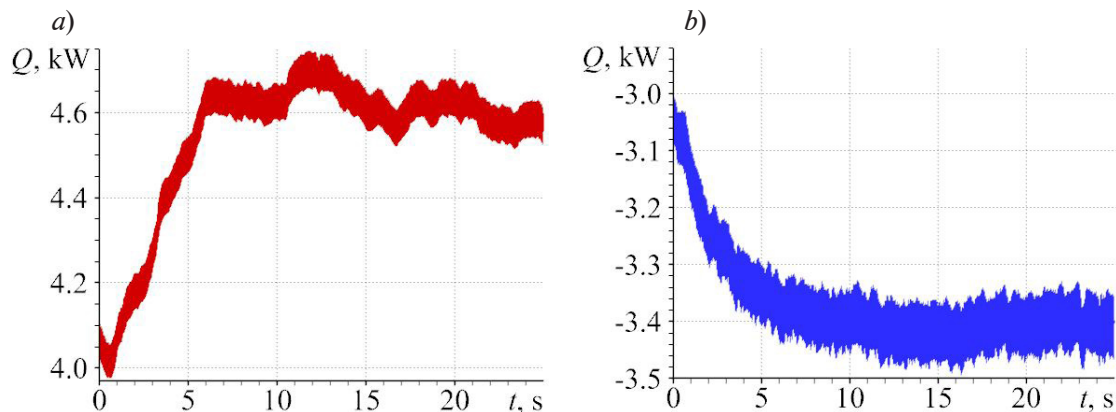


Рис. 8. Изменения во времени мгновенных значений мощности теплового потока в горячем (a) и холодном (b) теплообменниках.

Данные получены по двумерной модели



сил и перемещений, к балансовым соотношениям подведенного и отведенного тепла в системе. Значение мощности тепловыделения за временной промежуток с 21-й по 25-ю секунду составляет в нагревателе 4574 Вт, в холодильнике – 3400 Вт. В таком случае, если применить первый закон термодинамики, то можно получить среднее значение работы, которое составляет  $A_1 = 58,7$  Дж. Определенное выше значение  $A_0$  характеризует работу, которая совершается на валу двигателя. Следовательно, превышение значения  $A_1$  над  $A_0$  можно объяснить тем, что доля работы  $A_1$ , равная  $A_0$ , приходится на вал двигателя, а остальная часть идет на поддержание возникших вихревых и волновых процессов.

### Заключение

В работе проведено математическое моделирование ламинарного течения сжимаемого идеального газа в двумерной модели роторно-лопастного двигателя с внешним подводом тепла. Полученные картины течения при контакте камер с теплообменными аппаратами дают детальное представление о происходящих массообменных процессах. Течение, возникающее в рабочих камерах и теплообменных аппаратах, имеет сложную нестационарную структуру. Истечение газа из рабочей камеры происходит в струйном режиме и сопровождается образованием вихревых структур. Ввиду наличия мертвого объема, наполнение рабочей камеры газом приводит к образованию неоднородного температурного поля.

Проведено сравнение решения, которое получено при интегрировании системы уравнений Навье – Стокса в двумерной постановке, с решением по методу узловых значений функций. При этом основные отличия в поведении газодинамических функций в камерах двигателя появляются вследствие учета пространственного распределения температуры. Наибольшее различие в поведении термодинамических функций наблюдается в моменты времени, когда происходит контакт рабочей камеры с окном входа в горячий теплообменник. Также газообмен с холодным теплообменным аппаратом сопровождается возникновением волнового движения газа с резонансными эффектами.

В целом, при выбранной скорости вращения ротора, решения, полученные разными способами, хорошо согласуются между собой.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Уокер Г. Двигатели Стирлинга. Сокр. пер. с англ. М.: Машиностроение, 1985. 408 с.
2. Гринев Д. В. Конструктивные схемы и принцип работы роторно-лопастных машин // Вестник Псковского государственного университета. Серия «Экономические и технические науки». 2014. № 5. С. 142–150.
3. Гринев Д. В., Донченко М. А., Журавлев Ю. Н., Клейн В. Ф. Кинематический анализ рычажно-кулачкового механизма преобразования движения для роторно-лопастного двигателя с внешним подводом тепла // Технологии и технические средства механизированного производства продукции растениеводства и животноводства: теоретический и научно-практический журнал. 2008. № 80. С. 247–255.
4. Семенов С. Н., Перминов А. Л., Лукьянов Ю. Н., Тихонов С. И. Анализ методов расчета параметров рабочих процессов в поршневых двигателях Стирлинга // Вестник Псковского государственного университета. Серия «Технические науки». 2016. № 4. С. 20–27.
5. Журавлёв Ю. Н., Плохов И. В., Лукьянов Ю. Н. и др. Расчет и проектирование роторно-лопастной машины с внешним подводом теплоты: Псков: Изд-во Псковского государственного университета, 2012. 72 с.
6. Коёкин В. Ю., Булович С. В. Математическое моделирование теплофизических процессов в роторно-лопастном двигателе с внешним подводом тепла на основе метода сосредоточенных параметров // Неделя науки ФизМех: сборник статей Всероссийской научной конференции, 3–7 апреля 2023 г. СПб.: Политех-Пресс, 2023. С. 90–93.
7. Коёкин В. Ю., Булович С. В. Математическое моделирование методом узлового анализа теплофизических процессов в роторно-лопастном двигателе с внешним подводом тепла // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 49–58.

8. Семенов С. Н. Расчет коэффициента теплоотдачи в роторно-лопастном двигателе с внешним подводом теплоты // Известия Тульского государственного университета. Серия «Технические науки». 2013. № 6-1. С. 245–252.

9. Донченко М. А., Морозова О. В., Семенов С. Н. Определение условий теплообмена корпуса лопастной группы роторно-лопастного двигателя с внешним подводом теплоты // Вестник Псковского государственного университета. Серия «Экономические и технические науки». 2013. № 3. С. 72–77.

10. Коёкин В. Ю., Булович С. В. Численное моделирование термогазодинамики роторно-лопастного двигателя с внешним подводом тепла // Неделя науки ФизМех: сборник статей Всероссийской научной конференции, 3–7 апреля 2023 г. СПб.: Политех-Пресс, 2023. С. 93–96.

## REFERENCES

1. Walker G., Stirling engines, Clarendon Press, Oxford, 1980.
2. Grinev D. V., Constructive schemes and principles of operation of the rotor-blade machines, Vestnik PskovGU. Ser. Ekonomicheskiye i Tekhnicheskiye nauki [Herald of Pskov State University, Ser. Econom. and Techn. Sci.] (5) (2014) 142–150 (in Russian).
3. Grinev D. V., Donchenko M. A., Zhuravlev Yu. N., Klein V. F., Kinematicheskiy analiz rychnozhno-kulachkovogo mekhanizma preobrazovaniya dvizheniya dlya rotno-lopastnogo dvigatelya s vneshnim podvodom tepla [A kinematic analysis of the cam-and-lever arrangement of the motion conversion for a rotary-blade engine with external heat supply], Technologies and Technical Means of Mechanized Production of Vegetable Cultivation and Animal Husbandry (Learned and Scientific-Practical Journal). (80) (2008) 247–255 (in Russian).
4. Semyonov S. N., Perminov A. L., Lukyanov Yu. N., Tikhonov S. I., Analysis methods of calculation workflow parameters in the piston Stirling engine, Vestnik PskovGU. Ser. Tekhnicheskiye nauki [Herald of Pskov State University, Ser. Techn. Sci.] (4) (2016) 20–27 (in Russian).
5. Zhuravlev Yu. N., Plokhov I. V., Lukyanov Yu. N., et al., Raschet i proyektirovaniye rotornolopastnoy mashiny s vneshnim podvodom teploty [Calculation and designing of a rotary-blade machine with external heat supply], The Pskov State University Publishing, Pskov, 2012 (in Russian).
6. Koyokin V. Yu., Bulovich S. V., Matematicheskoye modelirovaniye teplofizicheskikh protsessov v rotno-lopastnom dvigatele s vneshnim podvodom tepla na osnove metoda sosredotochennykh parametrov [Simulation of thermal-physical processes in a rotary-blade engine with external heat supply, using the lumped parameters method as the base], The Science Week at FizMekh: The Information Package of The All-Russian Scientific Conference, 03–07 April, 2023, SPbPU, Politekh-Press, St. Petersburg (2023) 90–93 (in Russian).
7. Koyekin V. Yu., Bulovich S. V., Simulation of thermophysical processes in a rotor-blade engine with external heat supply by nodal analysis, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 49–58 (in Russian).
8. Semenov S. N., Calculation of the heat transfer coefficient in a rotor-and-blade engine with external heat supply, Izvestiya of Tula State University. Ser. Techn. Sci. (6-1) (2013) 245–252 (in Russian).
9. Donchenko M. A., Morozova O. V., Semenov S. N., Determining the heat exchange conditions of the blade group housing of the rotor-and-blade engine with external heat supply, Vestnik PskovGU. Ser. Ekonomicheskiye i Tekhnicheskiye nauki [Herald of Pskov State University, Ser. Econom. and Techn. Sci.] (3) (2013) 72–77 (in Russian).
10. Koyokin V. Yu., Bulovich S. V., Chislennoye modelirovaniye termogazodinamiki rotno-lopastnogo dvigatelya s vneshnim podvodom tepla [Numerical simulation of thermogas dynamics in a rotary-blade engine with external heat supply], The Science Week at FizMekh: The Information Package of The All-Russian Scientific Conference, 03–07 April, 2023, SPbPU, Politekh-Press, St. Petersburg (2023) 93–96 (in Russian).





## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

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

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

koiokin@mail.ru

ORCID: 0009-0001-2994-3788

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

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

bulovic@yandex.ru

ORCID: 0000-0001-9624-1228

## THE AUTHORS

**KOYOKIN Vadim Yu.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

koiokin@mail.ru

ORCID: 0009-0001-2994-3788

**BULOVICH Sergey V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

bulovic@yandex.ru

ORCID: 0000-0001-9624-1228

*Статья поступила в редакцию 11.12.2023. Одобрена после рецензирования 04.07.2024. Принята 04.07.2024.*

*Received 11.12.2023. Approved after reviewing 04.07.2024. Accepted 04.07.2024.*

Научная статья

УДК 532.542.4

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17403>

## ПРОСТРАНСТВЕННО-ПЕРИОДИЧЕСКОЕ ТЕЧЕНИЕ И ТЕПЛООБМЕН В КАНАЛЕ ПРЯМОУГОЛЬНОГО СЕЧЕНИЯ С ОДНОЙ ОРЕБРЕННОЙ СТЕНКОЙ

В. В. Рис <sup>✉</sup>, С. А. Галаев, А. М. Левченя

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

<sup>✉</sup> [vvris@yandex.ru](mailto:vvris@yandex.ru)

**Аннотация.** Методом численного моделирования развитого пространственно-периодического течения и стабилизированного теплообмена несжимаемой среды с числом Прандтля, равным 0,7, в канале прямоугольного поперечного сечения с односторонним внутренним оребрением получены систематические данные о влиянии оребрения на параметры относительного (по сравнению с гладким каналом) увеличения гидравлического сопротивления  $\varepsilon_p$  и теплоотдачи  $\varepsilon_q$  в диапазоне значений числа Рейнольдса от 50 до 8 млн. Установлено, что в ламинарном режиме  $\varepsilon_q$  невелико и составляет около 10%, а  $\varepsilon_p$  превосходит величину 2,5. В турбулентном режиме величина  $\varepsilon_q$  в зависимости от числа Рейнольдса ведет себя немонотонно, диапазон ее изменения составляет 1,5–2,6, в то время как  $\varepsilon_p$  возрастает от 3,5 до 7,0.

**Ключевые слова:** оребренный канал, периодическое течение, численное моделирование, модель RANS, модель LES-WALE

**Финансирование:** Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-29-00094).

**Для цитирования:** Рис В. В., Галаев С. А., Левченя А. М. Пространственно-периодическое течение и теплообмен в канале прямоугольного сечения с одной оребренной стенкой // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 34–47. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17403>

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.17403>

## A SPATIALLY PERIODIC FLOW AND HEAT TRANSFER IN A RECTANGULAR CHANNEL WITH ONE RIBBED WALL

V. V. Ris <sup>✉</sup>, S. A. Galaev, A. M. Levchenya

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

<sup>✉</sup> [vvris@yandex.ru](mailto:vvris@yandex.ru)

**Abstract.** The systematic data on the effect of ribbing on the parameters of a relative (in comparison with a smooth channel) increase in hydraulic resistance  $\varepsilon_p$  and heat transfer  $\varepsilon_q$  in the range of Reynolds numbers from 50 to  $8 \cdot 10^6$  has been obtained by numerical modeling of a developed spatially periodic flow and stabilized heat transfer of incompressible gas with a Prandtl number of 0.7 in a rectangular channel with one-sided internal ribbing. In the laminar regime, the  $\varepsilon_q$  value was found to be small and amounted about 10%, and  $\varepsilon_p$  value exceeding 2.5. In the turbulent regime, the  $\varepsilon_q$  value behaved nonmonotonic depending on the Reynolds number, the range of its variation was 1.5–2.6, while  $\varepsilon_p$  increased from 3.5 to 7.0.

**Keywords:** ribbed channel, periodic flow, heat transfer enhancement, RANS model, LES-WALE model

**Funding:** The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 23-29-00094).

**For citation:** Ris V. V., Galaev S. A., Levchenya A. M., A spatially periodic flow and heat transfer in a rectangular channel with one ribbed wall, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 34–47. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17403>

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

## Введение

Конвективный теплообмен в каналах прямоугольного сечения, у которых с внутренней стороны стенок периодически расположены невысокие ребра, исследуется уже на протяжении долгого времени. Существенная интенсификация теплообмена в оребренных каналах, по сравнению с гладкими каналами такого же сечения, послужила основанием для их применения в конвективных системах охлаждения лопаток газовых турбин и в теплообменном оборудовании, предназначенном для подогрева сред под действием солнечной радиации.

Выполненные экспериментальные исследования каналов прямоугольного сечения с внутренним оребрением позволили сформулировать ряд рекомендаций по выбору геометрических параметров, с которыми достигается наибольшая интенсификация теплоотдачи [1]. Высота ребер  $e$  должна быть такой, чтобы поперечное сечение канала сужалось приблизительно на 10%. При этом высота и ширина ребра должны быть сопоставимы между собой. Близкий к оптимальному шаг между ребрами  $P$  равен  $10e$ . Ребра, установленные под углом к продольной оси канала, более эффективны, чем строго поперечные. Оптимальный угол установки ребер  $\alpha$  находится в диапазоне от  $45^\circ$  до  $60^\circ$ .

Наибольший объем экспериментальных данных получен для значений числа Рейнольдса  $Re$  в диапазоне от  $10^4$  до  $6 \cdot 10^4$ . Течение и теплообмен исследованы в каналах прямоугольного сечения с  $W/H \geq 1$  ( $H$  и  $W$  – высота и ширина сечения). С прицелом на каналы охлаждения лопаток газовых турбин более подробно исследованы оребренные каналы, по длине которых помещается до 20 секций, включающих ребро и гладкий участок. При этом принято считать (на основании разной степени детализации данных о распределении температуры на оребренной стенке), что течение и теплоотдача стабилизируются после четвертой секции.

Физический и численный эксперименты [2 – 4], выполненные для сравнительно коротких каналов, устойчиво демонстрируют уменьшение коэффициента интенсификации средней теплоотдачи  $\varepsilon_q$  с увеличением числа Рейнольдса. Коэффициент в экспериментальных работах определяется как

$$\varepsilon_q = Nu/Nu_{sm},$$

где  $Nu$  – среднее число Нуссельта в исследованном оребренном канале,  $Nu_{sm}$  – число Нуссельта для развитого течения и стабилизированной теплоотдачи в гладком канале того же сечения.

Во всех перечисленных работах, для каналов с ребрами, установленными под углом  $45^\circ$ , в диапазоне значений числа  $Re$  от  $10^4$  до почти  $2 \cdot 10^5$ , получены данные, которые трактуются как монотонное, замедляющееся с ростом числа Рейнольдса снижение коэффициента  $\varepsilon_q$  от приблизительно трех до двух. Только в статье [3] отмечено некоторое увеличение  $\varepsilon_q$ , начиная со значения  $Re \approx 1,4 \cdot 10^5$ .

Наше предыдущее численное исследование развитого пространственно-периодического течения и стабилизированной теплоотдачи в односторонне оребренном канале, который подобен каналу, описанному в статье [2], отражено в публикации [5]. В этом исследовании рассмотрена задача о развитом турбулентном течении и

стабилизированном теплообмене при числах Рейнольдса от  $5 \cdot 10^4$  до  $2 \cdot 10^5$  и числе Прандтля, равном 0,7. Рассмотрен канал прямоугольного сечения с отношением сторон  $W/H = 1,5$ . Ребра квадратного сечения, расположенные на одной из широких стенок и перегородающие поперечное сечение на 10%, наклонены относительно продольной оси канала на  $45^\circ$ . Для количественной оценки влияния оребрения на течение и теплообмен интегральные параметры (коэффициент гидравлических потерь и число Нуссельта) сравниваются с рассчитанными параметрами развитого течения и стабилизированного теплообмена в гладком канале. Результаты численного моделирования для оребренного канала сопоставлены также с опубликованными экспериментальными данными, полученными в отчасти аналогичных условиях [2]. Наши расчетные данные для коэффициента гидравлических потерь удовлетворительно согласовались с результатами эксперимента. Результаты расчетов для числа Нуссельта отличаются от экспериментальных не более чем на 11%, однако тенденции изменения теплоотдачи с ростом числа Рейнольдса в численном и физическом моделировании получились разными. В эксперименте при изменении числа  $Re$  от  $1,1 \cdot 10^5$  до  $1,8 \cdot 10^5$  коэффициент  $\epsilon_q$  (в котором числитель – среднее число  $Nu$  на гладкой части оребренной стенки, а знаменатель – среднее число  $Nu$  в гладком канале) снизился от значения 1,75 до 1,60, а по данным численного моделирования в этом диапазоне чисел Рейнольдса, значение  $\epsilon_q$  возросло от 1,76 до 1,79.

Настоящая работа продолжает исследования, опубликованные в статье [5], и отражает расширенный анализ результатов численного моделирования задачи пространственно-периодического течения и теплообмена в канале прямоугольного сечения с одной оребренной стенкой (задача та же, как представленная в работе [5]). Здесь рассмотрен расширенный диапазон значений числа Рейнольдса, который охватывает ламинарный ( $50 \leq Re \leq 2,0 \cdot 10^3$ ) и турбулентный ( $2,5 \cdot 10^3 \leq Re \leq 8 \cdot 10^6$ ) режимы. Численное моделирование выполнено с помощью пакета программ ANSYS Fluent 2021 R1.

### Постановка задачи

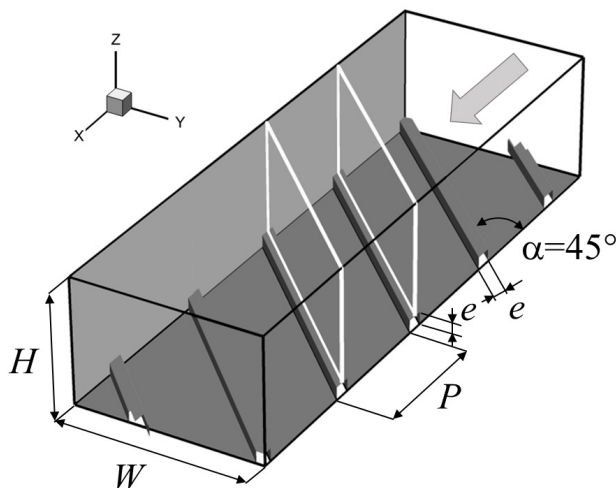


Рис. 1. Изображение модели канала с оребренной стенкой к постановке задачи:

$H$ ,  $W$  – высота и ширина сечения;  $P$  – шаг между ребрами;  $e$  – высота и толщина каждого ребра;  $\alpha$  – угол установки ребер; контур расчетной области показан светлыми линиями; стрелка указывает направление течения в канале

Канал имеет прямоугольное сечение с отношением сторон  $H/W = 1/1,5$  (рис. 1). Поперек одной из широких стенок канала (нижняя на рис. 1) расположены ребра квадратного сечения ( $e \times e = 0,1H \times 0,1H$ ); они лежат периодически, с шагом  $P = H$ , под углом  $\alpha = 45^\circ$  к продольной оси канала  $x$ .

В таком канале рассматриваются ламинарные и турбулентные течения среды с числом Прандтля  $Pr = 0,7$  и числами Рейнольдса  $Re = U_b \cdot D_h / \nu$  ( $U_b$  – среднерасходная скорость,  $D_h$  – гидравлический диаметр) в диапазоне от 50 до  $8 \cdot 10^6$ . Теплообмен вынужденной конвекцией в канале происходит вследствие разности среднemasсовой температуры среды  $T_b$  и температуры стенок  $T_w$  (одинаковой для всех стенок). Свойства среды приняты постоянными.

Считается, что течение в канале развитое, а теплообмен стабилизированный. Для канала постоянного сечения с периодически установленными препятствиями

(ребрами) заявленные свойства течения и теплообмена реализуются при условии пространственной периодичности поля скорости (с шагом  $P$ ) в направлении оси  $x$  (система координат указана на рис. 1):



$$V(x, y, z, t) = V(x + nP, y, z, t) \quad n = 1, 2, \dots \quad (1)$$

В развитии течения падение («потери») давления  $\hat{p}$ , осредненного по поперечному сечению, на расстояниях, равных шагу между ребрами, будут одинаковыми:

$$\Delta \hat{p} = \hat{p}(x + nP, t) - \hat{p}[x + (n + 1)P, t] = \beta P = \text{const}. \quad (2)$$

Используя величину  $\beta = \Delta \hat{p} / P$ , можно ввести локальное модифицированное давление

$$p^*(x, y, z, t) = p(x, y, z, t) + \beta x, \quad (3)$$

для которого условие периодичности будет выражаться так же, как и для скорости:

$$p^*(x, y, z, t) = p^*(x + nP, y, z, t) \quad n = 1, 2, \dots \quad (4)$$

Для гладкого канала, когда осредненное давление  $\hat{p}$  падает линейно, величина  $\beta$  равна  $d\hat{p} / dx$ .

В задачах теплообмена, при вынужденной конвекции, условие периодичности для поля температуры реализуется существенно различным образом и зависит от тепловых граничных условий. При заданном на стенках удельном тепловом потоке  $q_w = \text{const}$  стабилизированному теплообмену соответствует линейное изменение вдоль потока среднemasсовой температуры  $T_b$ , поэтому поле температуры преобразуется по аналогии с выражениями (3) и (4):

$$T^*(x, y, z, t) = T(x, y, z, t) - \gamma x, \quad (5)$$

$$T^*(x, y, z, t) = T^*(x + nP, y, z, t) \quad n = 1, 2, \dots, \quad (6)$$

где  $\gamma = q_w \Pi / GC$  ( $\Pi$  – периметр канала,  $G$  – массовый расход,  $C$  – теплоемкость среды); для гладкого канала  $\gamma = dT_b / dx$ .

При заданном нами условии постоянной температуры стенок  $T_w$  формулировка свойства периодичности для температуры усложняется, ввиду экспоненциального стремления среднemasсовой температуры потока  $T_b(x)$  к  $T_w$  при постоянном значении коэффициента теплоотдачи

$$\alpha = q_w(x) / [T_w - T_b(x)].$$

Этим условиям удовлетворяют следующие соотношения для локальной и среднemasсовой температуры [6]:

$$\frac{T - T_w}{T_b(x) - T_w} = \theta(x, y, z, t), \quad (7)$$

$$\lambda = \frac{d(T_b(x) - T_w) / dx}{T_b(x) - T_w} = \text{const} = \lambda(x). \quad (8)$$

Выражение (7) определяет безразмерную температуру  $\theta$ , которая для пространственно-периодического течения также является пространственно-периодической функцией:

$$\theta(x, y, z, t) = \theta(x + nP, y, z, t) \quad n = 1, 2, \dots \quad (9)$$

Выражением (8) задается экспоненциальное убывание разности температур  $T_b(x) - T_w$  вдоль канала. В выражении (8) постоянное значение логарифмической производной справедливо для гладкого канала, а периодическая функция  $\lambda(x)$  – для канала с периодически меняющейся геометрией.

Сформулированные условия периодичности одинаково подходят для описания развитого течения и стабилизированного теплообмена как в каналах с периодическими

изменениями геометрии, так и в гладких каналах. Эти же условия используются при моделировании нестационарных задач, в том числе при моделировании турбулентных течений вихреразрешающими подходами, такими как метод прямого численного моделирования и метод крупных вихрей.

### Вычислительные и методические аспекты

Расчетная область включает участок канала (секцию) длиной, равной шагу установки ребер  $P$ . На рис. 1 контур расчетной области, имеющей форму косоугольного параллелепипеда, показан светлыми линиями. Во всех режимах свойства среды принимались постоянными. В препроцессоре пакета Fluent средой считался воздух (при атмосферном давлении), имеющий входную среднemasсовую температуру 293 К (число Прандтля  $Pr = 0,7$ ), а температура стенок принималась равной 333 К.

Течения с числом Рейнольдса  $Re \leq 2,0 \cdot 10^3$  моделировались как ламинарные. Турбулентные течения при  $2,5 \cdot 10^3 \leq Re \leq 3,0 \cdot 10^4$  моделировались методом LES-WALE, при  $Re > 3,0 \cdot 10^4$  – методом RANS.

Такое сочетание методов моделирования представляется рациональным с точки зрения использования вычислительных ресурсов и доказательства адекватности полученных результатов.

Методом крупных вихрей LES-WALE (Large Eddy Simulation – Wall-Adapting Local Eddy-viscosity) интегрировались отфильтрованные нестационарные уравнения Навье – Стокса и энергии. Расчеты выполнены с применением метода SIMPLE. Производные по времени вычислялись по неявной схеме второго порядка. Пространственная дискретизация градиентов осуществлялась по схеме Гаусса – Грина, конвективных потоков импульса – по центральной схеме, конвективных операторов уравнения энергии – по противопоточной схеме второго порядка.

Методом RANS (Reynolds-averaged Navier – Stokes) интегрировались осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье – Стокса и энергии для статистически стационарного турбулентного течения. Для определения турбулентных напряжений использована гипотеза Буссинеска, а для турбулентной вязкости – модель турбулентности  $k$ - $\omega$  SST. Все решения для базовых переменных ( $p$ ,  $\mathbf{V}$  и  $T$ ) получены со вторым порядком точности по пространственным переменным.

Для всех вариантов расчета ставились следующие граничные условия:

на твердых границах – прилипание и постоянство температуры  $T_w$ ;

на входной границе – среднemasсовая температура  $T_{b, in}$  и расход воздуха  $G$ , который обеспечивает желаемое значение числа Рейнольдса.

В пакете Fluent условия периодичности реализованы по методике, описанной в работе [6].

Все расчеты выполнены на сетках, состоявших из гексаэдральных ячеек. Для расчета ламинарных режимов использована сетка размерностью 585 тыс. ячеек. Расчеты с использованием метода LES-WALE выполнялись на сетке размерностью 4,677 млн. ячеек. Максимальные размеры ячеек в ядре потока в переменных закона стенки ( $\Delta^+$ ) на режиме с числом Рейнольдса  $3 \cdot 10^4$  составили 15 безразмерных единиц. Для аккуратного разрешения спектра вихрей в ограниченных стенками течениях требуются сетки с величиной  $\Delta^+$ , не превышающей 20. Шаг по времени задавался равным  $10^{-4}$  с, что составляет приблизительно  $3 \cdot 10^{-3}$  характерного конвективного времени  $\tau_{conv}$  ( $\tau_{conv} = P/U_b$ ) на режиме с числом Рейнольдса  $3 \cdot 10^4$ . Для каждого значения числа Рейнольдса расчеты проведены для промежутка времени не менее  $200 \tau_{conv}$ . После окончания периода установления, не превышавшего  $50 \tau_{conv}$ , расчет выполнялся со сбором статистики. Таким образом, осредненные параметры течения были получены за время не менее, чем  $150 \tau_{conv}$ .

Расчеты с использованием метода RANS выполнялись на сетке размерностью 8,355 млн. ячеек. Подробное обоснование выбора сетки для режимов  $Pr = 0,7$  и  $Re \geq 10^5$  в гладком и оребренном каналах представлено в нашей статье [5]. Там же показано, что в этом диапазоне режимных параметров на двумерной сетке с такими же параметрами дискретизации, что и в упомянутой пространственной сетке, результаты расчета методом RANS развитого турбулентного течения и стабилизированного теплообмена в канале со всеми гладкими стенками совпадают с данными корреляционных формул Никурадзе [7] и

Петухова – Кириллова [8], с точностью не менее 3% для коэффициента сопротивления и не менее 1,5% для числа Нуссельта.

Коэффициент гидравлического сопротивления  $\zeta$  рассчитывался по перепаду осредненного давления на входной и выходной границах. Для расчета коэффициента теплоотдачи  $\alpha$  и числа Нуссельта  $Nu$  использовались локальные и средние удельные тепловые потоки.

Для двух значений числа Рейнольдса, равных  $1,5 \cdot 10^5$  и  $6,0 \cdot 10^5$ , выполнены расчеты с использованием модели турбулентности  $k-\omega$  SST, с поправкой на кривизну линий тока (SST-CC) [9]. Провести расчеты с моделью SST-CC удалось, интегрируя нестационарные уравнения Рейнольдса методом URANS (Unsteady RANS). Причиной нестационарности стало резкое уменьшение турбулентной вязкости  $\nu_t$  с введением поправки на кривизну линий тока: при значении  $Re = 1,5 \cdot 10^5$  среднеобъемная величина  $\nu_t$  уменьшилась в 4 раза, а при  $Re = 6 \cdot 10^5$  – в 2,7 раза. Вместе с тем осредненные по времени значения коэффициента сопротивления и числа Нуссельта, полученные с помощью модели SST-CC, незначительно отличались от значений, полученных методом RANS с моделью SST без поправки. Для значений коэффициента  $\zeta$  и числа  $Nu$  (они будут представлены далее, см. табл. 3), получено такое расхождение: для  $\zeta$  – 2,0%, для  $Nu$  – 0,3% (при  $Re = 1,5 \cdot 10^5$ ); для  $\zeta$  – 2,0%, для  $Nu$  – 3,0% (при  $Re = 6,0 \cdot 10^5$ ). Такие отличия были признаны достаточно малыми, для того чтобы отдать предпочтение методике RANS без учета поправки в модели SST вместо гораздо более ресурсозатратной методики URANS с моделью SST-CC.

### Анализ результатов

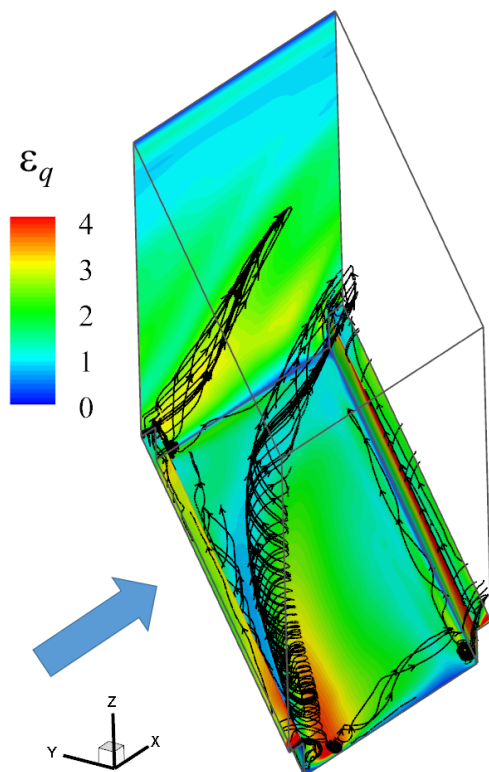


Рис. 2. Статистически осредненная картина течения, рассчитанная методом LES-WALE ( $Re = 2 \cdot 10^4$ ).

Линии тока (черного цвета) нанесены на поверхности вихревых трубок.

Окраска стенок канала соответствует цветовой шкале локальной величины коэффициента интенсификации теплоотдачи  $\varepsilon_q = q_w/q_{w, sm}$ . Стрелка указывает направление расходного течения

Рис. 2 и 3 представляют картины течения в диапазоне значений числа Рейнольдса, охватывающем ламинарный режим течения ( $Re = 10^3$ , рис. 3, *a, d, g*) и турбулентный режим при умеренном ( $Re = 2 \cdot 10^4$ , см. рис. 2 и 3, *b, e, h*) и повышенном ( $Re = 2 \cdot 10^6$ , рис. 3, *c, f, i*) значениях числа Рейнольдса. На рис. 3 вид поперечного сечения дан в направлении расходного течения (направление на рис. 2 показано стрелкой). Следует отметить, что на рис. 3 показано только одно поперечное сечение оребренного канала, и на протяжении межреберного шага картины течения в разных поперечных сечениях будут разными. Однако общие свойства течения можно проиллюстрировать, пользуясь только одним сечением. Решение для ламинарного режима получено численным интегрированием стационарных уравнений Навье – Стокса. Нестационарное решение для  $Re = 2 \cdot 10^4$  получено методом LES-WALE, а на рис. 2 и 3, *b* показаны картины для величин, статистически осредненных во времени. Стационарное решение для  $Re = 2 \cdot 10^6$  получено методом RANS. Скорости на рис. 3 нормированы на средне-массовую скорость  $U_b$ , температура  $\theta$  – по формуле (7).

Рис. 2 показывает крупномасштабный вихрь, который играет основную роль в интенсификации теплоотдачи в оребренных каналах (эта роль признается во многих публикациях; см., например, работы [1, 2]).

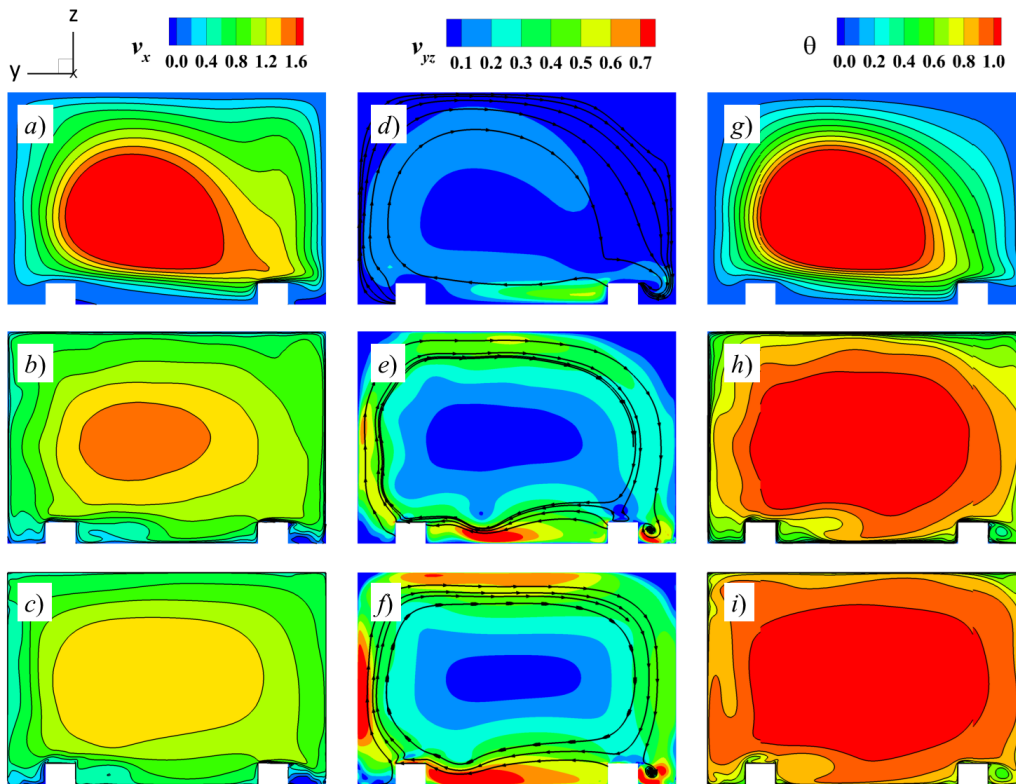


Рис. 3. Распределения температуры  $\theta$  ( $g, h, i$ ) и компонент скорости ( $a - f$ ) в поперечном сечении канала (вид в направлении течения); показаны продольная компонента скорости  $v_x$  ( $a, b, c$ ), модуль поперечной скорости  $|v_{yz}|$  и линии тока (черного цвета) ( $d, e, f$ ). Расчетные режимы,  $Re: 10^3$  ( $a, d, g$ ),  $2 \cdot 10^4$  ( $b, e, h$ ),  $2 \cdot 10^6$  ( $c, f, i$ )

Такой вихрь (назовем его кромочным) образуется вследствие срыва потока с задней кромки верхней грани ребра в той его части, которая раньше других встречает набегающий поток. В межреберном промежутке кромочный вихрь располагается наискось вдоль длинной диагонали параллелограмма, очерченного ребрами и боковыми стенками. Это позволяет назвать кромочный вихрь также диагональным. На рис. 2 видны другие, относительно слабые вихри, расположенные вдоль верхней кромки ребра и вблизи каждого из пересечений оребренной стенки с поверхностями боковых стенок и ребер. Кроме того, рис. 2 ясно демонстрирует, что под диагональным вихрем на гладкой части оребренной стенки появляется область четырехкратного превышения теплоотдачи. На неоребреной боковой стенке видны области трехкратного превышения теплоотдачи, появление которых связано с приближением диагонального вихря.

На рис. 3,  $d, e, f$  представлены распределения модуля поперечных компонент скорости  $|v_{yz}| = (v_y^2 + v_z^2)^{0.5}$  и линии тока в поле поперечной скорости. Общим для всех режимов является формирование в оребренном канале течения, закрученного по часовой стрелке, которое мы назовем продольным вихрем. Он формируется наклоном ребер относительно продольного течения. Ребра выступают здесь в роли лопаток-завихрителей. Расположение ребер на периферии потока приводит к тому, что скорости поперечного течения достигают максимальных значений вблизи стенок и снижаются по мере приближения к центру поперечного сечения. В уровень интенсивности продольного вихря вносят свой вклад и диагональные вихри, имеющие то же направление продольной ( $x$  компоненты) закрутки.

На рис. 2 видно, как под действием продольного вихря сгенерированный ребром диагональный вихрь распространяется одновременно вдоль и вверх по боковой стенке. Следы диагональных вихрей, можно различить (см. рис. 3) на боковых стенках и верхней неоребреной стенке по деформации изолиний скорости и пятнам пониженной температуры вблизи этих стенок.



Величина максимальной поперечной скорости сильно зависит от числа Рейнольдса (см. рис. 3): в ламинарном режиме она составляет приблизительно  $0,1U_b$ , в турбулентных режимах –  $(0,4 - 0,5)U_b$  при  $Re = 2 \cdot 10^4$  и  $(0,6 - 0,7)U_b$  при  $Re = 2 \cdot 10^6$ . Для периодического течения, сформировавшегося под влиянием большого числа ребер на участке установления течения, сам по себе продольный вихрь не оказывает влияния на интенсификацию теплоотдачи; он лишь деформирует поле продольной скорости и через эту деформацию и свое влияние на распространение кромочного, диагонального вихря участвует в формировании уровня интенсификации теплоотдачи.

Распределения продольной скорости (см. рис. 3, *a, b, c*) показывают, что ребра и создаваемая ими система крупных, статистически стационарных вихрей способствуют сильной неравномерности продольной скорости для показанных режимов течения. Неравномерность выражается в том, что продольная скорость в ядре потока оребренного канала выше, чем в гладком канале, а часть проходного сечения, занимаемая ядром, – меньше. Такой же вывод можно сделать, если проанализировать распределения температуры (см. рис. 3, *g, h, i*).

На рис. 4 показаны значения коэффициента гидравлического сопротивления секции оребренного канала ( $\zeta$ ) в зависимости от числа Рейнольдса.

Коэффициент  $\zeta$  определен следующим образом:

$$\zeta = 2(\langle p_2 \rangle - \langle p_1 \rangle) / \rho U_b^2,$$

где  $\langle p_2 \rangle$  и  $\langle p_1 \rangle$  – средние давления на входной и выходной плоскостях потока, соответственно.

Линиям 1 и 2 отвечают, соответственно, степенные функции

$$\zeta_1 = 26,0 \cdot Re^{-0,787}, \quad \zeta_2 = 0,456 \cdot Re^{-0,169}.$$

Видно, что при  $Re \leq 4 \cdot 10^4$  обе зависимости коэффициента гидравлического сопротивления от числа  $Re$  несколько слабее, чем у гладкого канала, для которого в ламинарном режиме

$$\zeta_{sm} = 60,65 \cdot (P/D_h) Re^{-1} = 50,30 Re^{-1},$$

а в турбулентном режиме [11] –

$$\zeta_{sm} \propto (P/D_h) Re^{-0,25},$$

где отношение  $P/D_h = 1/1,2$ .

Такое поведение зависимости  $\zeta(Re)$  для оребренного канала обусловлено формированием сложной крупномасштабной вихревой структуры, которая уподобляет развитое течение в оребренном канале течениям в местных сопротивлениях. Начиная с значения  $Re \approx 5 \cdot 10^4$ , величина коэффициента  $\zeta$  постепенно приближается к предельному значению 0,06 при  $Re \geq 4 \cdot 10^6$ . Значение  $Re = 4 \cdot 10^6$  можно принять за начальное для не зависящего от числа Рейнольдса режима сопротивления, существующего в развитом турбулентном течении по односторонне оребренному каналу с прямоугольным сечением и прочими геометрическими параметрами, описанными при постановке задачи.

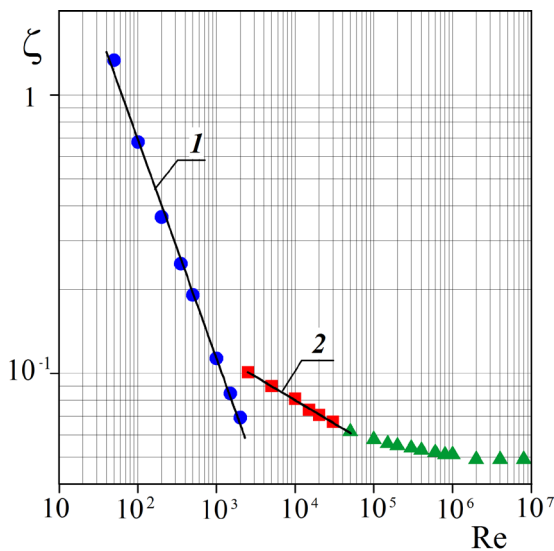


Рис. 4. Расчетные (символы) и аппроксимирующие (линии 1, 2) зависимости коэффициента гидравлического сопротивления от числа Рейнольдса для ламинарного (линия 1 и круглые символы) и турбулентного (линия 2, квадраты и треугольники) режимов.

Для расчетов использованы методы LES-WALE (красные квадраты) и RANS (зеленые треугольники)

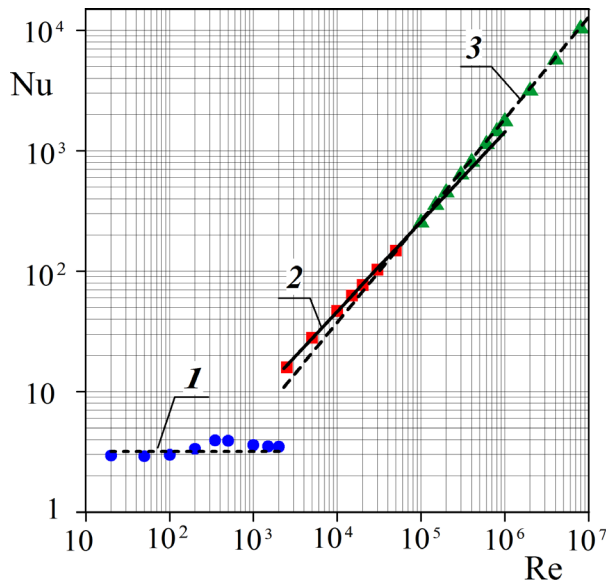


Рис. 5. Зависимости числа Нуссельта от числа Рейнольдса для ламинарного (синие круглые символы) и турбулентного (красные квадраты и зеленые треугольники для методов LES-WALE и RANS, соответственно) режимов; линии 2, 3 – аппроксимации расчетных данных, полученных указанными методами, соответственно; линия 1 –  $Nu_{sm} = 3,17$

Таблица 1

**Расчетные зависимости параметров сопротивления и теплоотдачи от числа Рейнольдса в секции оребренного канала (ламинарный режим течения)**

Re	Значение параметра			
	$\zeta$	$\varepsilon_p$	Nu	$\varepsilon_q$
50	1,33	1,19	2,92	0,92
100	0,68	1,37	3,00	0,95
200	0,37	1,59	3,35	1,06
350	0,25	1,79	3,94	1,24
500	0,19	1,94	3,92	1,24
1000	0,11	2,24	3,60	1,14
1500	0,09	2,45	3,50	1,10
2000	0,07	2,60	3,49	1,10

Обозначения:  $\zeta$  – коэффициент гидравлического сопротивления;  $\varepsilon_p, \varepsilon_q$  – коэффициенты интенсификации сопротивления и теплоотдачи; Nu, Re – числа Нуссельта и Рейнольдса.

На рис. 5 показаны зависимости числа Нуссельта от числа Рейнольдса. Число Нуссельта определено как

$$Nu = \langle \alpha \rangle D_h / \lambda,$$

где  $\lambda$ , Вт/(м·К), – коэффициент теплопроводности;  $\langle \alpha \rangle = Q/[S \cdot (T_b - T_w)]$ , Вт/(м<sup>2</sup>·К), – средний коэффициент теплоотдачи ( $Q$ , Вт, – подведенный тепловой поток;  $S$ , м<sup>2</sup>, – площадь омываемой поверхности). Символы имеют такой же смысл, как на рис. 4. Линия 1 – постоянное значение числа Нуссельта  $Nu_{sm} = 3,17$  для ламинарного течения и стабилизированной теплоотдачи при условии  $T_w = \text{const}$  в гладком канале того же сечения ( $H/W = 1/1,5$ ), что и оребренный канал. Линия 2 – аппроксимация данных, полученных методом LES-WALE, функцией  $0,0490Re^{0,744}$ ; линия 3 – аппроксимация данных, полученных методом RANS, функцией  $0,0158Re^{0,844}$ .

В ламинарном режиме зависимость числа Нуссельта от числа Рейнольдса немонотонна. В табл. 1 представлены данные для рассчитанных вариантов ламинарного течения. Из таблицы следует, что при самом малом значении Re число Нуссельта в оребренном канале на 8 % меньше, чем в гладком. Затем с ростом числа Re теплоотдача возрастает и в интервале  $350 < Re < 500$  достигает максимальных значений, превосходящих теплоотдачу в гладком канале на 24 %. Затем интенсификация теплоотдачи  $\varepsilon_q$  в верхнем диапазоне ламинарных значений Re снижается до 10 %. Коэффициент сопротивления  $\zeta$  в зависимости от числа Re монотонно убывает, при этом его значение относительно коэффициента сопротивления гладкого канала увеличивается с 1,19 до 2,6 (коэффициент  $\varepsilon_p$ ).

В турбулентном режиме зависимости  $Nu(Re)$  монотонны во всем диапазоне чисел Рейнольдса. Если учесть, что для гладких каналов в турбулентном режиме для числа Прандтля  $Pr \approx 1$  число Нуссельта следует соотношению  $Nu_{sm} = 0,023Re^{0,8}$ , то можно заключить, что аппроксимирующие зависимости теплоотдачи от числа Рейнольдса в турбулентном режиме для оребренного канала (зависимости вида  $Nu = A \cdot Re^n$ , представленные линиями 2 и 3 на рис. 5) подобны зависимостям для гладкого канала. В оребренном канале при  $Re < 10^5$  зависимость



числа Nu от Re, по сравнению с гладким каналом, несколько слабее ( $n = 0,744$ ), но коэффициент в степенной формуле больше:  $A = 0,0490$ , а для  $Re > 10^5$  зависимость от Re сильнее ( $n = 0,844$ ), но коэффициент меньше:  $A = 0,0158$ . При  $Re = 10^5$  разница значений чисел Нуссельта, полученных по обеим зависимостям, менее 2 %. При больших и меньших значениях числа Рейнольдса разница значений становится больше.

Таблица 2

**Расчетные зависимости параметров сопротивления и теплоотдачи от числа Рейнольдса в секции оребренного канала (турбулентный режим течения, метод LES-WALE)**

Re	Значение параметра							
	$\zeta$	$\varepsilon_p$	Nu	$\varepsilon_q$	Nu <sub>1</sub>	$\varepsilon_{q1}$	Nu <sub>2</sub>	$\varepsilon_{q2}$
2500	0,101	3,21	160	2,62	23,7	3,89	18,6	3,05
5000	0,090	3,30	28,4	2,06	37,6	2,73	33,1	2,41
10000	0,081	3,44	46,8	1,78	60,0	2,28	54,7	2,08
15000	0,074	3,45	62,7	1,68	79,4	2,12	71,5	1,91
20000	0,071	3,49	77,0	1,62	96,4	2,03	86,2	1,81
30000	0,067	3,57	103	1,56	128	1,92	113	1,71

Обозначения: Nu<sub>1</sub>, Nu<sub>2</sub> – числа Нуссельта, найденные по среднему коэффициенту теплоотдачи, с учетом и без учета поверхности ребер на оребренной стенке. Коэффициенты  $\varepsilon_{q1}$  и  $\varepsilon_{q2}$  соответствуют числам Нуссельта Nu<sub>1</sub>, Nu<sub>2</sub> (см. также текст).

Количественные данные расчетов, относящихся к сопротивлению и теплоотдаче при турбулентном течении в оребренном канале, представлены в табл. 2 (метод LES-WALE) и табл. 3 (метод RANS). В табл. 2 число Nu определено так, как было указано в комментарии к рис. 5, числа Nu<sub>1</sub> и Nu<sub>2</sub> были определены по средним коэффициентам теплоотдачи с включением и исключением поверхности ребер на оребренной стенке, соответственно. Значения коэффициентов увеличения сопротивления  $\varepsilon_p$  и интенсификации теплоотдачи ( $\varepsilon_q$ ,  $\varepsilon_{q1}$  и  $\varepsilon_{q2}$ ) были получены как отношения коэффициентов сопротивления  $\zeta/\zeta_{sm}$  и чисел Нуссельта Nu/Nu<sub>sm</sub>, Nu<sub>1</sub>/Nu<sub>sm</sub> и Nu<sub>2</sub>/Nu<sub>sm</sub>, в которых коэффициент  $\zeta_{sm}$  найден с использованием формулы Никурадзе [7]:

$$\lambda_{sm} = 0,0032 + 0,2210/Re^{0,237}, \zeta_{sm} = (P/D_h)\lambda_{sm}, P/D_h = 0,83,$$

а Nu<sub>sm</sub> – по формуле Гнелинского для  $Re \leq 3 \cdot 10^4$  [10]:

$$Nu_{sm} = \frac{(\lambda_{sm}/8)(Re-1000)Pr}{1+12,7(\lambda_{sm}/8)^{1/2}(Pr^{2/3}-1)}$$

и по формуле Петухова – Кириллова для  $Re > 3 \cdot 10^4$  [8]:

$$Nu_{sm} = \frac{(\lambda_{sm}/8)RePr}{1+900/Re+12,7(\lambda_{sm}/8)^{1/2}(Pr^{2/3}-1)}$$

В формулах Гнелинского и Петухова – Кириллова коэффициент трения  $\lambda_{sm}$  рассчитывался по формуле Никурадзе.

В табл. 2 обращает на себя внимание детализация данных о теплоотдаче на оребренной стенке. Такая детализация для данных, полученных именно методом LES-WALE, пред-

Таблица 3

**Расчетные зависимости параметров сопротивления и теплоотдачи от числа Рейнольдса в секции оребренного канала (турбулентный режим течения, метод RANS)**

Re, 10 <sup>5</sup>	Значение параметра					
	$\zeta$	$\zeta_{sm}$	$\varepsilon_p$	Nu	Nu <sub>sm</sub>	$\varepsilon_q$
0,5	0,063	0,0174	4,35	149	104	1,43
1,0	0,059	0,0150	4,00	265	179	1,48
1,5	0,057	0,0138	5,05	371	245	1,51
2,0	0,056	0,0130	5,25	473	309	1,53
3,0	0,055	0,0120	5,54	664	426	1,56
4,0	0,054	0,0114	5,72	844	539	1,57
6,0	0,053	0,0106	6,04	1187	746	1,59
8,0	0,052	0,0101	6,26	1514	946	1,60
10,0		0,0097	6,49	1831	1131	1,62
20,0	0,050	0,0087	7,02	3300	2016	1,64
40,0		0,0075	8,01	5960	3465	1,72
80,0		0,0067	9,00	10833	6126	1,77

Обозначения:  $\zeta_{sm}$  – коэффициент гидравлического сопротивления в гладком канале; Nu<sub>sm</sub> – число Нуссельта для развитого течения и стабилизированной теплоотдачи в гладком канале того же сечения, что у канала с оребренной стенкой.

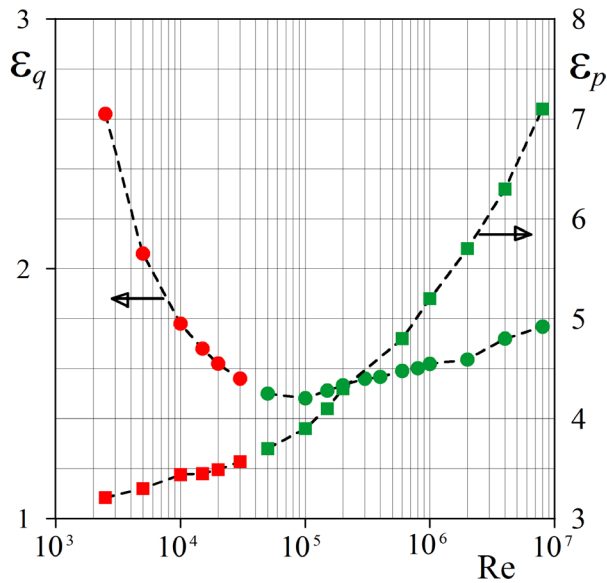


Рис. 6. Зависимости коэффициентов увеличения сопротивления  $\varepsilon_p$  (квадраты) и интенсификации теплоотдачи  $\varepsilon_q$  (кружки) от числа Рейнольдса для турбулентных течений, полученные методами LES-WALE (символы красного цвета) и RANS (символы зеленого цвета)

ставилась нам уместной, поскольку вихре-разрешающий подход позволяет с большей достоверностью предсказывать локальные и с ними локально-осредненные характеристики теплоотдачи.

На рис. 6 показаны зависимости коэффициентов  $\varepsilon_p$  и  $\varepsilon_q$  от числа Рейнольдса в режиме турбулентных течений, определенные по результатам моделирования методами LES-WALE и RANS. Коэффициент  $\varepsilon_p$  увеличивается с повышением числа Рейнольдса, что типично для пассивных интенсификаторов теплоотдачи. Поведение кривой для существенно меньшего коэффициента  $\varepsilon_q$  примечательно: вплоть до значения  $Re \approx 10^5$  величина  $\varepsilon_q$  уменьшается с повышением числа Re, а далее, при  $Re > 10^5$ ,  $\varepsilon_q$  возрастает при повышении числа Рейнольдса. Действительно, в экспериментах, которые проводят со сравнительно короткими оребренными каналами при числах  $Re \approx 10^4 - 10^5$ , неоднократно отмечалось снижение величины  $\varepsilon_q$  с повышением числа Рейнольдса [2], и это свойство зависимости  $\varepsilon_q$  от числа Re распространяется исследователями на весь диапазон чисел Рейнольдса.



В рассматриваемой нами задаче сформировавшегося периодического течения и развитого теплообмена получается, что при  $Re > 10^5$  величина  $\varepsilon_q$  монотонно растет, начиная со значения, приблизительно равного 1,5. В большей части исследованного нами диапазона значений числа  $Re$  значение  $\varepsilon_q$  можно принять равным в среднем 1,6, и только при малых (меньших, чем  $10^4$ ) значениях  $Re$  величина  $\varepsilon_q$  возрастает до 2,6 на границе турбулентного режима.

### Заключение

Выполнены систематические расчеты ламинарного и турбулентного течения и теплообмена при вынужденной конвекции несжимаемой среды с числом Прандтля, равным 0,7, в канале прямоугольного сечения  $W \times H = 1,5 \times 1,0$  с одной стенкой шириной  $W$ , на которой для интенсификации теплоотдачи установлены прямые ребра сечением  $0,1H \times 0,1H$ . Ребра расположены периодически, с шагом, равным высоте сечения  $H$ , под углом  $45^\circ$  к продольной оси канала. В расчетах приняты условия развитого течения и стабилизированного теплообмена с периодическими полями скорости, турбулентных характеристик и нормированной температуры  $\theta$ .

Решения получены для стационарных ламинарных режимов и статистически стационарных турбулентных режимов.

Значимость полученных решений заключается в их «универсальном» характере, который определен зависимостью результатов только от геометрии оребренного канала, а также расхода и свойств протекающей среды (чисел  $Re$  и  $Pr$ ). В этом отношении их можно использовать в качестве твердо установленного ориентира при оценке и систематизации экспериментальных и расчетных данных, полученных для оребренных каналов различной длины и с различными (не всегда до конца определенными) входными и выходными условиями.

В ламинарном режиме принятая геометрия оребрения канала оказывается неэффективной для интенсификации теплоотдачи. В турбулентном режиме поведение количественной характеристики эффективности оребрения  $\varepsilon_q$  является немонотонным, с минимумом при  $Re \approx 10^5$ . В турбулентном режиме величина  $\varepsilon_q$  принимает наибольшие значения при  $Re \leq 10^4$ .

Результаты проведенного исследования получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого ([www.spbstu.ru](http://www.spbstu.ru)).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Han J.-C., Dutta S., Ekkad S. Gas turbine heat transfer and cooling technology. 2nd Edition. London, New York: CRC Press, Taylor&Francis Group, 2013. 865 p.
2. Baybuzenko I. Local heat transfer and friction measurements in ribbed channel at high Reynolds numbers // Proceedings of the ASME Turbo Expo 2021: Turbomachinery Technical Conference & Exposition. Vol. 5B: Heat Transfer – General Interest; Internal Air Systems; Internal Cooling. Virtual, online. June 7–11, 2021. Paper No: GT2021-00259, V05BT13A001. ASME.
3. Taslim M. E., Lui H. A combined numerical and experimental study of heat transfer in a roughened square channel with  $45^\circ$  ribs // International Journal of Rotating Machinery. 2005. Vol. 2005. No. 1. Pp. 60–66.
4. Bunker R. S., Osgood S. J. The effect of turbulator lean on heat transfer and friction in a square channel // Proceedings of the ASME Turbo Expo 2003, collocated with the 2003 International Joint Power Generation Conference. Vol. 5: Turbo Expo 2003. Parts A and B. Paper No: GT2003-38137. Atlanta, Georgia, USA. June 16–19, 2003. Pp. 55–62. ASME.
5. Рис В. В., Галаев С. А., Левченя А. М., Писаревский И. Б. Численное исследование развитого турбулентного течения и теплоотдачи в канале прямоугольного сечения с односторонним внутренним оребрением // Теплоэнергетика. 2024. № 2. С. 80–89.
6. Patankar S. V., Liu C. H., Sparrow E. M. Fully developed flow and heat transfer in ducts having streamwise-periodic variations of cross-sectional area // Journal of Heat Transfer. 1977. Vol. 99. No. 2. Pp. 180–186.

7. Лойцянский Л. Г. *Механика жидкости и газа*. 7-е изд. М.: Дрофа, 2003. 840 с.
8. Петухов Б. С., Кириллов В. В. К вопросу о теплообмене при турбулентном течении жидкости в трубах // *Теплоэнергетика*. 1958. № 4. С. 63–68.
9. Smirnov P. E., Menter F. R. Sensitization of the SST turbulence model to rotation and curvature by applying the Spalart – Shur correction term // *Journal of Turbomachinery*. 2009. Vol. 131. No. 4. P. 041010.
10. Bergman T. L., Lavine A. S., Incropera F. P., DeWitt D. P. *Fundamentals of heat and mass transfer*. 7th Edition. Hoboken, New Jersey, USA: John Wiley & Sons, 2011. 1076 p.
11. Munson B. R., Rothmayer A. P., Okiishi T. H., Huebsch W. W. *Fundamentals of fluid mechanics*. 7th Edition. Hoboken, New Jersey, USA: John Wiley & Sons, 2013. 796 p.

## REFERENCES

1. Han J.-C., Dutta S., Ekkad S., *Gas turbine heat transfer and cooling technology*, 2nd Ed. CRC Press, Taylor&Francis Group, London, New York, 2013.
2. Baybuzenko I., Local heat transfer and friction measurements in ribbed channel at high Reynolds numbers, Proc. ASME Turbo Expo 2021: Turbomach. Techn. Conf. & Exposition, Vol. 5B: Heat Transfer – General Interest; Internal Air Systems; Internal Cooling. Virtual, online. June 7–11, 2021. P. GT2021-00259, V05BT13A001. ASME.
3. Taslim M. E., Lui H., A combined numerical and experimental study of heat transfer in a roughened square channel with 45° ribs, *Int. J. Rotating Mach.* 2005 (1) (2005) 60–66.
4. Bunker R. S., Osgood S. J., The effect of turbulator lean on heat transfer and friction in a square channel, Proc. ASME Turbo Expo 2003, collocated with the 2003 Int. Joint Power Generation Conf. Vol. 5: Turbo Expo 2003. Parts A and B. P. GT2003-38137, Atlanta, Georgia, USA, June 16–19, ASME (2003) 55–62.
5. Ris V. V., Galaev S. A., Levchenya A. M., Pisarevskii I. B., Numerical investigation of a developed turbulent flow and heat transfer in a rectangular channel with single-sided internal ribs, *Therm. Eng.* 71 (2) (2024) 167–175.
6. Patankar S. V., Liu C. H., Sparrow E. M., Fully developed flow and heat transfer in ducts having streamwise-periodic variations of cross-sectional area, *J. Heat Transfer*. 99 (2) (1977) 180–186.
7. Loitsianskii L. G., *Mekhanika zhidkosti i gaza [Mechanics of liquids and gases]*, 7-th edition, Drofa Publishing, Moscow, 2003 (in Russian).
8. Petukhov B. S., Kirillov V. V., К вопросу о теплообмене при турбулентном течении жидкости в трубках [On the issue of heat transfer in turbulent fluid flow in pipes], *Теплоэнергетика [Heat-and-Power Engineering Journal]* (4) (1958) 63–68 (in Russian).
9. Smirnov P. E., Menter F. R., Sensitization of the SST turbulence model to rotation and curvature by applying the Spalart – Shur correction term, *J. Turbomach.* 131 (4) (2009) 041010.
10. Bergman T. L., Lavine A. S., Incropera F. P., DeWitt D. P., *Fundamentals of heat and mass transfer*. 7th Ed. John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, USA, 2011.
11. Munson B. R., Rothmayer A. P., Okiishi T. H., Huebsch W. W., *Fundamentals of fluid mechanics*. 7th Ed. John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, USA, 2013.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**РИС Владимир Вольдемарович** – кандидат технических наук, старший научный сотрудник, директор научно-образовательного центра «Компьютерные технологии в аэродинамике и теплотехнике» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

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

vvris@yandex.ru

ORCID: 0000-0003-1084-1180

**ГАЛАЕВ Сергей Александрович** – кандидат технических наук, доцент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
galaev@spbstu.ru  
ORCID: 0000-0001-7964-0200

**ЛЕВЧЕНЯ Александр Михайлович** – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
levchenya\_am@spbstu.ru  
ORCID: 0000-0002-8514-6732

## THE AUTHORS

### **RIS Vladimir V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
vvrisk@yandex.ru  
ORCID: 0000-0003-1084-1180

### **GALAEV Sergey A.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
galaev@spbstu.ru  
ORCID: 0000-0001-7964-0200

### **LEVCHENYA Alexander M.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
levchenya\_am@spbstu.ru  
ORCID: 0000-0002-8514-6732

*Статья поступила в редакцию 22.04.2024. Одобрена после рецензирования 23.05.2024.  
Принята 02.10.2024.*

*Received 22.04.2024. Approved after reviewing 23.05.2024. Accepted 02.10.2024.*

Научная статья

УДК 534.16

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17404>

## ПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ И АВТОКОЛЕБАНИЯ ПРИ НЕЛИНЕЙНОМ ПАРАМЕТРИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ И ЗАПАЗДЫВАНИИ В УПРУГОСТИ

А. А. Алифов 

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

 [alishir@mail.ru](mailto:alishir@mail.ru)

**Аннотация.** Рассмотрено взаимодействие автоколебаний и параметрических колебаний при нелинейном параметрическом возбуждении и запаздывании в упругости. Для решения дифференциальных уравнений движения системы использован метод прямой линеаризации и выведены уравнения для нестационарных и стационарных режимов колебаний. С помощью критериев Рауса – Гурвица получены условия устойчивости стационарных режимов. Чтобы выяснить влияние нелинейного параметрического возбуждения на динамику смешанных параметрических и автоколебаний, выполнены соответствующие расчеты и проведено сравнение результатов, полученных при наличии и в отсутствие запаздывания. Согласно расчетным данным, при наличии запаздывания происходит изменение величин амплитуд, которое сопровождается смещением позиций амплитудных кривых в амплитудно-частотной области, а также их сужение либо уширение, по сравнению с отсутствием запаздывания. Наличие запаздывания влияет также на устойчивость колебаний.

**Ключевые слова:** автоколебания, параметрические колебания, взаимодействие, нелинейность, запаздывание, упругость, метод прямой линеаризации

**Для цитирования:** Алифов А. А. Параметрические и автоколебания при нелинейном параметрическом воздействии и запаздывании в упругости // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 48–56. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17404>

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.17404>

## PARAMETRIC AND SELF-EXCITED OSCILLATIONS UNDER NONLINEAR PARAMETRIC ACTION AND LAG IN ELASTICITY

A. A. Alifov 

Mechanical Engineering Research Institute of the RAS, Moscow, Russia

 [alishir@mail.ru](mailto:alishir@mail.ru)

**Abstract.** The interaction of parametric oscillations and self-oscillations under nonlinear parametric excitation and delay in elasticity is considered. To solve the differential equations of the system motion, the direct linearization method was used and equations for non-stationary and stationary modes of oscillations were derived. Using the Routh–Hurwitz criteria, stability conditions for stationary regimes were obtained. To find out the effect of nonlinear parametric excitation on the dynamics of mixed autoparametric oscillations, relevant calculations were carried out and a comparison was made of the results obtained in the presence and absence of delay. According to calculated data, in the presence of a delay, a change in amplitude values occurs, accompanied by a shift in the amplitude curves in the amplitude-frequency area, as well as their narrowing or broadening, compared to no lag. The presence of lag also affects the stability of oscillations.



**Keywords:** self-oscillations, parametric oscillations, interaction, nonlinearity, delay, elasticity, method of direct linearization

**For citation:** Alifov A. A., Parametric and self-excited oscillations under nonlinear parametric action and lag in elasticity, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 48–56. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17404>

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

### Введение

Колебательные процессы широко распространены в природе и возникают на всех уровнях материи (микромир – мегамир), наблюдаемых человеком. Они происходят в механических, аэрогидродинамических, электромагнитных системах, в огромном множестве технических систем, химических реакций и др. Колебаниям подвержены экономические, социальные, исторические и прочие процессы, в том числе развитие науки. Примеры множества колебательных процессов, наблюдаемых в естественных условиях и опытах, приведены в нашей книге [1].

Согласно известной классификации колебательных процессов (см., например, работы [2, 3]) по механизму возбуждения, существует 4 типа колебаний: свободные, вынужденные, параметрические и автоколебания. Последние три типа образуют 4 класса смешанных колебаний (динамическое взаимодействие двух и более типов в одной системе). Различные типы и классы смешанных типов колебаний изучены во многих работах. Широкому изучению параметрических колебаний, которые могут возникать при функционировании, например, оболочек, пластин, стержней и т. п., посвящена монография [4]. В ней эти колебания рассмотрены при линейном и нелинейном (квадратичном) параметрическом возбуждениях; математически они выражаются периодическими коэффициентами в дифференциальных уравнениях движения системы.

Данное исследование посвящено смешанным параметрическим и автоколебаниям при нелинейном параметрическом возбуждении кубического вида и наличии запаздывания в силе упругости. Системы с запаздыванием широко распространены в природе и устройствах различного рода (см., например, работы [5 – 13]). Нелинейные дифференциальные уравнения рассматриваемых колебаний решены с применением метода прямой линеаризации [14 – 17].

### Модель и ее математическое описание

Автопараметрические колебания при нелинейном параметрическом возбуждении и запаздывания в упругости рассмотрим на основе широко используемой [3, 18 – 21] модели (рис. 1).

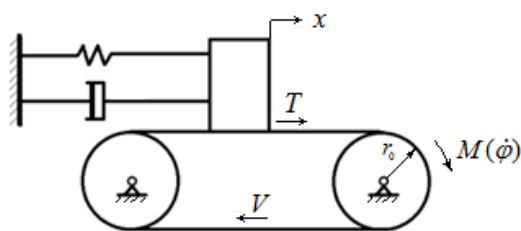


Рис. 1. Модель фрикционной автоколебательной системы:

$T$  – нелинейная сила трения, вызывающая автоколебания;  $r_0$  – радиус точки приложения силы трения  $T$ ;  $M(\dot{\phi})$ ,  $\dot{\phi}$  – соответственно моментная характеристика двигателя и скорость вращения его ротора,  $V$  – линейная скорость

Дифференциальные уравнения движения системы при наличии нелинейного параметрического возбуждения вида  $x^3 \cos vt$  и запаздывания  $\tau$  в силе упругости  $c_\tau x_\tau$  ( $c_\tau = \text{const}$ ,  $x_\tau = x(t - \tau)$ ) имеют следующий вид:

$$m\ddot{x} + k_0\dot{x} + c_0x = T(U) - F(x) - bx^3 \cos vt - c_\tau x_\tau, \quad (1)$$

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

где  $m$  – масса тела на движущейся ленте;  $k_0$ ,  $c_0$  – соответственно коэффициенты демпфирования и жесткости, причем  $k_0 = \text{const}$ ,  $c_0 = \text{const}$ ;  $F(x)$  – нелинейная часть силы упругости;  $b$ ,  $v$  – соответственно коэффициент и частота нелинейного параметрического возбуждения, причем  $b = \text{const}$ ,  $v = \text{const}$ ;  $I$  – суммарный момент инерции

вращающихся частей;  $M(\dot{\phi})$ ,  $\dot{\phi}$  – соответственно моментная характеристика двигателя и скорость вращения его ротора;  $T(U)$  – нелинейная сила трения, вызывающая автоколебания;  $U = V - \dot{x}$ , при этом  $V = r_0 \dot{\phi}$ ,  $r_0 = \text{const}$  – радиус точки приложения силы трения  $T(U)$ .

Нелинейные части силы упругости  $F(x)$  и силы трения  $T(U)$  представим в виде зависимостей

$$F(x) = \sum_s \gamma_s x^s, \quad s = 2, 3, \dots, \quad (2)$$

$$T(U) = T_0 [\text{sgn} U + f(\dot{x})], \quad f(\dot{x}) = -\alpha_1 U + \alpha_3 U^3,$$

где  $T_0$  – нормальная сила реакции;  $\alpha_1, \alpha_3, \gamma_s$  – константы;  $\text{sgn} U = 1$  при  $U > 0$ ,  $\text{sgn} U = -1$  при  $U < 0$ , а в случае покоя  $U = 0$  имеют место неравенства

$$-T_0 \leq T(0) \leq T_0.$$

Представленная форма силы трения достаточно распространена на практике, она наблюдалась даже при космических опытах [22].

Заменим нелинейные функции  $f(\dot{x})$  и  $F(x)$  методом прямой линеаризации [14] линейными функциями

$$F_*(x) = B_F + c_F x, \quad f_*(\dot{x}) = B_f + k_f \dot{x}, \quad (3)$$

где  $B_F, c_F, B_f, k_f$  – коэффициенты линеаризации, зависящие от параметра точности линеаризации.

Эти коэффициенты определяются следующими выражениями:

$$B_F = \sum_s N_s \gamma_s a^s, \quad s = 2, 4, 6, \dots \quad (s - \text{четное}),$$

$$c_F = \sum_s \bar{N}_s \gamma_s a^{s-1}, \quad s = 3, 5, 7, \dots \quad (s - \text{нечетное}),$$

$$B_f = -\alpha_1 V + \alpha_3 V^3 + 3\alpha_3 N_2 V a^2 p^2, \quad k_f = \alpha_1 - 3\alpha_3 V^2 - \alpha_3 \bar{N}_3 v^2,$$

$$N_s = (2r + 1)/(2r + 1 + s), \quad \bar{N}_s = (2r + 3)/(2r + 2 + s),$$

$$N_2 = (2r + 1)/(2r + 3), \quad \bar{N}_3 = (2r + 3)/(2r + 5),$$

$$a = \max|x|, \quad v = \max|\dot{x}|.$$

Как показано в работах [14 – 17], выбор параметра точности линеаризации  $r$  достаточен в пределах значений от 0 до 2, но интервал в принципе не ограничен.

Уравнения (1) с учетом (3) принимают вид

$$m\ddot{x} + k_0 \dot{x} + cx = T_0 B_f + T_0 (\text{sgn} U + k_f \dot{x}) - bx^3 \cos vt - c_\tau x_\tau, \quad (4)$$

$$I\ddot{\phi} = M(\dot{\phi}) - r_0 T_0 (\text{sgn} U + B_f + k_f \dot{x}),$$

где  $c = c_0 + c_F$ .

### Решение линеаризованных уравнений

Для решения системы (4) воспользуемся методом и процедурой, описанными в работах [14, 16]. Они позволяют изучать нестационарные и стационарные режимы колебаний. На их основе, учитывая

$$x_\tau = a \cos(\psi - p\tau), \quad u = r_0 \Omega,$$

имеем следующие выражения:

$$x = a \cos \psi, \quad \dot{x} = -ap \sin \psi, \quad \psi = pt + \xi, \quad p = v/2. \quad (5)$$

Уравнениями нестационарных режимов являются:

а)  $u \geq ap$

$$\begin{aligned} \frac{da}{dt} &= -\frac{1}{4pm} (2aA - 0,5ba^3 \sin 2\xi), \\ \frac{d\xi}{dt} &= \frac{1}{4pma} (2aE + ba^3 \cos 2\xi), \end{aligned} \quad (6a)$$

б)  $u < ap$

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= \frac{r_0}{I} \left[ M\left(\frac{u}{r_0}\right) - r_0 T_0 (1 + B_f) \right]; \\ \frac{da}{dt} &= -\frac{1}{4pm} \left[ 2aA - 0,5ba^3 \sin 2\xi - \frac{8T_0}{\pi ap} \sqrt{a^2 p^2 - u^2} \right], \\ \frac{d\xi}{dt} &= \frac{1}{4pma} (2aE + ba^3 \cos 2\xi), \end{aligned} \quad (6b)$$

$$\frac{du}{dt} = \frac{r_0}{I} \left[ M\left(\frac{u}{r_0}\right) - r_0 T_0 (1 + B_f) - \frac{r_0 T_0}{\pi} (3\pi - 2\Psi_*) \right],$$

где

$$\begin{aligned} \omega_0^2 &= c_0 / m, \quad A = p(k_0 - T_0 k_f) - c_\tau \sin p\tau, \quad E = m(\omega_0^2 - p^2) + k_f + c_\tau \cos p\tau, \\ \Psi_* &= 2\pi - \arcsin(u/ap). \end{aligned}$$

При выводе уравнений (6б) использован прием, описанный в монографии [3]. Заметим, что с учетом равенства  $u = r_0 \Omega$  выражения для  $B_f$  и  $k_f$  в уравнениях (6) имеют вид

$$B_f = -\alpha_1 u + \alpha_3 u^3 + 3\alpha_3 N_2 u a^2 p^2, \quad k_f = \alpha_1 - 3\alpha_3 u^2 - \alpha_3 \bar{N}_3 v^2.$$

Для определения стационарных значений амплитуды, фазы колебаний и скорости источника принимаем  $\dot{a} = 0$ ,  $\dot{\xi} = 0$ ,  $\dot{u} = 0$  и в случае  $u \geq ap$  получаем следующие соотношения:

$$\begin{aligned} 4A^2 + E^2 &= 0,25b^2 a^4, \quad \operatorname{tg} 2\xi = -2A/E, \\ M\left(\frac{u}{r}\right) - S(u, a) &= 0, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $S(u, a)$  – нагрузка на источник энергии со стороны колебательной системы,  $S(u, a) = r_0 T_0 (1 + B_f)$ .

В случае скоростей  $u < ap$  амплитуда определяется приближенным выражением  $ap \approx u$ .

#### Условия устойчивости стационарных колебаний

Чтобы вывести условия устойчивости стационарных колебаний, составляем для уравнений (6) уравнения в вариациях. С этой целью воспользуемся критериями Рауса – Гурвица; при этом получаем следующие условия устойчивости:

$$D_1 > 0, \quad D_3 > 0, \quad D_1 D_2 - D_3 > 0,$$

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

$$D_3 = b_{11} b_{23} b_{32} + b_{12} b_{21} b_{33} + b_{22} b_{13} b_{31} - b_{11} b_{22} b_{33} - b_{12} b_{23} b_{31} - b_{13} b_{21} b_{32}.$$

В случае  $u \geq ar$  имеем следующие выражения:

$$b_{11} = \frac{r_0}{I} \left( Q - r_0 T_0 \frac{\partial B_f}{\partial u} \right), \quad b_{12} = -\frac{r_0^2 T_0}{I} \frac{\partial B_f}{\partial a}, \quad b_{13} = 0,$$

$$b_{21} = a \frac{T_0}{2m} \frac{\partial k_f}{\partial u}, \quad b_{22} = -\frac{1}{4pm} \left[ 2 \left( A + a \frac{\partial A}{\partial a} \right) - \frac{3}{2} ba^2 \sin 2\xi \right], \quad b_{23} = \frac{ba^3}{4pm} \cos 2\xi,$$

$$b_{31} = 0, \quad b_{32} = \frac{1}{2pm} \left( \frac{\partial E}{\partial a} + ba \cos 2\xi \right), \quad b_{33} = -\frac{ba^2}{2pm} \sin 2\xi,$$

где  $Q = \frac{d}{du} M \left( \frac{u}{r_0} \right)$ .

### Численные расчеты

Для проведения расчетов использованы следующие значения параметров:

масса тела  $m = 1 \text{ кгс} \cdot \text{с}^2 \cdot \text{см}^{-1}$ ,  
 коэффициент демпфирования  $k_0 = 0,02 \text{ кгс} \cdot \text{с} \cdot \text{см}^{-1}$ ,  
 коэффициент жесткости  $c_0 = 1 \text{ кгс} \cdot \text{см}^{-1}$ ,  
 коэффициент нелинейного параметрического возбуждения  $b = 0,07 \text{ кгс} \cdot \text{см}^{-1}$ ,  
 нормальная сила реакции  $T_0 = 0,5 \text{ кгс}$ ,  
 константы  $c_\tau = 0,05 \text{ кгс} \cdot \text{см}^{-1}$ ,  $\alpha_1 = 0,84 \text{ с} \cdot \text{см}^{-1}$ ,  $\alpha_3 = 0,18 \text{ с}^3 \cdot \text{см}^{-3}$ .

Для запаздывания использованы величины  $p\tau = \pi/2, \pi, 3\pi/2$ , а для нелинейной части силы упругости – вид  $\gamma_3 y^3$ ,  $\gamma_3 = \text{const}$  с коэффициентом линеаризации  $c_F = \bar{N}_3 \gamma_3 a^2$  ( $\bar{N}_3 = 3/4$ , параметр точности линеаризации  $r = 1,5$ ). Заметим, что результаты по асимптотическому методу усреднения [23] и метода прямой линеаризации совпадают, ибо число  $3/4$  имеет место в обоих случаях.

На рис. 2 показаны некоторые результаты расчетов (величины на графиках нормализованы). Следует отметить, что в случае  $p\tau = 3\pi/2$  в соотношениях (7) отсутствуют корни уравнения амплитуды как при  $\gamma_3 = 0$ , так и при  $\gamma_3 \neq 0$ .

Были также численно решены дифференциальные уравнения (6). Характеристика источника энергии была принята в виде

$$M = M_0 - Qu,$$

где  $0 < Q < \infty$ .

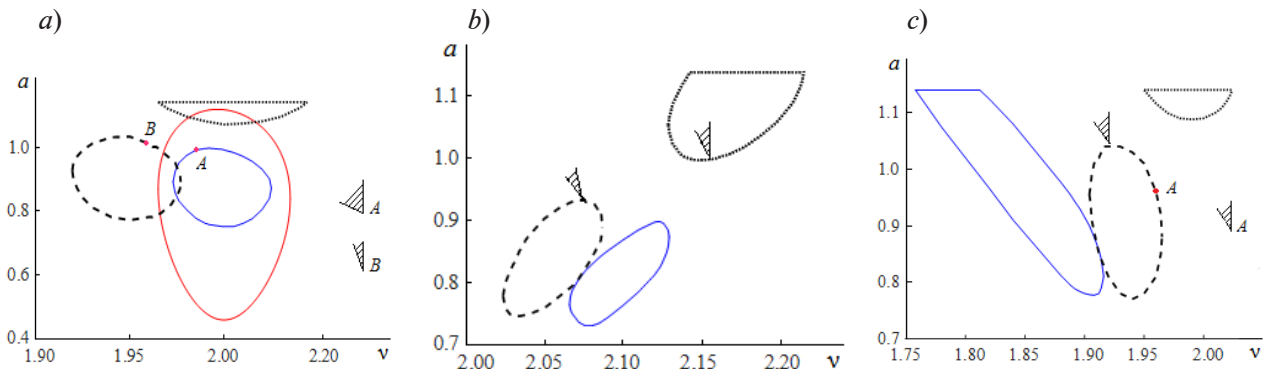


Рис. 2. Амплитудно-частотные кривые при скорости  $u=1,14$  и значениях  $\gamma = 0$  (a),  $+0,2$  (b),  $-0,2$  (c). Нелинейное параметрическое возбуждение выражено синими ( $c_\tau=0$ , запаздывание отсутствует) и черными кривыми; черные – для двух случаев запаздывания:  $p\tau = \pi/2$  (пунктир) и  $p\tau = \pi$  (штрих). Кривая красного цвета на рис. 2,а приведена для сравнения и имеет место для линейного параметрического возбуждения ( $x \cos vt$ ) в отсутствие запаздывания. Заштрихованные секторы отражают крутизну  $Q = dM(u/r_0)/du$  характеристики источника энергии и соответствуют устойчивым амплитудам

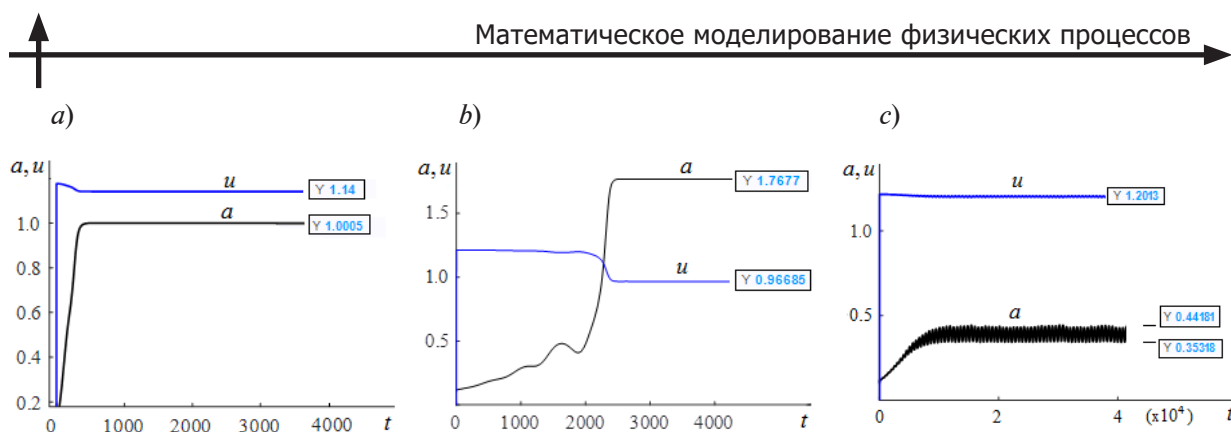


Рис. 3. Зависимости амплитуды  $a$  и скорости  $u$  от времени при разных значениях исходной моментной характеристики двигателя  $M_0$  и ее крутизны  $Q$ :

$a - M_0 = 6,039, Q = 5$ ;  $b - M_0 = 2,580, Q = 2$ ;  $c - M_0 = 2,584, Q = 2$ .

Получены при  $\gamma_3 = 0, p\tau = \pi, p = 0,981$ .

Числа в рамочках (голубой шрифт) указывают стационарные значения величин, выданные программой вычисления

С повышением значения  $Q$  характеристика источника энергии становится круче. Величина  $M$  определяется на основе третьего соотношения (7), которое позволяет найти и задать значения величин  $M_0$  и  $Q$ .

Один из результатов численного решения дифференциальных уравнений (6) представлен на рис. 3. Нами была поставлена цель – выйти на режим  $u = 1,14$  и  $a = 1$ . Решение получено при значениях параметров  $\gamma_3 = 0, p\tau = \pi, p = 0,981$ . На рис. 3,а видна стабильность амплитуды  $a$  колебаний и скорости  $u$  источника энергии при довольно крутой характеристике источника (крутизна  $Q = 4$  соответствует углу приблизительно  $76^\circ$ ). Это означает, что получено очень хорошее соответствие результатам расчетов по уравнению амплитуды в соотношениях (7). Однако для значений  $M_0 = 2,580, Q = 2$  (см. рис.3,б), расчетный результат, полученный на основе третьего соотношения (7), для выхода на режим при скорости  $u = 1,14$ , составляет  $u \approx 0,96, a \approx 1,76$ , а значит, характеристика источника с такой крутизной не позволяет реализовать амплитуду  $a \approx 1$ , которая представлена на рис.3,а. Графики решений, полученных при  $Q = 2$  и значении  $M_0 = 2,584$ , почти не отличающемся от  $M_0 = 2,580$  (см. рис. 3,с), отражают очень высокую чувствительность системы к значениям параметров. Видно, что устанавливается режим со скоростью  $u \approx 1,2$  и амплитудой, колеблющейся в интервале примерно от 0,35 до 0,44, т. е. в среднем амплитуда  $a \approx 0,4$ .

### Заключение

При нелинейном (кубическом) параметрическом возбуждении запаздывание в силе упругости приводит к ряду явлений, которые зависят от величины этого запаздывания. Можно отметить следующие:

- происходит смещение амплитудных кривых в амплитудно-частотной области и изменение величин амплитуд;
- изменяется ширина резонансной области либо в сторону расширения, либо сужения;
- изменяется устойчивость колебаний.

При наличии запаздывания, в системе возникают явления такого же характера, что и при его отсутствии (см., например, работы [3, 18, 20]).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алифов А. А. Взаимодействия в Природе. Единая теория. Москва – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2008. 472 с.
2. Челомей В. Н. (председатель). Вибрации в технике: Справочник. В 6 тт. Т. 2. Колебания нелинейных механических систем. Под ред. И. И. Блехмана. М.: Машиностроение, 1979. 351 с.

3. **Alifov A. A., Frolov K. V.** Interaction of nonlinear oscillatory systems with energy sources. New York: Taylor & Francis Group, 1990. 352 p.
4. **Шмидт Г.** Параметрические колебания. Пер. с нем. М.: Мир, 1978. 336 с.
5. **Матвеев М. Г., Семенов М. Е.** Устойчивость решений уравнений динамики с гистерезисными нелинейностями // Вестник Воронежской государственной технологической академии. 2005. № 10. С. 155–157.
6. **Красносельский М. А., Покровский А. В.** Системы с гистерезисом. М.: Наука, 1983. 271 с.
7. **Рубаник В. П.** Колебания квазилинейных систем с запаздыванием. М.: Наука, 1969. 288 с.
8. **Золотухин Ю. Н., Котов К. Ю., Мальцев А. С., Нестеров А. А., Филиппов М. Н., Ян А. П.** Коррекция транспортного запаздывания в системе управления мобильным роботом // Автоматика. 2011. Т. 47. № 2. С. 46–57.
9. **Третьякова Т. В., Вильдеман В. Э.** Пространственно-временная неоднородность процессов неупругого деформирования металлов. М.: Физматлит, 2017. 120 с.
10. **Тхан В. З., Берчук Д. Ю.** Системы автоматического управления объектами с запаздыванием: робастность, быстродействие, синтез // Программные продукты и системы. 2017. № 1. С. 45–50.
11. **Цыкунов А. М.** Робастное управление объектом с распределенным запаздыванием и неизвестным порядком математической модели // Мехатроника, автоматизация, управление. 2016. Т. 17. № 4. С. 219–227.
12. **Padhan D. G., Reddy B. R.** A new tuning rule of cascade control scheme for processes with time delay // Proceedings of the 2015 Conference on Power, Control, Communication and Computational Technologies for Sustainable Growth (PCCCTSG). 11–12 December, Kurnool, India, 2015. Pp.102–105.
13. **Otto A., Just W., Radons G.** Nonlinear dynamics of delay systems: an overview // Philosophical Transactions of the Royal Society A. 2019. Vol. 377. No. 2153. P. 20180389.
14. **Алифов А. А.** Методы прямой линеаризации для расчета нелинейных систем. Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2015. 74 с.
15. **Алифов А. А.** Метод прямой линеаризации нелинейностей смешанного типа // Проблемы машиностроения и надежности машин. 2017. № 2. С. 47–50.
16. **Алифов А. А.** О расчете колебательных систем с ограниченным возбуждением методами прямой линеаризации // Проблемы машиностроения и автоматизации. 2017. № 4. С. 92–97.
17. **Алифов А. А.** Колебания при нелинейном параметрическом воздействии и комбинации запаздываний // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 1. С. 47–55.
18. **Конonenko В. О.** Колебательные системы с ограниченным возбуждением. М.: Наука, 1964. 236 с.
19. **Андронов А. А., Витт А. А., Хайкин С. Э.** Теория колебаний. М.: Наука, 1981. 568 с.
20. **Фролов К. В.** Избранные труды. В 2 тт. Т. 1. Вибрация и техника. М.: Наука, 2007. 351 с.
21. **Климов Д. М.** Об одном виде автоколебаний в системе с сухим трением // Известия РАН. Механика твердого тела. 2003. № 3. С. 6–13.
22. **Броновец М. А., Журавлёв В. Ф.** Об автоколебаниях в системах измерения сил трения // Известия РАН. Механика твердого тела. 2012. № 3. С. 3–11.
23. **Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А.** Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М.: Наука, 1974. 504 с.

## REFERENCES

1. **Alifov A. A.**, Interactions in the Nature. The uniform theory, “Regular & Chaotic Dynamics” Publishing, Moscow, Izhevsk, 2008 (in Russian).
2. **Chelomey V. N.** (Chairman), Vibratsii v tehnike: spravochnik [Vibrations in machinery: Handbook], in 6 Vols., Vol. 2; Edited by Blekhman I. I., Publishing House of Mechanical Engineering, Moscow, 1979 (in Russian).
3. **Alifov A. A., Frolov K. V.**, Interaction of nonlinear oscillatory systems with energy sources, Taylor & Francis Group, New York, 1990.
4. **Schmidt G., Schulz R.**, Parametererregte Schwingungen, Deutscher Verlag d. Wiss., VEB, Berlin, 1975.

5. **Matveev M. G., Semenov M. E.**, Stability of dynamics equation with hysteretic non-linear decisions, *Bulletin of the Voronezh State Technological Academy*. (10) (2005) 155–157 (in Russian).
6. **Krasnoselskiĭ M., Pokrovskiĭ A.**, *Systems with hysteresis*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New-York, 1989.
7. **Rubanik V. P.**, *Kolebaniya kvazilineynykh sistem s zapazdyvaniyem* [Oscillations of quasilinear systems having delay], Nauka Publishing, Moscow, 1969 (in Russian).
8. **Zolotukhin Y. N., Kotov K. Y., Maltsev A. S., et al.**, Correction of transportation lag in the mobile robot control system, *Optoelectron. Instrument. Proc.* 47 (2) (2011) 141–150.
9. **Tretyakova T. V., Wildemann V. E.**, *Prostranstvenno-vremennaya neodnorodnost protsessov neuprugogo deformirovaniya metallov* [Spatial-temporal inhomogeneity of the processes of inelastic deformation of metals], Fizmatlit Publishing, Moscow, 2017 (in Russian).
10. **Tkhan V. D., Berchuk D. Yu.**, Time delay automatic control systems: robustness, response time, synthesis, *Software & Systems*. (1) (2017) 45–50 (in Russian).
11. **Tsykunov A. M.**, Robust control of object with distributed delay and unknown order of mathematical model, *Mekhatronika, Avtomatizatsiya, Upravlenie*. 17 (4) (2016) 219–227 (in Russian).
12. **Padhan D. G., Reddy B. R.**, A new tuning rule of cascade control scheme for processes with time delay, *Proc. 2015 Conf. on Power, Control, Communication and Computational Technologies for Sustainable Growth (PCCCTSG)*. 11–12 Dec., 2015, Kurnool, India (2015) 102–105.
13. **Otto A., Just W., Radons G.**, Nonlinear dynamics of delay systems: an overview, *Phil. Trans. R. Soc. A*. 377 (2153) (2019) 20180389.
14. **Alifov A. A.**, *Metody pryamoy linearizatsii dlya rascheta nelineynykh system* [Methods of direct linearization for calculation of nonlinear systems], Research Center “Regular and Chaotic Dynamics”, Moscow, 2015 (in Russian).
15. **Alifov A. A.**, Method of the direct linearization of mixed nonlinearities, *J. Mach. Manuf. Reliab.* 46 (2) (2017) 128–131.
16. **Alifov A. A.**, About calculation of oscillatory systems with limited excitement by methods of direct linearization, *Eng. Autom. Problem*. (4) (2017) 92–97 (in Russian).
17. **Alifov A. A.**, Oscillations under a nonlinear parametric action and combinations of delays, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 17 (1) (2024) 47–55 (in Russian).
18. **Kononenko V. O.**, *Vibrating systems with limited power-supply*, Iliffe, London, 1969.
19. **Andronov A. A., Vitt A. A., Khaikin S. E.**, *Theory of vibration*, Nauka Publishing, Moscow, 1981 (in Russian).
20. **Frolov K. V.**, *Selected works, in 2 Vols., Vol. 1. Vibration and Technique*, Nauka Publishing, Moscow, 2007 (in Russian).
21. **Klimov D. M.**, On one type of self-excited vibrations in a system with dry friction, *Mech. Solids*. 38 (3) (2003) 1–7.
22. **Bronovets M. A., Zhuravlev V. F.**, On self-excited vibrations in friction source measurement systems, *Mech. Solids*. 47 (3) (2012) 261–268.
23. **Bogoliubov N. N., Mitropolsky Y. A.**, *Asymptotic methods in the theory of non-linear oscillations*, CRC Press, Florida, USA, 1961.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

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

101000, Россия, г. Москва, Малый Харитоньевский пер., 4

alishir@mail.ru

ORCID: 0000-0003-2327-068X

#### THE AUTHOR

**ALIFOV Alishir Ali**

*Mechanical Engineering Research Institute of the RAS*

4 Malij Haritonjevskij lane, Moscow, 101000, Russia

alishir@mail.ru

ORCID: 0000-0003-2327-068

*Статья поступила в редакцию 12.04.2024. Одобрена после рецензирования 10.07.2024.  
Принята 10.07.2024.*


*Received 12.04.2024. Approved after reviewing 10.07.2024. Accepted 10.07.2024.*



Научная статья  
УДК 532.546: 519.63  
DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17405>

## ИДЕНТИФИКАЦИЯ ГРАНИЧНОГО РЕЖИМА В ПРОЦЕССЕ ВЫТЕСНЕНИЯ ВОДОЙ НЕФТИ ИЗ ПЛАСТА

Х. М. Гамзаев 

Азербайджанский государственный университет нефти и промышленности,  
г. Баку, Азербайджан  
 [xan.h@rambler.ru](mailto:xan.h@rambler.ru)

**Аннотация.** Рассмотрен процесс вытеснения нефти из прямоугольного пласта водой; процесс описывается нелинейной системой дифференциальных уравнений в частных производных относительно пластового давления (ПД) и насыщенности вытесняющей фазы (НВФ). В рамках предложенной модели поставлена задача идентификации режима на выходной границе пласта по заданным условиям на входной границе. Методом разностной аппроксимации построен разностный аналог задачи, неявный относительно ПД, но явный по НВФ. Для решения полученной системы линейных разностных уравнений относительно давления применяется декомпозиция. В результате получена явная формула для определения приближенного значения ПД на выходной границе пласта при заданном временном слое. С учетом вычисленного распределения давления в пласте, по явной формуле находится распределение НВФ во временном слое. На основе предложенного вычислительного алгоритма проведены численные эксперименты для модельного нефтяного пласта.

**Ключевые слова:** метод заводнения, двухфазное течение, насыщенность вытесняющей фазы, граничная обратная задача, декомпозиция


**Для цитирования:** Гамзаев Х. М. Идентификация граничного режима в процессе вытеснения водой нефти из пласта // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 57–67. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17405>

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/17405>

## IDENTIFICATION OF THE BOUNDARY REGIME IN THE PROCESS OF WATER-OIL DISPLACEMENT FROM THE RESERVOIR

Kh. M. Gamzaev 

Azerbaijan State Oil and Industry University, Baku, Azerbaijan  
 [xan.h@rambler.ru](mailto:xan.h@rambler.ru)

**Abstract.** The water-oil displacement process (from a rectangular reservoir) has been considered, that is described by a nonlinear system of partial differential equations with respect to the reservoir pressure (RP) and displacing phase saturation (DPS). Within the framework of the proposed model, the task of identifying the regime at the output boundary of the reservoir according to the specified conditions at the input boundary was set. The difference approximation method was used to construct a difference analogue of the problem, implicit with respect to RP and explicit with respect to DPS. As a result, an explicit formula was obtained for determining the approximate RP value at the outlet boundary of the reservoir at a given time layer. Taking into account the calculated RP distribution in the reservoir, the DPS distribution in the time layer was determined using an explicit formula. Based on the proposed computational algorithm, numerical experiments were carried out for the model oil reservoir.

**Keywords:** flooding method, two-phase flow, displacing phase saturation, boundary inverse problem, decomposition

**For citation:** Gamzaev Kh. M., Identification of the boundary regime in the process of water-oil displacement from the reservoir, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 57–67. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17405>

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 метод заводнения является наиболее распространенным вторичным методом разработки нефтяных месторождений. Суть данного метода заключается в закачке воды через систему нагнетательных скважин в нефтеносный пласт, с целью поддержания давления в пласте и вытеснения нефти к добывающим скважинам. Обычно на этапах проектирования и разработки нефтяных пластов возникает необходимость в анализе и регулировании процессов вытеснения на основе математических моделей совместного течения в пористой среде двух жидкостей: воды и нефти; эти жидкости представляют собой отдельные фазы, которые не смешиваются между собой.

Традиционно в качестве математической модели совместного течения в пласте двух указанных несмешивающихся жидкостей используются уравнения движения жидкостей в форме обобщенного закона Дарси и дифференциальные уравнения сплошности (неразрывности) фильтрационных потоков нефти и воды в пласте [1 – 4]. При этом физические и механические характеристики пласта, нефти и воды, начальное условие в пласте, условие на скважинах и на границе пласта, а также геометрические параметры пласта считаются заданными. Обычно на границах, через которые в пласт поступает вытесняющая фаза (нагнетательные скважины, контур питания, галереи), считаются заданными либо расход вытесняющей фазы, либо давление. Кроме того, на этих границах может быть задана величина насыщенности вытесняющей фазы. На границе стоков (эксплуатационные скважины, галереи) также считаются заданными дебит нефти или давление.

Однако необходимо отметить очень важное обстоятельство, относящееся к условиям, которые задаются на эксплуатационных скважинах или галерее. Дело в том, что установление того или иного технологического режима в эксплуатационных скважинах или галерее зависит от происходящих процессов вытеснения в системе «пласт – скважина», а также от взаимодействия скважин. Поэтому заранее выбирать определенный технологический режим работы эксплуатационных скважин или регулировать поток жидкостей на этих скважинах по заранее заданному условию не представляется возможным.

В связи с этим возникает необходимость в разработке методов для моделирования процессов заводнения нефтяных пластов только на основании информации, заранее заданной в нагнетательных скважинах или галерее.

### Постановка задачи и метод решения

Рассматривается горизонтально расположенный нефтяной пласт в форме прямоугольного параллелепипеда протяженностью  $l$ , с постоянной шириной и достаточно малой толщиной. Для вытеснения нефти из пласта, начиная с момента времени  $t = 0$ , через нагнетательную галерею, расположенную на входной границе пласта  $x = 0$ , в пласт начинает закачиваться вода. Предполагается, что в пласте, согласно обобщенному закону Дарси, происходит прямолинейно-параллельное вытеснение нефти к эксплуатационной галерее, расположенной на выходной границе пласта  $x = l$ .

Если считать пласт изотропной, слабо деформируемой пористой средой и пренебречь капиллярным давлением, то математическую модель двухфазного течения в рассматриваемом пласте можно представить в следующем виде [1]:

$$c_R \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda(S) \frac{\partial P}{\partial x} \right), \quad (1)$$



$$\frac{\partial \varphi S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda_w(S) \frac{\partial P}{\partial x} \right), \quad (2)$$

$$G = \{0 < x < l, 0 < t \leq T\},$$

где  $S = S(x, t)$  – насыщенность вытесняющей фазы (воды), выражается в долях;  $P = P(x, t)$ , Па, – давление;  $\varphi = \varphi(P)$  – коэффициент пористости;  $c_R = \frac{d\varphi}{dP}$  – коэффициент объемной упругости пласта;  $\lambda(S) = \lambda_w(S) + \lambda_o(S)$ ;  $\lambda_w(S) = \frac{k(x)k_w(S)}{\mu_w}$ ; при этом  $\lambda_o(S) = \frac{k(x)k_o(S)}{\mu_o}$ ;  $k(x)$  – коэффициент абсолютной проницаемости пласта;  $\mu_w, \mu_o$ , Па·с, – коэффициенты динамической вязкости воды и нефти, соответственно;  $k_w(S), k_o(S)$  – относительные фазовые проницаемости воды и нефти, соответственно.

Предполагается, что изменение коэффициента пористости зависит от изменения давления линейно, а относительные фазовые проницаемости являются известными однозначными функциями насыщенности вытесняющей фазы [1 – 4] и удовлетворяют условиям  $k_o(S) > 0, k_w(S) > 0$ .

Пусть в начальный момент времени  $t = 0$  распределения давления и насыщенности вытесняющей фазы (связанной воды) в пласте известны, т. е. для системы (1), (2) имеем следующие начальные условия:

$$P(x, 0) = r(x), \quad (3)$$

$$S(x, 0) = \psi(x). \quad (4)$$

Предположим, что вода закачивается в пласт через границы  $x = 0$  со скоростью  $q(t)$  и насыщенность воды на этой границе изменяется во времени по заданному закону  $\xi(t)$ . Тогда для системы уравнений (1), (2) будем иметь следующие граничные условия:

$$-\lambda_w(S) \frac{\partial P(0, t)}{\partial x} = q(t), \quad (5)$$

$$S(0, t) = \xi(t). \quad (6)$$

А условие относительно давления на эксплуатационной галерее, т. е. на выходной границе пласта  $x = l$ , представим в виде

$$P(l, t) = \theta(t). \quad (7)$$

Однако в связи с тем, что давление на выходной границе пласта устанавливается в ходе протекания процесса вытеснения нефти водой и невозможно регулировать ее по заранее заданной программе, функция  $\theta(t)$  считается неизвестной.

Предположим, что взамен недостающей информации на выходной границе пласта задается дополнительное условие относительно давления на входной границе пласта, т. е.

$$P(0, t) = f(t), \quad (8)$$

где  $f(t)$ , Па, – заданная функция.

Таким образом, задача состоит в нахождении функций  $\{P(x, t), S(x, t), \theta(t)\}$ , удовлетворяющих системе уравнений (1), (2), начальным условиям (3), (4), граничным условиям (5) – (7) и дополнительному условию (8). Поставленная задача (1) – (8), связанная с идентификацией режима на выходной границе пласта  $x = l$ , относится к классу граничных обратных задач математической физики [5 – 8]. Теоретические вопросы, связанные с корректностью постановок граничных обратных задач, существования и единственности решения класса граничных обратных задач для параболических уравнений в различных функциональных пространствах исследованы в работах [8 – 11]. Разработке и обоснованию вычислительных алгоритмов для численного решения граничных обратных задач для

параболических уравнений, их численной реализации посвящено множество работ, см. например [5, 6, 12 – 15].

Известно, что один из возможных подходов к численному решению граничных обратных задач связан с нелокальным возмущением граничных условий и переходом к некоторой близкой корректной задаче [6]. Следует отметить, что некорректность рассматриваемой обратной задачи (1) – (8) связана с граничным условием (8).

Следуя методу возмущения граничных условий, взамен граничного условия (8) составим следующее нелокальное условие, связывающее значения искомой функции  $P(x, t)$  на двух границах  $x = 0$  и  $x = l$ :

$$P(0, t) + \alpha P(l, t) = f(t), \quad (9)$$

где  $\alpha$  – параметр нелокального возмущения (параметр регуляризации).

Предположим, что решение граничной обратной задачи (1) – (7), (9) существует и она однозначно разрешима. Сначала методом разностной аппроксимации построим дискретный аналог дифференциальной задачи (1) – (7), (9) в прямоугольной области  $\bar{G}$ . Введем равномерную пространственно-временную разностную сетку в области  $\bar{G}$ :

$$\bar{\omega} = \{(x_i, t_j) : x_i = i\Delta x, t_j = j\Delta t, i = 0, 1, 2, \dots, n, j = 0, 1, 2, \dots, m\}$$

с шагами  $\Delta x = \frac{l}{n}$  и  $\Delta t = \frac{T}{m}$ .

Используя явную аппроксимацию по времени для нелинейных коэффициентов, дискретный аналог задачи (1) – (7), (9) на сетке  $\bar{\omega}$  представим в виде

$$c_R \frac{P_i^j - P_i^{j-1}}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta x} \left[ \lambda(S_{i+1/2}^{j-1}) \frac{P_{i+1}^j - P_i^j}{\Delta x} - \lambda(S_{i-1/2}^{j-1}) \frac{P_i^j - P_{i-1}^j}{\Delta x} \right], \quad (10)$$

$$\frac{(\varphi S)_i^j - (\varphi S)_i^{j-1}}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta x} \left[ \lambda_w(S_{i+1/2}^{j-1}) \frac{P_{i+1}^j - P_i^j}{\Delta x} - \lambda_w(S_{i-1/2}^{j-1}) \frac{P_i^j - P_{i-1}^j}{\Delta x} \right], \quad (11)$$

$$i = 1, 2, \dots, n-1, j = 1, 2, \dots, m,$$

$$P_i^0 = r_i, \quad (12)$$

$$S_i^0 = \psi_i, \quad (13)$$

$$-\lambda_w(S_0^{j-1}) \frac{P_1^j - P_0^j}{\Delta x} = q^j, \quad (14)$$

$$S_0^j = \xi^j, \quad (15)$$

$$P_n^j = \theta^j, \quad (16)$$

$$P_0^j + \alpha P_n^j = f^j, \quad (17)$$

где  $S_i^j \approx S(x_i, t_j)$ ,  $P_i^j \approx P(x_i, t_j)$ ,  $f^j = f(t_j)$ ,  $\xi^j = \xi(t_j)$ ,

$$q^j = q(t_j), \psi_i = \psi(x_i), \theta^j = \theta(t_j), r_i = r(x_i),$$

$$\lambda_w(S_{i\pm 1/2}^{j-1}) = \frac{\lambda_w(S_i^{j-1}) + \lambda_w(S_{i\pm 1}^{j-1})}{2}, \lambda(S_{i\pm 1/2}^{j-1}) = \frac{\lambda(S_i^{j-1}) + \lambda(S_{i\pm 1}^{j-1})}{2}.$$

Дискретный аналог задачи (1) – (7), (9) в области  $\bar{G}$  представляет собой систему линейных разностных уравнений, и в качестве неизвестных этой системы выступают приближенные значения искомых функций  $\theta(t)$ ,  $P(x, t)$  и  $S(x, t)$  в узлах разностной сетки  $\bar{\omega}$ , т. е.  $\theta^j, P_i^j$  и  $S_i^j$ .

Можно видеть, что система разностных уравнений (10), (11) неявна по давлению (значение насыщенности вытесняющей фазы берется с предыдущего временного слоя  $j - 1$ ) и явна по насыщенности вытесняющей фазы. Исходя из этого, процесс решения системы разностных уравнений (10) – (17) на каждом временном слое  $j$  ( $j = 1, 2, \dots, m$ ) можно организовать как нижеприведенную последовательность вычислительных процедур.

I. При заданных значениях  $S_{i+1/2}^{j-1}$  определяется решение системы разностных уравнений (18) – (21), т. е.  $P_i^j$  и  $\theta^j$ :

$$c_R \frac{P_i^j - P_i^{j-1}}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta x} \left[ \lambda(S_{i+1/2}^{j-1}) \frac{P_{i+1}^j - P_i^j}{\Delta x} - \lambda(S_{i-1/2}^{j-1}) \frac{P_i^j - P_{i-1}^j}{\Delta x} \right], \quad (18)$$

$$i = 1, 2, \dots, n - 1,$$

$$-\lambda_w(S_0^{j-1}) \frac{P_1^j - P_0^j}{\Delta x} = q^j, \quad (19)$$

$$P_n^j = \theta^j, \quad (20)$$

$$P_0^j + \alpha P_n^j = f^j. \quad (21)$$

II. С учетом вновь найденного значения давления  $P_i^j$  находится решение системы разностных уравнений (22), (23), т. е. насыщенность вытесняющей фазы  $S_i^j$ :

$$\frac{(\varphi S)_i^j - (\varphi S)_i^{j-1}}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta x} \left[ \lambda_w(S_{i+1/2}^{j-1}) \frac{P_{i+1}^j - P_i^j}{\Delta x} - \lambda_w(S_{i-1/2}^{j-1}) \frac{P_i^j - P_{i-1}^j}{\Delta x} \right], \quad (22)$$

$$i = 1, 2, \dots, n - 1,$$

$$S_0^j = \xi^j. \quad (23)$$

Чтобы найти решение линейной системы разностных уравнений (18) – (21) при фиксированном значении  $j$ , введем следующую декомпозицию [6, 12]:

$$P_i^j = U_i^j + \theta^j W_i^j, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n, \quad (24)$$

где  $U_i^j, W_i^j$  – также неизвестные переменные.

Если подставить выражение  $P_i^j$  в уравнение (18), то получим равенство

$$c_R \frac{U_i^j + \theta^j W_i^j - P_i^{j-1}}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta x} \left[ \lambda(S_{i+1/2}^{j-1}) \frac{U_{i+1}^j + \theta^j W_{i+1}^j - U_i^j - \theta^j W_i^j}{\Delta x} - \lambda(S_{i-1/2}^{j-1}) \frac{U_i^j + \theta^j W_i^j - U_{i-1}^j - \theta^j W_{i-1}^j}{\Delta x} \right],$$

или

$$c_R \frac{U_i^j - P_i^{j-1}}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x} \left[ \lambda(S_{i+1/2}^{j-1}) \frac{U_{i+1}^j - U_i^j}{\Delta x} - \lambda(S_{i-1/2}^{j-1}) \frac{U_i^j - U_{i-1}^j}{\Delta x} \right] + \theta^j \left\{ c_R \frac{W_i^j}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x} \left[ \lambda(S_{i+1/2}^{j-1}) \frac{W_{i+1}^j - W_i^j}{\Delta x} - \lambda(S_{i-1/2}^{j-1}) \frac{W_i^j - W_{i-1}^j}{\Delta x} \right] \right\} = 0. \quad (25)$$

Далее, если подставить выражение для  $P_i^j$  в формулы (19), (20), то получим следующие выражения:

$$-\lambda_w(S_0^{j-1}) \frac{U_1^j - U_0^j}{\Delta x} - \theta^j \lambda_w(S_0^{j-1}) \frac{W_1^j - W_0^j}{\Delta x} = q^j, \quad (26)$$

$$U_n^j + \theta^j W_n^j = \theta^j. \quad (27)$$

Очевидно, что соотношения (25) – (27) будут автоматически выполняться при следующих условиях:

а) переменные  $U_i^j$  ( $i = 0, 1, 2, \dots, n$ ) удовлетворяют системе разностных уравнений

$$c_R \frac{U_i^j - P_i^{j-1}}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x} \left[ \lambda(S_{i+1/2}^{j-1}) \frac{U_{i+1}^j - U_i^j}{\Delta x} - \lambda(S_{i-1/2}^{j-1}) \frac{U_i^j - U_{i-1}^j}{\Delta x} \right] = 0, \\ i = 1, 2, \dots, n-1, \\ -\lambda_w(S_0^{j-1}) \frac{U_1^j - U_0^j}{\Delta x} = q^j, \quad (28)$$

$$U_n^j = 0;$$

б) переменные  $W_i^j$  ( $i = 0, 1, 2, \dots, n$ ) удовлетворяют системе разностных уравнений

$$c_R \frac{W_i^j}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x} \left[ \lambda(S_{i+1/2}^{j-1}) \frac{W_{i+1}^j - W_i^j}{\Delta x} - \lambda(S_{i-1/2}^{j-1}) \frac{W_i^j - W_{i-1}^j}{\Delta x} \right] = 0, \\ i = 1, 2, \dots, n-1, \\ -\lambda_w(S_0^{j-1}) \frac{W_1^j - W_0^j}{\Delta x} = 0, \quad (29)$$

$$W_n^j = 1.$$

Необходимо отметить, что полученные независимые системы линейных алгебраических уравнений (28) и (29) имеют трехдиагональные матрицы и решения этих систем можно найти с помощью известного метода Томаса [6].

Теперь для определения  $\theta^j$  используем условие (21). Подставив представление (24) в формулу (21), будем иметь:

$$U_0^j + \theta^j W_0^j + \alpha P_n^j = f^j.$$

Отсюда следует явная формула для вычисления приближенного значения искомой функции  $\theta(t)$  при  $t = t_j$ , т. е. величины  $\theta^j$ :

$$\theta^j = \frac{f^j - U_0^j}{W_0^j + \alpha}. \quad (30)$$

После определения значения  $\theta^j$  можно по формуле (24) вычислять приближенные значения искомой функции  $P(x, t)$  на временном слое  $j$  при  $x = x_i$ , т. е.  $P_i^j$  ( $i = 0, 1, 2, \dots, n-1$ ).

Затем, когда получено распределение давления в пласте на временном слое  $j$ , можно перейти к вычислению распределения насыщенности вытесняющей фазы на том же временном слое. Для этого достаточно разрешить уравнение (22) относительно насыщенности вытесняющей фазы. В результате получим следующую явную формулу для вычисления приближенных значений последней искомой функции  $S(x, t)$  на временном слое  $j$  при  $x = x_i$ , т. е.  $S_i^j$  ( $i = 0, 1, 2, \dots, n-1$ ):

$$S_i^j = \frac{\varphi(P_i^{j-1}) S_i^{j-1}}{\varphi(P_i^j)} + \frac{\Delta t}{\varphi(P_i^j) \Delta x} \left[ \lambda_w(S_{i+1/2}^{j-1}) \frac{P_{i+1}^j - P_i^j}{\Delta x} - \lambda_w(S_{i-1/2}^{j-1}) \frac{P_i^j - P_{i-1}^j}{\Delta x} \right], \quad (31)$$

$$i = 1, 2, \dots, n-1,$$

$$S_0^j = \xi^j. \quad (32)$$

Очевидно, что из уравнения (31) найти значение насыщенности вытесняющей фазы на выходной границе пласта  $x = l$  не представляется возможным. Для этой цели можно использовать простейшую экстраполяционную формулу.

Таким образом, вычислительный алгоритм решения граничной обратной задачи (1) – (8) методом возмущения граничных условий, с использованием системы линейных разностных уравнений (10) – (17), на каждом временном слое  $j$  ( $j = 1, 2, \dots, m$ ) состоит из следующих шагов:

*Шаг 1.* Параллельно определяются решения системы разностных уравнений (28) и (29) относительно вспомогательных переменных  $U_i^j, W_i^j, i = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ ;

*Шаг 2.* По формуле (30) определяется значение переменной  $\theta^j$ ;

*Шаг 3.* Вычисляются значения переменных  $P_i^j (i = 0, 1, 2, \dots, n - 1)$  по формуле (24);

*Шаг 4.* По формуле (31) вычисляются значения переменных  $S_i^j (i = 1, 2, \dots, n - 1)$ .

### Результаты численных расчетов

Предложенный вычислительный алгоритм апробирован для идентификации режима на выходной границе модельного нефтяного пласта со следующими характеристиками:

длина пласта  $l = 100$  м;

коэффициент абсолютной проницаемости пласта  $k = 50 \cdot 10^{-12}$  м<sup>2</sup>;

начальное пластовое давление  $r(x) = 4$  МПа;

начальная водонасыщенность пласта  $\psi(x) = 0,2$ ;

динамические вязкости пластовой нефти и воды  $\mu_o = 3 \cdot 10^{-3}, \mu_w = 1 \cdot 10^{-3}$  Па·с;

относительные фазовые проницаемости для воды и нефти

$$k_w(S) = \left( \frac{S - 0,2}{0,8} \right)^3, k_o(S) = \left( \frac{0,8 - S}{0,6} \right)^3;$$

коэффициент пористости пласта  $\varphi(P) = \varphi_0 + c_R(P - P_a)$ ,

где  $\varphi_0 = 0,25, c_R = 1 \cdot 10^{-10}$  Па<sup>-1</sup>,  $P_a = 10^5$  Па;

скорость закачки воды в пласт  $q(t) = 2 \cdot 10^{-4}$  м/с;

закон изменения насыщенности воды во времени

на входной границе пласта  $\xi(t) = 0,8$ .

Таблица 1

### Результаты численных экспериментов по восстановлению временной динамики граничного режима (выражен функциями $\theta_1(t)$ и $\theta_2(t)$ )

$t_j, \text{ч}$	$\theta_1(t) = 4 + 0,2 \sin 10t, \text{ МПа}$			$f_1(t), \text{ МПа}$	$\theta_2(t) = 4 \cdot e^{-t/T}, \text{ МПа}$			$f_2(t), \text{ МПа}$
	$\theta'_1$	$\bar{\theta}_1$	$\tilde{\theta}_1$		$\theta'_2$	$\bar{\theta}_2$	$\tilde{\theta}_2$	
1	3,906	3,906	3,876	4,723	3,742	3,742	3,677	4,511
2	4,166	4,166	4,150	5,118	3,501	3,501	3,455	4,543
3	3,801	3,801	3,816	5,071	3,275	3,275	3,255	4,441
4	4,185	4,185	4,252	5,247	3,064	3,064	3,090	4,225
5	3,872	3,872	3,829	5,094	2,866	2,866	2,805	4,023
6	4,040	4,040	4,045	5,171	2,681	2,681	2,662	3,834
7	4,057	4,057	4,053	5,173	2,508	2,508	2,485	3,657
8	3,860	3,860	3,900	5,081	2,347	2,347	2,353	3,493
9	4,191	4,191	4,154	5,231	2,195	2,195	2,156	3,338
10	3,803	3,803	3,864	5,049	2,054	2,054	2,074	3,195
11	4,156	4,156	4,253	5,211	1,921	1,921	1,964	3,059
12	3,921	3,921	3,929	5,097	1,797	1,797	1,788	2,932
13	3,983	3,983	4,021	5,124	1,681	1,681	1,690	2,812
14	4,109	4,109	4,094	5,175	1,573	1,573	1,556	2,698
15	3,825	3,825	3,900	5,040	1,472	1,472	1,499	2,592

Обозначения:  $t$  – время;  $\theta'_{1,2}$  – точные значения функций  $\theta_{1,2}(t)$ ;  $\bar{\theta}, \tilde{\theta}_{1,2}$  – вычисленные значения функций  $\theta_{1,2}(t)$  при невозмущенных и возмущенных входных данных, соответственно;  $f_{1,2}(t)$  – заданные функции давления на входной границе пласта.

Примечание. Для возмущенных входных данных, в качестве уровня погрешности использовалось значение  $\delta = 0,02$ .

Таблица 2

**Расчетные распределения давления и насыщенности воды  
в нефтяном пласте в различные моменты времени**

$x_i, \text{ м}$	$P_i^j, \text{ МПа}$	$S_i^j$	$P_i^j, \text{ МПа}$	$S_i^j$	$P_i^j, \text{ МПа}$	$S_i^j$	
	$t_1 = 5 \text{ ч}$		$t_2 = 10 \text{ ч}$		$t_3 = 15 \text{ ч}$		
0	5,094	0,800	5,049	0,800	5,040	0,800	
5	5,048	0,771	5,002	0,771	4,993	0,772	
10	4,996		4,950		4,942		
15	4,944		4,898		4,889		
20	4,878		4,846		4,837		
25	4,787		4,793		4,734		
30	4,716	0,200	4,739	0,200	4,731	0,771	
35	4,659		4,686		4,678		
40	4,600		4,631		4,624		
45	4,542		4,546		4,569		
50	4,483		4,447		4,514		
55	4,424		4,382		4,459		
60	4,365		4,321		4,403		
65	4,305		4,259		4,344		0,751
70	4,244		4,196		4,247		0,441
75	4,184		4,133		4,149		0,205
80	4,122	4,068	4,085	0,200			
85	4,061	4,003	4,021				
90	3,998	3,938	3,957				
95	3,936	3,871	3,891				
100	3,872	3,803	3,825				

Примечание. Вычисленные распределения давления и насыщенности вытесняющей фазы по длине пласта соответствуют восстанавливаемой функции  $\theta_1(t) = 4 + 0,2\sin 10 t$ .

Численный эксперимент продолжительностью  $T = 54$  тыс. с (15 ч) был проведен по следующей схеме:

1. задавалось давление  $\theta(t)$  на выходной границе пласта и определялось решение прямой задачи (1) – (7), т. е. находили функции  $P(x, t)$  и  $S(x, t)$   $0 \leq x \leq l$ ,  $0 \leq t \leq T$ ;

2. вычисленная зависимость  $P(0, t) = f(t)$  принималась в качестве точных входных данных для идентификации функции  $\theta(t)$ .

Расчеты были проведены на равномерной пространственно-временной разностной сетке с шагами  $\Delta x = 5$  м,  $\Delta t = 60$  с.

При проведении численных экспериментов использовались невозмущенные и возмущенные входные данные. При использовании невозмущенных входных данных значение параметра нелокального возмущения принималось равным нулю. Для возмущения входных данных использовалось следующее соотношение:

$$\tilde{f}(t) = f(t) + \delta\sigma(t)f(t),$$

где слагаемое  $\delta\sigma(t)f(t)$  моделирует различный уровень погрешности для входных данных  $f(t)$ ;  $\sigma(t)$  – случайная величина, моделируемая с помощью датчика случайных чисел;  $\delta$  – уровень погрешности.



Таблица 3

**Расчетные распределения давления и насыщенности воды в нефтяном пласте при различных значениях шага  $\Delta x$  в момент времени  $t = 15$  ч**

$x_i, \text{ м}$	$P_i^j, \text{ МПа}$	$S_i^j$	$P_i^j, \text{ МПа}$	$S_i^j$	$P_i^j, \text{ МПа}$	$S_i^j$
	$\Delta x_1 = 5,00 \text{ м}$		$\Delta x_2 = 2,50 \text{ м}$		$\Delta x_3 = 1,25 \text{ м}$	
0	5,040	0,800	4,999	0,800	4,962	0,800
5	4,993	0,772	4,949	0,776	4,913	0,785
10	4,942	0,771	4,899		4,864	
15	4,889		4,847		4,814	
20	4,837		4,795		4,764	
25	4,734		4,743		4,713	
30	4,731		4,691		4,663	
35	4,678		4,638		4,611	
40	4,624		4,585		4,560	
45	4,569		4,531		4,508	
50	4,514		4,477		4,455	
55	4,459		4,422		4,402	
60	4,403		4,367		4,349	
65	4,344		0,751		4,312	
70	4,247		0,441	4,236	0,493	4,234
75	4,149	0,205	4,152	0,200	4,158	0,200
80	4,085	0,200	4,088		4,093	
85	4,021		4,024		4,027	
90	3,957		3,958		3,961	
95	3,891		3,892		3,893	
100	3,825		3,825	3,825		

В этом случае значение параметра нелокального возмущения  $\alpha$  определяется в соответствии с принципом невязки [5, 6].

Результаты численных экспериментов по восстановлению двух функций, а именно

$$\theta_1(t) = 4 + 0,2 \sin 10 t \text{ (МПа)} \text{ и } \theta_2(t) = 4 \cdot e^{-t/T} \text{ (МПа)},$$

с использованием невозмущенных и возмущенных входных данных, представлены в табл. 1.

При использовании невозмущенных входных данных, как показывают численные расчеты, искомая функция  $\theta(t)$  восстанавливается с высокой точностью. А при использовании возмущенных входных данных давление на выходной границе пласта определяется с определенной погрешностью. Однако в этом случае для заданного уровня погрешности  $\delta = 0,02$  максимальная относительная погрешность восстановления значений искомой функции  $\theta(t)$  не превышает 2,32 и 2,22 %, соответственно. Значения параметра нелокального возмущения составляли при этом 0,01 и 0,02, соответственно.

Следует отметить, что при проведении численных расчетов очень важен выбор шага разностной сетки по временной переменной. Дело в том, что использование малых таких шагов при решении некорректно поставленных граничных обратных задач дает

противоположный эффект, по сравнению с численным решением прямых задач: с повышением временного шага увеличивается точность решения обратных задач [5]. В связи с этим шаг разностной сетки по временной переменной определялся путем численного экспериментирования (табл. 2).

С целью изучения влияния шага разностной сетки по пространственной переменной на точность восстановления давления на выходной границе пласта проведены численные расчеты при значениях шага  $\Delta x = 5,00, 2,50$  и  $1,25$  м. Полученные результаты представлены в табл. 3.

Из табл. 3 следует, что независимо от шага разностной сетки по пространственной переменной, точное значение давления на выходной границе пласта, равное  $3,825$  МПа, восстанавливается абсолютно точно (см. последнюю строку табл. 3) при использовании невозмущенных входных данных. Кроме того, полученные распределения давления и насыщенности вытесняющей фазы в пласте показывают практическую сходимость используемого разностного метода.

### Заключение

В рамках модели двухфазного прямолинейно-параллельного течения несжимаемых жидкостей в деформируемом нефтяном пласте рассмотрена задача идентификации режима на выходной границе этого пласта. Предложенный вычислительный алгоритм, основанный на использовании метода возмущения граничных условий, позволяет идентифицировать режим на выходной границе пласта по заданной информации на его входной границе.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Азиз Х., Сеттари Э. Математическое моделирование пластовых систем. Пер. с англ. Изд. 2-е. Москва–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004. 416 с.
2. Щелкачев В. Н., Лапук Б. Б. Подземная гидравлика. Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. 736 с.
3. Басниев К. С., Дмитриев Н. М., Розенберг Г. Д. Нефтегазовая гидромеханика. Москва–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2005. 544 с.
4. Сулейманов Б. А. Особенности фильтрации гетерогенных систем. Москва–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2006. 354 с.
5. Алифанов О. М. Задачи обратного теплообмена. М.: Машиностроение, 1988. 280 с.
6. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Численные методы решения обратных задач математической физики. Изд. 3-е. М.: Изд-во ЛКИ, 2009. 480 с.
7. Hasanov A. N., Romanov V. G. Introduction to inverse problems for differential equations. Cham, Switzerland: Springer Cham, 2021. 261 p.
8. Кабанихин С. И. Обратные и некорректные задачи. Новосибирск: Сибирское научное изд-во, 2009. 457 с.
9. Костин А. Б., Прилепко А. И. О некоторых задачах восстановления граничного условия для параболического уравнения // Дифференциальные уравнения. 1996. Т. 32. № 1. С. 107–116.
10. Кожанов А. И. Обратные задачи определения граничных режимов для некоторых уравнений соболевского типа // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математическое моделирование и программирование». 2016. Т. 9. № 2. С. 37–45.
11. Prilepko A. I., Orlovsky D. G., Vasin I. A. Methods for solving inverse problems in mathematical physics (Monographs and Textbooks in Pure and Applied Mathematics. Vol. 231). New York: Marcel Dekker. 2000. 724 p.
12. Гамзаев Х. М. Об одной обратной задаче трубопроводного транспорта слабосжимаемых жидкостей // Инженерно-физический журнал. 2020. Т. 93. № 6. С. 1622–1628.
13. Gamzaev Kh. M. Identification of the boundary mode in one thermal problem based on the single-phase Stefan model // Cybernetics and Systems Analysis. 2023. Vol. 59. No. 2. Pp. 266–273.
14. Vasil'ev V. I., Su L.-De. Numerical method for solving boundary inverse problem for one-dimensional parabolic equation // Математические заметки СВФУ. 2017. Т. 24. № 2. С. 108–117.
15. Япарова Н. М. Численное моделирование решений обратной граничной задачи теплопроводности // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математическое моделирование и программирование». 2013. Т. 6. № 3. С. 112–124.

## REFERENCES

1. Aziz K., Settari A., Petroleum reservoir simulation, Applied Science Publishers, New York, 1979.
2. Shchelkachev V. N., Lapuk B. B., Podzemnaya gidravlika. [Underground hydraulics]. “Regulyarnaya i Khaoticheskaya Dinamika” Publishing, Moscow, Izhevsk, 2001 (in Russian).
3. Basniyev K. S., Dmitriyev N. M., Rozenberg G. D., Neftegazovaya gidromekhanika. [Oil and gas hydromechanics], Publisher: Institute of Computer Studies, Izhevsk, 2005 (in Russian).
4. Suleymanov B. A., Osobennosti filtratsii geterogennykh system [The filtration features of heterogeneous systems], Publisher: Institute of Computer Studies, Izhevsk, 2006 (in Russian).
5. Alifanov O. M., Inverse heat transfer problems (Book Series “International Series in Heat and Mass Transfer”), Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2011.
6. Samarskii A. A., Vabishchevich P. N., Numerical methods for solving inverse problems of mathematical physics (Book Series “Inverse and Ill-Posed Problems”, Vol. 52), De Gruyter, Berlin, 2008.
7. Hasanov A. H., Romanov V. G., Introduction to inverse problems for differential equations, Springer-Verlag, Berlin, 2021.
8. Kabanikhin S. I., Inverse and ill-posed problems. Walter de Gruyter, Berlin, 2011.
9. Kostin A. B., Prilepko A. I., On some problems of restoration of a boundary condition for a parabolic equation, Differ. Equ. 32 (1) (1996) 113–122.
10. Kozhanov A. I., Inverse problems for determining boundary regimes for some equations of Sobolev type, Bull. South Ural State Univ., Ser. Mathematical Modelling, Programming & Computer Software. 9 (2) (2016) 37–45.
11. Prilepko A. I., Orlovsky D. G., Vasin I. A., Methods for solving inverse problems in mathematical physics, Marcel Dekker, New York, 2000.
12. Gamzaev Kh. M., Inverse problem of pipeline transport of weakly-compressible fluids, J. Eng. Phys. Thermophys. 93 (6) (2020) 1567–1573.
13. Gamzaev Kh. M., Identification of the boundary mode in one thermal problem based on the single-phase Stefan model, Cybern. Syst. Anal. 59 (2) (2023) 266–273.
14. Vasil’ev V. I., Su L.-D., Numerical method for solving boundary inverse problem for one-dimensional parabolic equation, Math. Notes of NEFU. 24 (2) (2017) 107–116.
15. Yaparova N. M., Chislennoye modelirovaniye resheniy obratnoy granichnoy zadachi teploprovodnosti [Numerical simulation for solving an inverse boundary heat conduction problem], Bull. South Ural State Univ., Ser. Mathematical Modelling, Programming & Computer Software. 6 (3) (2013) 112–124 (in Russian).

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

**ГАМЗАЕВ Ханлар Мехвали оглу** — доктор технических наук, профессор кафедры общей и прикладной математики Азербайджанского государственного университета нефти и промышленности, г. Баку, Азербайджан.

AZ 1010, Азербайджан, г. Баку, пр. Азадлыг, 20  
 xan.h@rambler.ru  
 ORCID: 0000-0002-1228-7892

## THE AUTHOR

**Gamzaev Khanlar M. o.**

Azerbaijan State Oil and Industry University  
 20 Azadlig Ave., Baku, AZ 1010, Azerbaijan  
 xan.h@rambler.ru  
 ORCID: 0000-0002-1228-7892

*Статья поступила в редакцию 22.12.2023. Одобрена после рецензирования 03.06.2024. Принята 03.06.2024.*

*Received 22.12.2023. Approved after reviewing 03.06.2024. Accepted 03.06.2024.*

# Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

Обзорная статья

УДК 621.039

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM17406>

## ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ СТАНОВЛЕНИЯ ТЕРМОЯДЕРНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ: ОТ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ К ЭТАПУ ПРОМЫШЛЕННОГО ОСВОЕНИЯ

**В. В. Кораблев** <sup>✉</sup>, **В. А. Рожанский**, **А. И. Сарыгулов**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия;

<sup>✉</sup> [korablev@spbstu.ru](mailto:korablev@spbstu.ru)

**Аннотация.** В данной обзорной статье анализируются физико-технические проблемы и оцениваются перспективы освоения энергии термоядерного синтеза; при этом учитываются и результаты, полученные международным консорциумом ученых в рамках таких проектов, как ITER, и результаты отдельных национальных программ. Обеспечение энергией – один из самых сложных вызовов, с которыми человечество сталкивается в XXI веке. В наше время около 75 % нужд человечества обеспечивают ископаемые носители энергии: нефть, газ и уголь. Сейчас уже очевидно, что возобновляемые источники энергии имеют свой предел использования, в силу, прежде всего, нестабильности выработки ими энергии и отсутствия технологий по созданию запасов в больших объемах вырабатываемой ими энергии. Все это заставляет нас обратить внимание на такой источник, как энергия управляемого термоядерного синтеза. Нами также проведен анализ новых трендов в освоении термоядерной энергии, основанных на консорциумах ученых и частного сектора, которые ставят перед собой задачи ее ускоренной коммерциализации и промышленного освоения.

**Ключевые слова:** управляемый термоядерный синтез, фундаментальные исследования, промышленное освоение

**Финансирование:** Мегагрант «Технологические вызовы и социально-экономическая трансформация в условиях энергетических переходов» (Соглашение № 075-15-2022-1136 от 01.07.2022).

**Для цитирования:** Кораблев В. В., Рожанский В. А., Сарыгулов А. И. Физико-технические проблемы становления термоядерной энергетики: от фундаментальных исследований к этапу промышленного освоения // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 68–87. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17406>

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

Review article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17406>

**PHYSICAL AND TECHNICAL PROBLEMS  
OF FUSION ENERGY DEVELOPMENT:  
FROM FUNDAMENTAL RESEARCH  
TO THE STAGE OF INDUSTRIAL OPENING UP**  
**V. V. Korablev <sup>□</sup>, V. A. Rozhansky, A. I. Sarygulov**

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

<sup>□</sup> [korablev@spbstu.ru](mailto:korablev@spbstu.ru)

**Abstract.** This review article analyzes the physical and technical problems and judges the prospects for the development of fusion energy, taking into account both the results obtained by an international consortium of scientists within the framework of such projects as ITER and within the framework of individual national programs. Energy supply is one of the most complex challenges that mankind faces in the 21st century. In modern times, about 75 % of humanity's needs are provided by fossil energy carriers: oil, gas and coal. It is obvious now that renewable energy sources have their limit of use, primarily due to the instability of their energy production and the lack of technologies to create reserves in large volumes of energy produced by them. All this forces us to pay attention to such a source as the energy of controlled thermonuclear fusion. The article also analyzes new trends in the development of fusion energy based on consortia of scientists and the private sector, which set themselves the tasks of its accelerated commercialization and industrial opening up.

**Keywords:** controlled thermonuclear fusion, fundamental research, industrial development

**Funding:** Megagrant “Technological Challenges and Socio-Economic Transformation in the Context of Energy Transitions” (Agreement No. 075-15-2022-1136, dated 01.07. 2022).

**For citation:** Korablev V. V., Rozhansky V. A., Sarygulov A. I., Physical and technical problems of fusion energy development: From fundamental research to the stage of industrial opening up, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 68–87. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17406>

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

### Введение

Стабильное и повсеместное обеспечение энергией – одна из самых важных задач XXI века. Рост численности населения Земли, высокий уровень использования нефти, газа и угля, резко изменяющийся климат Земли и осознание того, что нынешние темпы глобального использования возобновляемых источников энергии как реальной альтернативы ископаемым видам топлива не могут решить проблему «нулевых» выбросов углекислого газа – эти тренды только обостряют накопившиеся энергетические проблемы. Надо учитывать и ограниченность геологических ресурсов критически важных природных материалов для решения проблем цифрового и энергетического перехода (данная проблема освещена в отдельных работах, см., например [1 – 5]).

Действие перечисленных выше факторов обуславливает необходимость поиска новых решений в области энергетики. Одним из таких перспективных направлений, несомненно, является энергетика управляемого термоядерного синтеза, тем более что за последних два десятилетия в этой области достигнут значительный прогресс.

Как показало время, освоение технологии использования термоядерной энергии оказалось очень сложной задачей. История термоядерных исследований началась со статьи Г. А. Гамова об  $\alpha$ -распаде ядер в июле 1928 г. В 1944 г. Э. Ферми предложил идею быстрого реактора деления, а шесть лет спустя А. Д. Сахаров совместно с И. Е. Таммом

предложили первый вариант термоядерного реактора с магнитным удержанием плазмы. Важным этапом формирования экспериментальной базы исследований стало создание первого в мире токамака советскими учеными под руководством академика Л. А. Арцимовича и его сотрудников [6]. Надо заметить, что еще в 1955 г. было предсказано, что проблема термоядерной энергии будет решена через 20 лет [4]. Если взять за точку отсчета статью Г. А. Гамова 1928 года, то проблема осталась нерешенной и через почти что сто лет.

Основная сложность в освоении энергии термоядерного синтеза связана с тем, что в естественных земных условиях таких реакций просто не существует. Ученым пока не удалось решить задачу длительной самоподдерживающейся термоядерной реакции. Существующие системы хотя и позволяют достичь необходимых для синтеза температур, но только с помощью дополнительного внешнего нагрева. Устройства дополнительного нагрева расходуют энергии больше, чем вся система в целом производит. И эта проблема на сегодня не решена.

Существует ряд других научно-технологических проблем, которые еще ждут своего решения:

- длительное удержание горячей плазмы внутри камеры;
- создание первой стенки термоядерной установки, способной выдерживать экстремальные условия;
- замыкание топливного цикла;
- промышленное извлечение и использование огромного количества производимой энергии.

В 2023 году были достигнуты три важных результата, которые помогут в решении этих проблем. Первым является китайский токамак EAST, который продемонстрировал режим работы, значительно улучшающий долгосрочное удержание плазмы без накопления примесей. Второй – это рекордные характеристики самого большого стелларатора W7-X в Германии, который достиг длительного плазменного разряда, продемонстрировав тем самым возможность связывания больших количеств энергии в плазме и отвода тепла контролируемым способом. Наконец, в США добились еще большего прироста получаемой энергии, по сравнению с ранее полученными результатами [2].

На фоне таких успехов ряд стран объявил о принятии конкретных решений по созданию новых правительственных структур, ответственных за практическую реализацию технологий термоядерного синтеза. Так, Великобритания объявила о создании в феврале 2023 года компании UK Industrial Fusion Solutions Ltd, которая является новым органом по реализации программы термоядерного синтеза для получения недорогой низкоуглеродной энергии<sup>1,2</sup>. В Российской Федерации координатором комплексной термоядерной энергетической программы, согласно указу Президента, была определена Государственная корпорация по атомной энергии «Росатом»<sup>3</sup>. В апреле 2023 года Япония объявила о создании Совета термоядерной промышленности Японии и других систем термоядерного синтеза посредством сотрудничества промышленности, научных кругов и правительства<sup>4</sup>. В США принято решение о создании нового агентства в составе Министерства энергетики, на которое возложены функции координатора по термоядерной энергетике<sup>5</sup>. В 2023 г. Европейская комиссия приняла закон о чистой нулевой промышленности, где

<sup>1</sup> G. Freeman. UK Takes Major STEP Towards near Limitless, Low-carbon Energy. Режим доступа: <https://www.gov.uk/government/news/uk-takes-major-step-towards-nearlimitless-low-carbon-energy> (дата обращения: 25.05.2024).

<sup>2</sup> Towards Fusion Energy 2023. Режим доступа: <https://assets.publishing.service.gov.uk/media/65301b78d06662000d1b7d0f/towards-fusion-energy-strategy-2023-update.pdf> (дата обращения: 25.05.2024).

<sup>3</sup> Указ Президента Российской Федерации от 16.04.2020 № 270 «О развитии техники, технологий и научных исследований в области использования атомной энергии в Российской Федерации». Режим доступа: <http://publication.pravo.gov.ru/Document/View/0001202004160030> (дата обращения: 24.05.2024).

<sup>4</sup> Fusion Energy Innovation Strategy (2023). Режим доступа: [https://www8.cao.go.jp/cstp/fusion/230426\\_strategy.pdf](https://www8.cao.go.jp/cstp/fusion/230426_strategy.pdf) (дата обращения: 23.05.2024).

<sup>5</sup> Readout of the White House Summit on Developing a Bold Decadal Vision for Commercial Fusion Energy. Режим доступа: <https://www.whitehouse.gov/ostp/news-updates/2022/04/19/readout-of-the-white-house-summit-on-developing-a-bold-decadal-vision-for-commercial-fusion-energy/> (дата обращения: 23.05.2024).



термоядерная энергия указана как одна из целей инвестиций в технологии<sup>6</sup>. В 2023 г. Германия приняла меморандум об энергии лазерного инерционного термоядерного синтеза и объявила о новой схеме финансирования национальной термоядерной деятельности, включая частное партнерство<sup>7,8</sup>. Важным параллельным шагом стало анонсирование больших научных программ по развитию термоядерной энергетики. Так, Великобритания объявила о планах инвестировать до 650 млн. фунтов стерлингов в разработку термоядерного синтеза до 2027 г. и предложила конкретные варианты термоядерного синтеза и правил регулирования, выходящие за рамки требований ядерного лицензирования<sup>9,10</sup>. Федеральное министерство образования и исследований Германии объявило об инвестициях более 1 млрд. евро в развитие термоядерной энергетики в течение следующих пяти лет<sup>11</sup>. Согласно оценке МАГАТЭ, сейчас наблюдается значительный рост инвестиций со стороны частного сектора в сферу термоядерной энергетики: 43 компании частного сектора уже инвестировали 6,2 млрд. долларов [2]. Именно растущая активность частного сектора свидетельствует о том, что очертания энергетики будущего находятся не за горами.

### Низкоуглеродные конкуренты термоядерной энергетики

В обозримом будущем основными конкурентами термоядерной энергетики будут возобновляемые источники энергии, такие как гидроэнергетика, солнечная, ветровая, геотермальная, биоэнергия и энергия приливов. Экономически значимыми на сегодняшний день являются первые три вида. В 2022 г. в мире было произведено 29165,1 ТВт·ч электроэнергии, из которых на долю гидроэнергетики приходилось 14,8 %, солнечной и ветровой – 11,7 %, других видов возобновляемой энергии – 2,7 %, т. е. всего 29,2 %<sup>12</sup>.

Развитие гидроэнергетики сдерживается рядом факторов, среди которых следует отметить нестабильность водного цикла, которая влияет на способность электростанций производить электроэнергию, а также ограниченность объемов инвестиций из-за высокой капиталоемкости крупных ГРЭС и дополнительных затрат на устранение социальных и экологических последствий реализации таких проектов.

Начиная с 2000 г. быстро растущим сегментом мировой энергетики становятся ветряная и солнечная энергетика. Экономическая конкурентоспособность становится основным фактором распространения различных технологий генерации энергии. На данном этапе все экономически значимые технологии возобновляемой энергетики находятся в стадии зрелости и вряд ли могут быть изменены коренным образом. В настоящее время в качестве перспективного низкоуглеродного источника рассматривается водород. На горизонте до 2050 г. необходимы инвестиции в размере 1-2 трлн. долларов, чтобы доля водорода в мировом конечном потреблении энергии достигла не менее 10 %, а сам водородный сектор был бы с нулевыми выбросами [7].

Все существующие и перспективные технологии возобновляемой энергетики, рассмотренные выше, представляют собой тот конкурентный ландшафт, который условно можно назвать «полем битвы энергетических технологий». На этом «поле битвы» пока отсутствуют технологии ядерного синтеза.

Ядерная энергетика является низкоуглеродной, и на нее в 2022 г. приходилось 9,2 %

<sup>6</sup> Net-Zero Industry Act: Making the EU the home of clean technologies manufacturing and green jobs. Режим доступа: [https://ec.europa.eu/commission/presscorner/detail/en/IP\\_23\\_1665](https://ec.europa.eu/commission/presscorner/detail/en/IP_23_1665) (дата обращения: 23.05.2024).

<sup>7</sup> Memorandum Laser Inertial Fusion Energy. Режим доступа: <https://www.bmbf.de/SharedDocs/Downloads/de/2023/230522-memorandum-laser-inertial-fusion-energy.html> (дата обращения: 20.05.2024).

<sup>8</sup> Positionspapier Fusionsforschung (2023), [https://www.bmbf.de/SharedDocs/Publikationen/de/bmbf/7/775804\\_Positionspapier\\_Fusionsforschung.html](https://www.bmbf.de/SharedDocs/Publikationen/de/bmbf/7/775804_Positionspapier_Fusionsforschung.html) (дата обращения: 20.05.2024).

<sup>9</sup> Energy Security Bill factsheet: Fusion regulation. Режим доступа: <https://www.gov.uk/government/publications/energy-security-bill-factsheets/energy-security-bill-factsheet-fusion-regulation> (дата обращения: 20.05.2024).

<sup>10</sup> Government Announces up to £650 Million for UK Alternatives to Euratom R&T (2023), <https://www.gov.uk/government/news/government-announces-up-to-650-million-for-uk-alternatives-to-euratom-rt> (дата обращения: 20.05.2024).

<sup>11</sup> Statement Fusionsforschung. Режим доступа: <https://www.bmbf.de/SharedDocs/Videos/de/bmbf/5/59/59247.html> (дата обращения: 20.05.2024).

<sup>12</sup> Energy Institute Statistical Review of World Energy 2023. Режим доступа: <https://www.energyinst.org/statistical-review/resources-and-data-downloads> (дата обращения: 25.05.2024).

мировой выработки электроэнергии. Становление этого сегмента мировой энергетики заслуживает особого внимания по трем причинам:

- а) в ее основе лежат фундаментальные открытия в области физики;
- б) существенный временной лаг между самым научным открытием и появлением первых промышленных станций, использующих энергию атома для производства электроэнергии;
- в) бурный рост ядерной энергетики, сопровождавшийся общественным противостоянием со стороны экологических организаций, так и его спад в периоды значительных аварий на АЭС, что не обещает «столбовой» дороги близкому «физическому» родственнику – термоядерной энергетике.

Научные основы атомной энергетики непосредственно связаны с рядом открытий в области физики, среди которых можно отметить следующие:

открытие явления радиоактивности на основе работ немецкого ученого В. К. Рентгена (1895);

открытие электрона английским физиком Дж. Дж. Томсоном (1897);

получение первого радиоизотопного источника электроэнергии английским физиком Г. Г. Дж. Мозли (1913);

первая ядерная реакция, проведенная английским физиком Э. Резерфордом (1919).

Первая в мире АЭС опытно-промышленного назначения мощностью 5 МВт была построена в 1954 г. в г. Обнинске (СССР). Как можно видеть, между первым открытием и первой промышленной установкой лежало почти 60 лет. И если бы не военные программы, связанные с атомным оружием, может быть, этот временной лаг был бы еще более значительным. Действительно, если брать за точку отсчета начало работы первого ядерного реактора CP-1 в декабре 1942 г. (США), имевшего целью получение оружейного плутония, то временной лаг сжимается до 14 лет.

Атомная энергетика, основанная на делении ядер, прошла путь от лабораторных опытов до производства электроэнергии в промышленных масштабах за два десятилетия. Если иметь в виду технологическую составляющую процесса получения энергии, то она состоит в следующем: топливо для реакторов деления состоит из урана в твердой форме, в котором проходит цепная реакция с участием нейтронов и с выделением энергии. Среди продуктов реакции оказывается большое количество радиоактивных актиноидов с большим временем полураспада, вплоть до нескольких тысяч лет. Реакторы деления сталкиваются с опасностью аварий с расплавлением активной зоны ядерного реактора, что налагает строгие требования на систему контроля и водяного охлаждения. С учетом этих потенциальных рисков, советским ученым и промышленности удалось построить первую в мире АЭС в 1954 г. (г. Обнинск Калужской области). За пределами СССР первая АЭС промышленного назначения мощностью 46 МВт была введена в эксплуатацию в 1956 г. в Колдер-Холле (Великобритания) и через год вступила в строй АЭС мощностью 60 МВт в Шиппингпорте (США). К концу 1956 г. в мире был введен в строй 21 реактор общей мощностью 1,5 ГВт, и к середине 1960-х гг. в среднем в год вводилось около 10 новых реакторов. Пик активного строительства новых АЭС пришелся на 1975 г., когда были введены в строй 40 реакторов [8].

Необходимо отметить, что позитивная динамика в развитии атомной энергетики не приветствовалась экологическими организациями, особенно в промышленно развитых странах. Первая крупная авария, случившаяся в 1979 г. на АЭС Три-Майл-Айленд (Three Mile Island) в США, способствовала формированию организованной оппозиции атомной энергетике, и к концу 1970-х гг. число строящихся АЭС сократилось, часть из которых была полностью остановлена, а для других отложены сроки строительства. В период до аварии в 1986 г. на Чернобыльской АЭС (СССР), в среднем в год вводилось от 12 до 20 новых реакторов, но большой выброс радиоактивности и человеческие жертвы подвергли серьезному потрясению сами основы ядерной энергетики. Тем не менее, к концу 1986 г. в 23 странах строилось 133 реактора мощностью 118 ГВт [8]. Следующее серьезное испытание на долю мировой ядерной энергетики выпало в 2011 г., когда в результате сильного землетрясения и последовавшего вслед за ним цунами, на АЭС «Фукусима-дайити» (Япония) была расплавлена активная зона реакторов на трех энергоблоках. Кроме самого природного фактора, недоработки в проекте и пробелы в системе регулирования также



оказались в числе основных причин этой крупной аварии. Согласно оценке отдельных экспертов из Массачусетского технологического института (Кембридж, США), в течение следующего десятилетия в развитых странах основной тренд развития ядерной энергетики примет форму продления срока службы работающих реакторов, умеренного повышения их мощности и скромного уровня нового строительства, что в целом не будет способствовать расширению ядерной энергетики в их энергобалансе<sup>13</sup>.

Сегодня, спустя 13 лет после аварии на АЭС «Фукусима-дайити», встает вполне закономерный вопрос о текущей ситуации в мировой ядерной энергетике и перспективах ее развития. Климатическая повестка, которая стала одной из основных при формировании энергетической политики промышленно развитых стран, в значительной степени ориентирована на поддержание возобновляемых источников энергии, прежде всего солнечной и ветряной. Нельзя не учитывать и политически мотивированные решения отдельных стран (прежде всего Германии и, в меньшей степени, Японии) о полном отказе от ядерной энергетики.

Прежде всего, отметим, что спустя 11 лет после последней крупной аварии, имеется большой список стран, в которых в 2022 г. на долю АЭС приходилось более 30 % от всей вырабатываемой электроэнергии<sup>14</sup>:

Страна	Электроэнергия, %
Франция .....	62,6
Словакия.....	59,2
Венгрия .....	47,0
Бельгия .....	46,4
Словения .....	42,8
Чехия .....	36,7
Швейцария .....	36,4
Финляндия .....	35,0
Болгария .....	32,6
Армения .....	31,0
Корея .....	30,4

В 2022 г. в мире эксплуатировалось 416 реакторов с общей установленной мощностью 374 641 МВт, на стадии строительства находилось 59 реакторов в 15 странах с общей мощностью 61 637 МВт. Всего было выведено из эксплуатации 210 реакторов мощностью 3178 МВт, в том числе в США – 41 реактор, Великобритании – 36, Германии – 33, Японии – 27 и России – 11<sup>15</sup>.

В табл. 1 приведена информация о состоянии атомной отрасли в 10 странах, имеющих наибольший парк действующих реакторов. Как можно видеть из табл. 1, изменился географический тренд мировой ядерной энергетике: наиболее активное развитие происходит на азиатском континенте. Китай, Индия, Турция, Россия, Египет и Бангладеш планируют ввести в строй 46 реакторов.

Рисунок показывает более чем 30-летнюю динамику изменения доли атомной генерации в мировом производстве электроэнергии и отдельных странах, активно развивающих этот сегмент энергетике. Видно, что быстрый рост ядерной энергетике достиг своего пика в 1996 г., когда его доля в мировом производстве электроэнергии составила 17,7 %. После этого в течение почти 20 лет эта доля снижалась, пока не стабилизировалась в 2015 г. на уровне около 10 %. Япония пережила самое драматическое падение этого

<sup>13</sup> Joskow, Paul L., Parsons, John E. The Future of Nuclear Power After Fukushima, *Economics of Energy and Environmental Policy*. 1(2) (2012) 1–30.

<sup>14</sup> IAEA Share of Electricity Generation in 2022. Режим доступа: <https://pris.iaea.org/PRIS/WorldStatistics/NuclearShareofElectricityGeneration.aspx> (дата обращения: 25.05.2024).

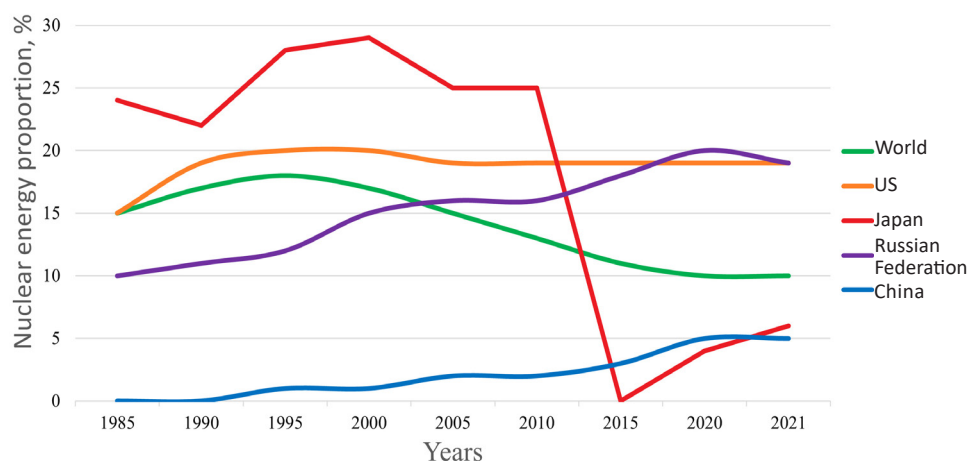
<sup>15</sup> IAEA PRIS Country statistic. Режим доступа: <https://pris.iaea.org/PRIS/CountryStatistics/CountryStatisticsLandingPage.aspx> (дата обращения: 25.05.2024).

Таблица 1

**Состояние атомной отрасли в отдельных странах**

Страна	Количество реакторов			Мощность, МВт		
	В работе	Выведены	Строятся	В работе	Выведены	Строятся
США	94	41	0	96952	19976	0
Франция	56	14	1	61370	5549	1630
Китай	56	0	25	54152	0	26301
Россия	36	11	4	26082	4882	3850
Корея	26	2	2	25825	1237	2680
Индия	20	0	7	6920	0	5398
Канада	19	6	0	13661	2143	0
Украина	15	4	2	13107	3515	2070
Япония	12	27	2	11046	17128	2653
Великобритания	9	36	2	5883	7755	3260

Примечание. Таблица составлена авторами по данным, приведенным в источнике: <https://pris.iaea.org/PRIS/WorldStatistics/OperationalReactorsByCountry.aspx>



Динамика доли ядерной энергетики в производстве электроэнергии в мире в целом (World) и в отдельных странах

сектора энергетики после 2011 г. США и Россия смогли за этот период увеличить долю отрасли в выработке электроэнергии до 19 %, а Китай, начав практически с нуля, быстро наращивает мощности атомной отрасли.

В течение почти полувека основной доминантой развития мировой ядерной энергетики было укрупнение блоков с единичной мощностью от 500 до 1600 МВт и создание на их основе мощных атомных станций, стоимостью до 10 млрд. долларов. На рубеже веков этот тренд стал смещаться в сторону создания атомных станций малой мощности: плавучих, транспортабельных и стационарных.

Например, для России предварительные оценки показывают, что общая потребность для покрытия дефицита электрической и тепловой энергии за счет атомных станций малой мощности на период до 2030 г. для северо-востока страны составляет порядка 20 ГВт (100 – 2000 блоков мощностью 10 – 100 МВт) [9]. Россия имеет определенный задел в этом новом сегменте. В декабре 2019 г. началась эксплуатация плавучего энергетического блока «Академик Ломоносов», который предназначен для работы в составе плавучей атомной теплоэлектростанции и представляет собой новый класс энергоисточников на базе российских технологий атомного судостроения. В октябре 2021 г. «Атомэнергомаш»

заключил контракт с «Атомфлотом» на поставку модернизированных плавучих энергоблоков, которые будут обеспечивать электроэнергией Баимский горно-обогатительный комбинат на Чукотке, на основе плавучих атомных станций малой мощности с реакторами РИТМ-200. В 2026 г. должен вступить в строй опытный демонстрационный (ОД) реактор на быстрых нейтронах БРЕСТ-ОД-300 (проект «Прорыв», г. Северск), мощностью 300 МВт – АЭС с замкнутым топливным циклом<sup>16</sup>. В США аналогичными являются проект TerraPower с быстрым натриевым реактором Sodium и проект «Xe-100» от X-energy. Кроме того, изучаются возможности строительства американских малых модульных реакторов компании NuScale в Румынии, Болгарии, Польше, Казахстане, Украине. Франция также анонсировала планы по финансированию разработок малых модульных реакторов<sup>17</sup>.

В качестве основных преимуществ малых АЭС считаются следующие:

возможность производства для них реакторных модулей крупными сериями в виде законченных блоков, что сокращает сроки и снижает сложность строительства АЭС;

потенциальная возможность быть дополняющим партнером для ветро-солнечной энергетики;

освоение новых рыночных ниш, которые коммерчески невозможны для больших АЭС;

возможность постепенного наращивания мощностей, что значительно упрощает поиск финансирования.

В связи с ростом интереса к разработке различных конструкций малых модульных реакторов, уже имеется обобщенная и всеобъемлющая экономическая модель от первого в своем роде малого модульного реактора (ФОАК) до  $n$ -го в своем роде (НОАК), учитывающая номинальную мощность, конфигурацию станции и финансовые условия, в которых реализуется проект [10]. В табл. 2 приведены оценочные приведенные затраты (LCOE) для малых АЭС, планируемых к вводу в эксплуатацию к 2025 году.

Таблица 2

**Оценочные приведенные затраты для малых АЭС, планируемых к вводу в эксплуатацию к 2025 году**

Страна	LCOE, \$/(МВт·ч)		
	$d = 3,0\%$	$d = 7,0\%$	$d = 10,0\%$
Франция	45,3	71,1	96,9
Япония	61,2	86,7	112,1
Южная Корея	39,4	53,3	67,2
Словакия	57,6	101,8	146,1
США	43,9	71,3	98,6
Китай	49,9	66,0	82,1
Россия	27,4	42,0	56,6
Индия	48,2	66,0	83,9

Обозначения: LCOE (Levelized Cost of Energy) – средняя расчетная себестоимость производства электроэнергии на протяжении всего цикла АЭС (включает все возможные инвестиции, затраты и доходы);  $d$  – ставка дисконтирования, т. е. процентная ставка, используемая для пересчета будущих потоков доходов в единую величину текущей стоимости.

Примечания. 1. LCOE здесь оценивается при коэффициенте мощности 85 % в текущих ценах 2018 г. 2. Таблица составлена авторами по данным литературного источника [11].

<sup>16</sup> ОД-реактор на быстрых нейтронах Брест-ОД-300 (проект «Прорыв», г. Северск, Томская область). Режим доступа: [https://psk-holding.ru/object/energeticheskie\\_obekty/od-reaktor-na-bystrykh-neyronakh-brest-od-300-proekt-proryv-g-seversk-tomskaya-oblast/](https://psk-holding.ru/object/energeticheskie_obekty/od-reaktor-na-bystrykh-neyronakh-brest-od-300-proekt-proryv-g-seversk-tomskaya-oblast/) (дата обращения: 27.05.2024).

<sup>17</sup> Мировая атомная энергетика в 2021 году. Режим доступа: <https://habr.com/ru/articles/645793/> (дата обращения: 27.05.2024).

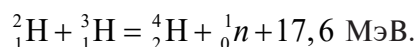
Как видим, ядерная энергетика в настоящее время переживает определенный подъем. Этот новый тренд связан с двумя факторами: во-первых, повышается надежность реакторов и всех систем АЭС; во-вторых, создается новая продуктовая ниша в виде малых АЭС различной мощностной конфигурации, что существенно расширяет круг потенциальных потребителей.

Повторит ли термоядерная энергетика путь атомной отрасли? Это во многом зависит от скорости преодоления научных, технологических и даже экономических барьеров, которые стоят сегодня перед ней.

### Современное состояние научных исследований и технологий в сегменте термоядерного синтеза

**Предварительные замечания.** Термоядерный синтез – процесс, который дает энергию Солнцу и всем звездам, на Земле можно осуществлять с помощью лития и дейтерия (изотоп водорода) в качестве топлива. Оба эти вещества распространены на Земле (первое в земной коре, второе в морской воде), и они могут удовлетворять потребность человечества в энергии без сжигания углеводородов. На самом деле реакция синтеза происходит между изотопами водорода: дейтерием D и тритием T. Если дейтерий можно достаточно легко получать из воды, то тритий можно нарабатывать прямо в реакторе. Действительно, нейтроны, выделяемые в результате (D-T)-синтеза, поглощаются в литиевом blankets, окружающем реактор. При этом вырабатывается тритий для поддержания (D-T)-реакции, так что реально расходуется литий, который одновременно является теплоносителем. Выход энергии очень велик: 1 г дейтерий-тритиевого топлива производит столько же тепла, сколько 8 т нефти.

Реакция, осуществимая при наиболее низкой температуре – это реакция синтеза дейтерия D ( ${}^2_1\text{H}$ ) с тритием T ( ${}^3_1\text{H}$ ):



Ядра дейтерия и трития сливаются, образуя ядро гелия He ( ${}^4_2\text{He}$ , альфа-частица) и высокоэнергетического нейтрона  ${}^1_0n$ . Такая реакция дает значительный выход энергии (17,6 МэВ).

Управляемый термоядерный синтез возможен при одновременном выполнении двух условий (для реакции D-T):

1. Скорость соударения ядер соответствует температуре плазмы  $T$ , т. е.

$$T > 108 \text{ К};$$

2. Соблюдается критерий Лоусона, а именно –

$$n\tau > 10^{14} \text{ см}^{-3}\cdot\text{с},$$

где  $n$  – плотность высокотемпературной плазмы,  $\tau$  – время удержания плазмы в системе.

Время  $\tau$  зависит от размера установки и коэффициентов диффузии (температуроупругости) следующим образом:

$$\tau \sim a^2 / \chi,$$

где  $a$  – размер установки,  $\chi$  – коэффициент температуропроводности, обратно пропорциональный квадрату индукции магнитного поля.

Следовательно, для эффективного синтеза необходимы большие установки с сильным магнитным полем.

Прирост энергии от плазмы, подвергающейся термоядерному синтезу, принято обозначать буквой  $Q$ , т. е.  $Q$  – это показатель, который сравнивает мощность, необходимую для работы термоядерной плазмы, с мощностью, выделяемой самой термоядерной плазмой.

Также различают «научную» (scientific) и «инженерную» (engineering) величины  $Q$ :

$Q_{sci}$  сравнивает энергию, поступающую в плазму, с энергией, выделяемой на выходе;  $Q_{eng}$  учитывает энергию, поступающую и выходящую из всей термоядерной электростанции.

Ученые трудились последние 60 лет с целью подобрать наилучшие условия для проведения реакции.

**Устройства с магнитным удержанием плазмы.** Сейчас наиболее перспективным считается устройство токамак, предложенное в СССР в Курчатовском институте Академии наук СССР (г. Москва), в котором топливо, нагретое до 100 – 200 млн. град., помещено в тороидальное магнитное поле.

Термин «токамак» расшифровывается как тороидальная камера с магнитными катушками.

Концепция магнитного удержания плазмы была выдвинута в СССР академиками А. Д. Сахаровым и И. Е. Таммом. Согласно этой концепции, заряженные частицы плазмы удерживаются в токамаке магнитным полем, создаваемым внешними катушками, а нагрев плазмы осуществляется током, протекающим по плазме.

При таких температурах вещество находится в плазменном состоянии, когда электроны полностью «оторваны» от ионов. Установки токамак первое время работали только в Курчатовском институте. В 1969 г. под руководством Л. А. Арцимовича на токамаке Т-3 была достигнута температура 10 млн. град. Английские ученые из национальной лаборатории в Калхэме (Culham) произвели измерения на Т-3 с помощью своей аппаратуры и подтвердили этот факт, в который поначалу отказывались верить. После этого в мире начался настоящий бум токамаков.

В СССР в 1975 году, в Курчатовском институте, был построен токамак следующего поколения Т-10; затем в Физико-техническом институте им. А. Ф. Иоффе (г. Санкт-Петербург) появились токамаки ТУМАН-3М, ФТ-2 и сферический токамак Глобус-М. В декабре 2020 г. в Курчатовском институте был запущен современный токамак Т-15МД.

В настоящее время основной целью российской термоядерной программы является создание токамака с реакторными технологиями (РТТ). Предполагается разработка и интеграция в одной установке ключевых инновационных термоядерных технологий.

При температурах 100 – 200 млн. град. вещество находится в плазменном состоянии. Заряженные частицы, электроны и ионы удерживаются в токамаке магнитным полем. В токамаке-реакторе происходит синтез и выделяется огромное количество энергии. Конечно, удерживать «солнце в ловушке» – непростая задача, особенно если учесть, что должна быть спроектирована система для выработки электроэнергии по конкурентоспособной цене. Зона удержания плазмы в токамаке представляет собой камеру в форме бублика. В ней образуется плазменное кольцо, по которому циркулирует большой электрический ток. Плазма удерживается мощным магнитным полем как тороидальным, созданным внешними токами, так и полоидальным (поле направлено вдоль линий, проходящих через полюсы сферической системы координат), созданным токами по плазме.

**Установки с инерционным удержанием плазмы.** Принципиально другой, соперничающий с токамаками, способ получения термоядерной энергии, – сжатие и разогрев капсул с топливом излучением мощных лазеров. Впечатляющие успехи в этой области были достигнуты на «Национальной установке зажигания» в Ливерморской национальной лаборатории им. Э. Лоуренса (Lawrence Livermore National Laboratory's National Ignition Facility) в Калифорнии, США. Однако такой метод синтеза не может работать стационарно, что является требованием к будущей электростанции.

Преимущества термоядерного синтеза можно подытожить следующим образом: запасы топлива неисчислимы и равномерно распределены по Земле. Радиоактивные отходы при реакции синтеза появляются только как результат активации элементов конструкции реактора нейтронами, они обладают малой радиационной токсичностью. В противоположность реакторам деления, аварии с расплавлением активной зоны на реакторах синтеза невозможны, нет почти никакой опасности распространения радиоактивных отходов, кроме возможной, но маловероятной утечки трития.

В 1970-е гг. американские исследователи произвели оценку, доказав, что для получения коммерческой термоядерной энергии требуются ежегодные инвестиции в 2 – 3 млрд. долларов на период примерно до 1990 – 2005 г. (в зависимости от прилагаемых усилий). Также они оценили минимальный уровень финансирования, необходимый для исследований в этой области, которые хоть когда-нибудь увенчались бы успехом. К сожалению, бюджет исследований термоядерного синтеза оставался меньше этой планки на протяжении более чем тридцати лет.

**Препятствия, стоящие на пути создания термоядерной энергетики.** Уже прошло более пятидесяти лет, а мир так и не создал термоядерную энергетику. И причины этого кроются не только в сфере финансов. Есть причины научного и технологического характера, а также сложные задачи системного проектирования будущих станций.

*Причины научного характера.* Прежде всего, следует выделить проблему турбулентности плазмы. В установках для термоядерного синтеза, в силу требуемых для него высоких температур, необходимо создавать плазму. По сравнению с обычными жидкостями, в плазме задача усложняется из-за взаимодействия заряженных частиц посредством электромагнитного поля. Турбулентность – внутренне нелинейное и сильно разупорядоченное движение среды, возникающее только в открытых системах и имеющее много степеней свободы в пространстве и времени. Около 10 – 15 лет назад новые возможности суперкомпьютерных вычислений начали помогать в постижении тайны турбулентности. Задача математического описания турбулентности усложняется тем, что на термоядерную плазму оказывают влияние сжимаемость, анизотропия и неоднородность среды, вызванные вращением, токами по плазме и прочими факторами, в том числе влиянием стенок установки. Переход в описании турбулентности от жидкости к намагниченной многочастичной плазме осуществляется с помощью доступных ныне численных методов и мощных суперкомпьютеров. На сегодняшний день в целом достигнуто понимание механизмов турбулентности, а, следовательно, механизмов удержания плазмы в магнитных ловушках. Однако стоит отметить, что пока не хватает некоторых экспериментальных данных, необходимых для полной проверки этих механизмов. Кроме того, термоядерная плазма реакторов может проявлять пока неизвестное и трудно предсказуемое поведение. До сих пор почти все исследования проводились на плазме, нагретой внешним источником. По состоянию на март 2023 года только один объект – токамак JET – создал плазму с заметным выходом нейтронов.

Таким образом, большая часть научного понимания поведения плазмы на Земле основана на моделировании и экстраполяции современных результатов. При этом вполне возможно, что плазма в термоядерных энергетических устройствах будет вести себя иначе.

*Причины технологического характера.* Препятствия на пути развития термоядерной энергетики связаны и с разработкой новых материалов и технологий, с которыми человечество ранее не сталкивалось. Ключевой проблемой для развития термоядерной энергетики является то, что термоядерные энергетические системы, особенно компоненты, которые подвергаются непосредственному воздействию плазмы, должны будут выдерживать экстремальные физические нагрузки в течение длительных периодов времени, чтобы генерировать коммерческую электроэнергию. На коммерческой термоядерной электростанции материалы должны иметь сроки службы хотя бы несколько лет (а лучше дольше), чтобы избежать частого ремонта или замены компонентов. Однако доступные и существующие на сегодня материалы не выдерживают тех высоких напряжений, которые создает термоядерная плазма, что делает невозможным их коммерческое использование. Без достижений в области материаловедения будет невозможно построить термоядерные энергетические системы, которые бы смогли надежно производить коммерческую электроэнергию [12]. Например, магнитное поле в реакторе должно создаваться с помощью сверхпроводящих катушек, иначе омические потери, связанные с протеканием токов в таких катушках, будут слишком велики – ведь реактор должен вырабатывать энергию все время, а значит работать в стационарном режиме. Огромные сверхпроводящие катушки должны при этом охлаждаться до гелиевых температур, иметь заданную конфигурацию, выдерживать огромные механические напряжения и т. п.

Надо также признать, что получение энергии термоядерного синтеза идет по нескольким направлениям, как всякий научный поиск. Как уже было сказано выше, основных направлений пока два: использование магнитного поля для управления плазмой (магнитное удержание – токамаки) и использование лазера или электрических разрядов для сжатия плазмы (инерционное удержание).

**Термоядерный синтез с инерционным удержанием.** В данном случае используются мощные лазеры или электрические разряды для сжатия небольшой капсулы термоядерного топлива до экстремальных температур и давлений на короткое время. Именно при использовании мощных лазеров впервые показатель  $Q_{sci}$  достиг значения, превышающего

единицу  $(1,5)^{18}$ ; в декабре 2022 г., в ходе экспериментов по термоядерному синтезу в Национальной установке зажигания (см. выше), в США. Как уже отмечено, токамак — это концепция магнитного удержания, которая удерживает плазму в форме тора (бублик) с помощью магнитных полей. Хотя рекорд  $Q_{sci}$  для токамаков составляет всего 0,67, поддерживающие технологии являются одними из самых передовых для термоядерного синтеза. Преимущество токамака в том, что его проще моделировать и создавать, чем другие конструкции, поскольку он тороидально симметричен. В настоящее время на базе этой концепции проводятся исследования в США (DIII-D, Сан-Диего, NSTX-U, Принстон), Японии (JT-60SA), Кореи (KSTAR), Китае (EAST), Великобритании (MAST-Upgrade), Германии (ASDEX-Upgrade и России (Т-15МД, Глобус-М2) и др.

**Стеллараторы.** Это еще один тип концепции термоядерного синтеза с магнитным удержанием. Такой тип поддерживает плазму с помощью скрученных магнитов, которые сложно смоделировать и построить. Эта концепция активно продвигается в Германии (Wendelstein 7-X), Японии (Large Helical Device) и США (Helically Symmetric Experiment).

**Z-пинч.** Это гибридный подход, в котором для магнитного удержания и сжатия плазмы используется электрический ток. Производительность машин Z-пинча значительно ниже, чем у токамаков и термоядерного синтеза с инерционным удержанием. Экспериментальная конструкция не требует внешних магнитных полей, что обеспечивает более простую конструкцию и потенциально более низкую стоимость, по сравнению с другими концепциями, однако работа возможна только в импульсном режиме. Наиболее активно эта концепция разрабатывается в США (Lawrence Livermore National Laboratory, Sandia National Laboratories).

**Сложные задачи системного проектирования.** Они обусловлены необходимостью разработки систем для эффективного извлечения энергии из реакции термоядерного синтеза и обеспечения экономически состоятельного источника электроэнергии. Сама сложность термоядерных систем означает, что решение одной проблемы может выявить другую.

Можно привести следующие примеры таких сложных задач проектирования термоядерной энергетической системы:

- извлечение побочных продуктов термоядерного синтеза из плазмы;
- создание плазменных систем, которые легко обслуживать и заменять;
- управление экстремально высокими и низкими температурами [12].

Для решения вышеуказанных проблем в области термоядерного синтеза был инициирован ряд международных исследовательских программ. Среди них надо отметить в первую очередь Европейскую термоядерную программу (European fusion programme), основная цель которой — создание действующего реактора для демонстрации научной, технологической и экономической осуществимости термоядерной энергетики. Основой этой программы является серия токамаков: JET (Joint European Torus), ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor) и DEMO (DEMONstration Power Plant).

Среди перечисленных JET — самый большой токамак в мире (работает с 1983 г.). Его основное предназначение — это реализация экспериментальных программ с целью обоснования физических основ ITER и проверка конкретных технических вариантов этого проекта.

ITER создается как машина «следующего шага», которая должна продемонстрировать научную и технологическую осуществимость термоядерного синтеза. Предполагается, что эти цели будут достигнуты за счет длительного поддержания (D-T)-плазмы в течение нескольких сотен секунд. Параллельно с ITER необходимо построить международную установку по облучению термоядерных материалов (IFMIF) для тестирования и квалификации конструкционных материалов, необходимых для третьего этапа DEMO.

DEMO должно стать первым термоядерным устройством, которое будет коммерчески рентабельным и вырабатывать значительное количество электроэнергии в результате термоядерного синтеза.

<sup>18</sup> Энергия для питания лазеров составляла около 300 МДж, поэтому, если бы она использовалась в термоядерной электростанции, то  $Q_{eng}$  был бы не выше 0,01. Это означает, что в ходе эксперимента нужно было бы произвести как минимум в 100 раз больше энергии только для того, чтобы учесть энергию, необходимую для его запуска.

Проект ITER реализуется на юге Франции. Его оценочная стоимость составляет 20 млрд. евро, и он является одним из самых масштабных научных проектов в истории. В его реализации принимают участие Евросоюз, Индия, Китай, Россия, США, Южная Корея и Япония. Если этот проект будет успешным, реактор будет производить полгигаватта энергии синтеза и сделает возможной разработку коммерческих реакторов. Целью ITER является создание горячей плазмы, в которой тепло, необходимое для поддержания температуры в реакторе, возникает в самом реакторе как результат термоядерного синтеза. В цикле работы реактора вначале создается ионизованный газ, затем возникает ток по плазме, и ее нагревают с помощью внешних источников тепла до температуры, необходимой для синтеза; затем внешний нагрев отключают, и температура плазмы поддерживается за счет реакций синтеза. Для поддержания горячей плазмы доступно примерно 25 % энергии, выделяемой при синтезе. Строгий критерий достижения самоподдерживающейся реакции в термоядерном реакторе на такие параметры, как температура, концентрация и время удержания энергии в плазме, хорошо известен и носит название критерия Лоусона. Для проекта ITER планируется значение  $Q_{sci}$  более 10.

Реализация проекта ITER была бы невозможна без Концептуального исследования европейских электростанций (PPCS), проведенного в период 2001 – 2004 гг. [13, 14]. В рамках данного исследования были отработаны четыре модели установок PPCS A–D, основанные на концепции токамака.

Каждую модель силовой установки характеризуют два основных элемента: бланкет<sup>19</sup> и дивертор<sup>20</sup>. Модели A и B основаны на ограниченной экстраполяции показателей физики плазмы, по сравнению с проектными показателями для ITER, и на краткосрочных технологических решениях для бланкета. Модели C и D основаны на последовательно более совершенных концепциях плазменной конфигурации и технологии материалов. Их технология основана, соответственно, на концепции «двойного» бланкета и концепции «самоохлаждающегося» бланкета. В рамках данного исследования были разработаны две ключевые инновационные концепции:

первая представляет собой схему плановой замены бланкета и дивертора, которая показывает потенциал хорошей общей эксплуатационной готовности установки (не менее 75 %);

вторая представляет собой концептуальный проект дивертора с гелиевым охлаждением, который допускает тепловые нагрузки (до 10 МВт/м<sup>2</sup>), вдвое превышающие таковые, ранее предусмотренные для концепций с гелиевым охлаждением.

Эти исследования также позволили определить основные этапы термоядерного синтеза, которые необходимо пройти до начала строительства термоядерной станции (это касается, прежде всего, аттестации материалов и различных систем) и оценить технологические и инженерные проблемы, стоящие за каждым этапом. В частности, в качестве ключевых определены внутренние компоненты (бланкет и дивертор), а программа технологических исследований и разработок скорректирована с целью анализа всех компонентов, в том числе тех, которые находятся за пределами основного корпуса станции.

### Горизонты промышленного освоения термоядерной энергетики

Скорость решения научных и технологических задач, часть из которых была затронута выше, является основным фактором, предопределяющим временные горизонты появления первых термоядерных станций. В настоящее время есть разные оценки тех временных горизонтов, когда будут созданы первые термоядерные станции, способные генерировать и передавать электроэнергию в распределительные системы. Нескольким поколениям физиков известна фраза о том, что «термоядерный синтез будет доступен через 30 лет».

В поисках ответа на этот вопрос международная группа исследователей изучила самые значимые инициативы в области термоядерного синтеза с 1985 по 2022 г., используя 49

<sup>19</sup> Бланкет – это компонент, в котором нейтроны, образующиеся в процессе термоядерного синтеза в горячей плазме, замедляются, передают свою энергию в виде тепла и поглощаются атомами лития с образованием промежуточного топлива – трития.

<sup>20</sup> Дивертор – это компонент, ответственный за отвод из плазменной камеры продуктов реакции термоядерного синтеза, главным образом гелия, и связанной с ним тепловой энергии.



источников. Обработка исходных данных на двух классах моделей, а именно – с постоянным прогрессом (Constant Progress Model) и динамическим (Dynamic Progress Model), показала, что «30 лет назад считалось, что термоядерный синтез будет промышленно освоен через 19,3 года; 20 лет назад предсказывался временной период в 28,3 года; 10 лет назад – 27,8 лет; теперь ученые полагают, что до освоения термоядерной энергии осталось всего 17,8 лет» [15]. Если обратиться к американским источникам, то указываются следующие сроки появления первых промышленных установок, способных генерировать электроэнергию: середина 2040-х<sup>21</sup>, с 2035 по 2040 гг.<sup>22</sup> и даже начало 2030-х<sup>23</sup>. Согласно оценкам, проведенным Ассоциацией термоядерной промышленности (Fusion Industry Association), коммерческое использование термоядерной энергии начнется с 2031 по 2035 годы, а отдельные страны, имеющие собственные программы термоядерного синтеза, указывают 2050 год как стартовую точку коммерческой эксплуатации первых термоядерных станций [12].

Если проект ITER будет завершен в 2040 г., как это планируется, то, скорее всего, следует ожидать, что потребуется не менее 5 лет для накопления критически необходимого объема экспериментальных данных, чтобы можно было приступить к производству первого промышленного образца термоядерной станции; поэтому окончание срока освоения технологий к 2050 г. кажется вполне правдоподобным.

Что касается самой экономической составляющей термоядерной энергетики, то текущие оценки носят лишь вероятностный характер. И это связано в первую очередь с большой неопределенностью, которая присутствует во всем: от масштабов самой станции до состояния глобальной энергетической системы. Основные оценки капитальных затрат на термоядерную установку были даны после публикации в 2005 г. итогового отчета концептуального исследования европейской термоядерной электростанции – PPCS [13]. Эти оценки лежат в пределах от 2700 до 9700 долларов за киловатт мощности, в предположении, что мощности электростанций составят от 1000 до 1500 МВт. Согласно сведениям в этом же отчете, наибольшая доля в общих капитальных затратах приходится на две составляющие:

стоимость магнитов и системы охлаждения,  
возведение здания и подготовка строительной площадки.

Если предположить, что капитальные затраты на киловатт мощности почти не зависят от размера, то расчетные капитальные затраты на термоядерную электростанцию мощностью 1000 МВт будут варьироваться от 2,7 до 9,7 млрд. долларов [13, 16, 17].

В современных экономических системах важным фактором коммерческой окупаемости проектов является развитость используемых в них технологий. Поэтому следует ожидать, что по мере развития технологий, установки термоядерного синтеза будут снижаться в цене. Поскольку масштабы производства зависят от зрелости технологий, то априори можно предположить, что первые промышленные образцы будут более дорогими, чем последующие.

В случае с созданием промышленных установок термоядерного синтеза, критически важным следует считать время прохождения через «долину смерти» – периода времени между фундаментальными исследованиями и коммерциализацией нового продукта, характеризуемого, как правило, дефицитом финансирования. В работе [18] показано, например, что вопрос о выходе на рынок наиболее актуален на ранней стадии, когда с технологической точки зрения термоядерный синтез готов предложить первое поколение, например 10 электростанций. По мнению автора этого исследования, инвесторы не станут заказывать станции второго поколения, например, в количестве 100 единиц, не

<sup>21</sup> Fusion Energy Sciences Advisory Committee, Powering the Future, Fusion & Plasmas: A Long-Range Plan to Deliver Fusion Energy and to Advance Plasma Science. Режим доступа: [http://firefusionpower.org/DRAFT\\_Fusion\\_and\\_Plasmas\\_Report\\_120420.pdf](http://firefusionpower.org/DRAFT_Fusion_and_Plasmas_Report_120420.pdf) (дата обращения: 10.06.2024).

<sup>22</sup> Bringing Fusion to the U.S. Grid. Режим доступа: <https://nap.nationalacademies.org/catalog/25991/bringing-fusion-to-the-us-grid> (дата обращения: 10.06.2024).

<sup>23</sup> White House, Fact Sheet: Developing a Bold Vision for Commercial Fusion Energy. Режим доступа: <https://www.whitehouse.gov/ostp/news-updates/2022/03/15/fact-sheet-developing-a-bold-vision-for-commercial-fusion-energy/> (дата обращения: 10.06.2024).

увидев результаты работы 10 станций первого поколения. Это означает, что между двумя поколениями станций будет существенный временной лаг, поскольку только опытная эксплуатация может обеспечить технологическую эволюцию изделия. В этой же работе исключается вариант ускоренного инновационного цикла, как, например, для солнечной и ветряной энергетики, когда в периоды наиболее быстрого роста, имело место удвоение мощностей каждые 2,5 года, поскольку термоядерные электростанции – это большие и сложные установки, строительство которых требует длительного времени и больших единовременных вложений.

Тем не менее, в 2022 г. в США была принята амбициозная по своим замыслам и временным рамкам программа<sup>24</sup>, направленная на ускоренное освоение энергии термоядерного синтеза: «Смелое десятилетнее видение коммерческой термоядерной энергетики» (Bold Decadal Vision for Commercial Fusion Energy). Эта программа ставит целью разработку десятилетней стратегии по ускорению реализации коммерческой термоядерной энергии, обеспечение жизнеспособности коммерческой термоядерной энергии в координации с частным сектором и обеспечение финансирования в размере 50 млн. долларов США, которые будут поддерживать фундаментальные научные и технологические исследования, связанные с высокоприоритетными вопросами будущей пилотной термоядерной установки. Согласно отдельным источникам, за 70 лет, начиная с 1951 года, США вложили около 35 млрд. долларов в исследования по термоядерной энергетике, причем пик таких вложений пришелся на 1970-е гг., когда ежегодное финансирование росло с 200 млн. в 1970 г. до 1400 млн. долларов в 1980 г. [19]. Правда, среди самих американских физиков сразу появился большой скепсис относительно успешности такой программы по двум причинам: во-первых, принцип «параллельной» работы по созданию технологий и материалов здесь просто не работает, и во-вторых, для управления термоядерным синтезом необходимо иметь достаточно большую установку [20].

Несмотря на определенный скепсис со стороны отдельных ученых, которые считают, что только на больших установках можно достичь весомых практических результатов по управлению термоядерным синтезом, частные коммерческие структуры в лице стартапов рассматривают как возможный вариант ускорения инновационного цикла создание компактных термоядерных установок. Эксперты отмечают резкий рост стартапов в сегменте создания компактной термоядерной энергетики за последние 5 – 6 лет, а 32 самые успешные компании уже привлекли только частных инвестиций в размере 6,2 млрд. долларов<sup>25</sup>.

Наиболее крупным стартапом является американская компания Commonwealth Fusion Systems, которая намерена построить небольшую термоядерную электростанцию на основе конструкции токамака ARC, где будут использованы мощные магниты, изготовленные из высокотемпературных сверхпроводников<sup>26</sup>. Самые агрессивные стартапы – Commonwealth Fusion Systems, Avalanche Energy, TAE Technologies, Helion Energy (США), General Fusion (Канада) смогли мобилизовать более 3,6 млрд. долларов<sup>27</sup>.

Необходимо отметить, что такие смелые намерения базируются на отдельных научных достижениях, которые получены вне рамок ИТЕР. Так, консорциум, состоящий из исследовательских и бизнес-структур, а именно – Tokamak Energy Ltd (Великобритания), Princeton and Oak Ridge National Laboratory (США) и Institute for Energy and Climate Research (Германия) на сферическом токамаке ST40, реактор которого имеет диаметр 0,8 м, достигли температуры в 100 млн. К [21]. Все большее распространение получает совместная деятельность частных и исследовательских структур: в Японии Токийский

<sup>24</sup> Там же.

<sup>25</sup> \$6.2 Billion Fusion Energy Funding Race: Turning the Dream of Creating a Star on Earth into Reality. Режим доступа: <https://www.nuclearbusiness-platform.com/media/insights/62-billion-fusion-energy-funding-race-turning-the-dream-of-creating-a-star-on-earth-into-reality> (дата обращения: 10.06.2024).

<sup>26</sup> Clery D. Fusion startup plans reactor with small but powerful superconducting magnets. Commonwealth Fusion Systems announces site for compact reactor. Режим доступа: <https://www.science.org/content/article/fusion-startup-plans-reactor-small-powerful-superconducting-magnets> (дата обращения: 10.06.2024).

<sup>27</sup> Wesoff E. This tiny fusion reactor is made out of commercially available parts Nuclear Startup Avalanche Energy has modest funding, a skeleton crew, a pocket-sized prototype — and grand ambitions. Режим доступа: <https://www.canarymedia.com/articles/nuclear/this-tiny-fusion-reactor-is-made-out-of-commercially-available-parts> (дата обращения: 12.06.2024).



технологический институт (Tokyo Tech) и EX-Fusion Inc. (EX-Fusion) создали совместный исследовательский кластер, занимающийся разработкой жидкометаллических устройств (liquid metal devices) для реализации коммерческих термоядерных реакторов на лазерах, а сотрудничество компаний Sumitomo Corporation и Tokamak Energy позволит утвердиться в качестве лидера мирового рынка в области финансирования, строительства и эксплуатации термоядерных электростанций, а кроме того, – ускорить коммерциализацию и промышленное производство своих сферических токамаков в конце 2030-х гг.<sup>28</sup>

### Заключение

Освоение термоядерной энергии в промышленных масштабах зависит от решения многих вопросов, которые лежат в плоскости фундаментальных исследований, создания передовой экспериментальной базы, новых материалов и технологий. Крайне важно также сохранять кооперацию ученых тех стран, которые имеют собственные научные программы в области термоядерного синтеза. Определенным недостатком сложившейся системы исследований в области термоядерного синтеза, в силу значительного привлечения к ним государственных средств, надо признать линейную модель инноваций, в которой коммерческие аспекты не учитываются до более поздних стадий разработки.

Это стало основной причиной, по которой многие инициативы частного сектора в форме стартапов авансируют сейчас очень сжатые сроки в освоении термоядерной энергии, основываясь прежде всего на новых методах технологического планирования, когда технологии разрабатываются гибко и итеративно для достижения явной коммерческой цели [22]. Дальнейшие темпы развития будут в значительной степени зависеть от того, как быстро будет накоплена та критическая масса знаний и технологий, которые развитая индустрия могла бы тиражировать в промышленных масштабах. Эта критическая масса знаний и технологий может создаваться как в рамках программ международного сотрудничества (ITER), так и в рамках отдельных национальных программ (китайские токамак EAST и «HH70», немецкий стелларатор W7-X, американский Ignition Facility) или научных стартапов, подобно тем, которые на сферическом токамаке ST40 получили хорошие результаты. В случае последних двух видов программ мы являемся свидетелями существенной компрессии во времени, в течение которого получают новые фундаментальные знания. Именно эта компрессия во времени может значительно ускорить появление первых термоядерных станций. Как показало развитие солнечной и ветряной энергетики, которые получили высокие темпы развития в период активного инвестирования со стороны частного сектора, именно вовлеченность бизнеса существенно ускоряет темпы создания новых технологий генерации энергии.

Единственный фактор, который может затормозить развитие новой энергетики, – это политика научного изоляционизма, которая становится европейской практикой<sup>29</sup>. К счастью, это не относится к проекту ITER, где активное международное сотрудничество не прекращается. Тем не менее, Российская академия наук и многопрофильный холдинг «РОСАТОМ» должны активно развивать национальную термоядерную программу. Очевидно, что создание достойных условий, в том числе хорошая экспериментальная база, будет только отвечать национальным интересам России.

<sup>28</sup> White S. Tokamak Energy and Sumitomo Corporation sign collaboration agreement to accelerate industrialisation of fusion energy. Режим доступа: <https://tokamakenergy.com/2023/07/27/tokamak-energy-and-sumitomo-corporation-sign-collaboration-agreement-to-accelerate-industrialisation-of-fusion-energy/> (дата обращения: 10.06.2024); Japan drives laser fusion energy closer to commercialization. Tokyo Tech and Ex-Fusion establish R&D cluster to develop laser fusion reactors. Режим доступа: <https://www.titech.ac.jp/english/news/2023/067617> (дата обращения: 10.06.2024).

<sup>29</sup> В марте 2024 г. ЦЕРН объявил о расторжении контрактов с 500 российскими учёными, что принесёт вред самим программам ядерных исследований. Режим доступа: <https://www.vedomosti.ru/society/articles/2024/03/20/1026718-tsern-prekratit-sotrudnichestvo-s-rossiiskimi-uchenimi> (дата обращения: 30.05.2024).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Devezas T., Ruão H., Gonçalves J., Bento B., Liana H.** How green is the green energy transition? On the road to decarbonization // Devezas T., Leitro J. C. C., Yegorov Y., Chistilin D. (Eds.) Global challenges of climate change (Chapter). Book Series “World-Systems Evolution and Global Futures”. Vol. 1. Cham, Switzerland: Springer, 2022. Pp. 9–28.
2. IAEA (2023). World fusion outlook 2023. Режим доступа: [https://www-pub.iaea.org/MTCD/Publications/PDF/FusionOutlook2023\\_web.pdf](https://www-pub.iaea.org/MTCD/Publications/PDF/FusionOutlook2023_web.pdf) (Дата обращения: 24.05.2024).
3. **Pitron G.** The rare metals war: The dark side of clean energy and digital technologies. London: Scribe UK Publications, 2020. 288 p.
4. **Post R.** Controlled fusion research – an application of physics of high temperature plasmas // Reviews of Modern Physics. 1956. Vol. 28. No. 3. Pp. 338–362.
5. Critical materials factsheet, Center for Sustainable Systems, University of Michigan. Режим доступа: <https://css.umich.edu/publications/factsheets/material-resources/critical-materials-factsheet> (Дата обращения: 25.05.2024).
6. **Арцимович Л. А.** Избранные труды. Атомная физика и физика плазмы. М.: Наука, 1978. 302 с.
7. IEA (2021). Global hydrogen review 2021. Режим доступа: <https://www.iea.org/reports/global-hydrogen-review-2021> (Дата обращения: 26.05.2024).
8. Nuclear power development: History and outlook. IAEA Bulletin No. 3. Режим доступа: <https://www.iaea.org/publications/magazines/bulletin/29-3/nuclear-power-development-history-and-outlook> (Дата обращения: 24.05.2024).
9. Атомные станции малой мощности: новое направление развития энергетики. Т. 2. Под ред. акад. РАН Саркисова А. А. М.: Академ-Принт, 2015. 387 с.
10. **Boldon L. M., Sabharwall P.** Small modular reactor: First-of-a-Kind (FOAK) and Nth-of-a-Kind (NOAK) economic analysis. Режим доступа: <https://inldigitallibrary.inl.gov/sites/sti/sti/6293982.pdf> (Дата обращения: 24.05.2024).
11. IEA (2020). Projected costs of generating electricity. Режим доступа: [https://www.oecd-nea.org/upload/docs/application/pdf/2020-12/egc-2020\\_2020-12-09\\_18-26-46\\_781.pdf](https://www.oecd-nea.org/upload/docs/application/pdf/2020-12/egc-2020_2020-12-09_18-26-46_781.pdf) (Дата обращения: 26.05.2024).
12. Fusion energy: Potentially transformative technology still faces fundamental challenges. Режим доступа: <https://www.gao.gov/products/gao-23-105813> (Дата обращения: 25.05.2024).
13. **Maisonnier D.** A conceptual study of commercial fusion power plants. Final report of the European fusion Power Plant Conceptual Study (PPCS). Режим доступа: [https://www.academia.edu/98314122/A\\_conceptual\\_study](https://www.academia.edu/98314122/A_conceptual_study) (Дата обращения: 24.05.2024).
14. **Maisonnier D., Campbell D., Cook I., et al.** Fusion power plant studies in Europe // Nuclear Fusion. 2007. Vol. 47. No. 11. Pp. 1524–1532.
15. **Takeda S., Keeley A. R., Managi S.** How many years away is fusion energy? A review // Journal of Fusion Energy. 2023. Vol. 42. No. 1. P. 16.
16. **Bustreo C., Casini G., Zollino G., Bolzonella T., Piovon R.** FRESCO, a simplified code for cost analysis of fusion power plants // Fusion Engineering and Design. 2013. Vol. 88. No. 12. Pp. 3141–3151.
17. **Han W. E., Ward D. J.** Revised assessments of the economics of fusion power // Fusion Engineering and Design. 2009. Vol. 84. No. 2–6. Pp. 895–898.
18. **Cardozo N. J. Lopes.** Economic aspects of the deployment of fusion energy: The valley of death and the innovation cycle // Philosophical Transactions of the Royal Society A. 2019. Vol. 377. No. 2141. P. 20170444.
19. **Margraf R.** A brief history of U.S. funding of fusion energy. Stanford University. Режим доступа: <http://large.stanford.edu/courses/2021/ph241/margraf1/> (Дата обращения: 24.05.2024).
20. **Gilinsky V.** What’s fueling the commercial fusion hype? Bulletin of the Atomic Scientists. Режим доступа: <https://thebulletin.org/2024/02/whats-fueling-the-commercial-fusion-hype/> (Дата обращения: 25.05.2024).
21. **McNamara S. A. M., Asunta O., Bland J., et al.** Achievement of ion temperatures in excess of 100 million degrees Kelvin in the compact high-field spherical tokamak ST40 // Nuclear Fusion. 2023. Vol. 63. No. 5. P. 054002.

22. **Pearson R. J., Costley A. E., Phaal R., Nuttall W. J.** Technology Roadmapping for mission-led agile hardware development: a case study of a commercial fusion energy start-up // *Technological Forecasting and Social Change*. 2020. Vol. 158. September. P. 120064.

23. **Арцимович Л. А.** Управляемые термоядерные реакции. М.: Физматгиз, 1961. 468 с.

24. **Арцимович Л. А.** Исследования по управляемым термоядерным реакциям в СССР // *Ядерная физика. Под общ. ред. акад. А. И. Алиханова и др. Труды Второй Международной конференции по мирному использованию атомной энергии. Женева, 1958. В 16 тт. Доклады советских ученых. Т. 1.* М.: Изд-во Главатома при Совете Министров СССР, 1959. С. 5–30.

25. Critical materials for energy transition IRENA. Режим доступа: [https://www.irena.org/-/media/Files/IRENA/Agency/Technical-Papers/IRENA\\_Critical\\_Materials\\_2021.pdf](https://www.irena.org/-/media/Files/IRENA/Agency/Technical-Papers/IRENA_Critical_Materials_2021.pdf) (Дата обращения: 25.05.2024).

26. IEA (2022). The role of critical minerals in clean energy transitions. Режим доступа: <https://www.iea.org/reports/the-role-of-critical-minerals-in-clean-energy-transitions> (дата обращения: 24.05.2024).

## REFERENCES

1. **Devezas T., Ruão H., Gonçalves J., et al.**, How green is the green energy transition? On the road to decarbonization, In book: *Devezas T., Leitro J. C. C., Yegorov Y., Chistilin D. (Eds.) Global challenges of climate change (Ch.)*. Book Ser. “World-Systems Evolution and Global Futures”, Vol. 1. Cham, Switzerland: Springer (2022) 9–28.

2. IAEA (2023). World Fusion Outlook 2023. Access: [https://www-pub.iaea.org/MTCD/Publications/PDF/FusionOutlook2023\\_web.pdf](https://www-pub.iaea.org/MTCD/Publications/PDF/FusionOutlook2023_web.pdf) (Access date: 24.05.2024).

3. **Pitron G.**, The rare metals war: The dark side of clean energy and digital technologies, Scribe UK Publications, London, 2020.

4. **Post R.**, Controlled fusion research – an application of physics of high temperature plasmas, *Rev. Mod. Phys.* 28 (3) (1956) 338–362.

5. Critical Materials Factsheet, Center for Sustainable Systems, University of Michigan. Access: <https://css.umich.edu/publications/factsheets/material-resources/critical-materials-factsheet> (Access date: 25.05.2024).

6. **Artsimovich L. A.**, *Izbrannyye trudy. Atomnaya fizika i fizika plazmy [Selected works. Atomic physics and plasma physics]*, Nauka Publishing, Moscow, 1978 (in Russian).

7. IEA (2021). Global Hydrogen Review 2021. Access: <https://www.iea.org/reports/global-hydrogen-review-2021> (Access date: 26.05.2024).

8. Nuclear power development: History and outlook. IAEA Bulletin No. 3. Access: <https://www.iaea.org/publications/magazines/bulletin/29-3/nuclear-power-development-history-and-outlook> (Access date: 24.05.2024).

9. **Sarkisov A. A.** (Ed.), *Atomnyye stantsii maloy moshchnosti: novoye napravleniye razvitiya energetiki: T. 2 [Low-power nuclear power plants – a new line in the development of power systems. Vol. 2]*, Akadem-Print Publ., Moscow, 2015 (in Russian).

10. **Boldon L. M., Sabharwal P.**, Small modular reactor: First-of-a-Kind (FOAK) and Nth-of-a-Kind (NOAK) economic analysis. Access: <https://inldigitallibrary.inl.gov/sites/sti/sti/6293982.pdf> (Access date: 24.05.2024).

11. IEA (2020). Projected costs of generating electricity. Access: [https://www.oecd-neo.org/upload/docs/application/pdf/2020-12/egc-2020\\_2020-12-09\\_18-26-46\\_781.pdf](https://www.oecd-neo.org/upload/docs/application/pdf/2020-12/egc-2020_2020-12-09_18-26-46_781.pdf) (Access date: 26.05.2024).

12. Fusion energy: Potentially transformative technology still faces fundamental challenges. Access: <https://www.gao.gov/products/gao-23-105813> (Access date: 25.05.2024).

13. **Maisonnier D.**, A conceptual study of commercial fusion power plants. Final report of the European fusion Power Plant Conceptual Study (PPCS). Access: [https://www.academia.edu/98314122/A\\_conceptual\\_study\\_of\\_commercial\\_fusion\\_power\\_plants\\_Final\\_report\\_of\\_the\\_European\\_Fusion\\_Power\\_Plant\\_Conceptual\\_Study\\_PPCS](https://www.academia.edu/98314122/A_conceptual_study_of_commercial_fusion_power_plants_Final_report_of_the_European_Fusion_Power_Plant_Conceptual_Study_PPCS) (Access date: 24.05.2024).

14. **Maisonnier D., Campbell D., Cook I., et al.**, Fusion power plant studies in Europe, *Nucl. Fusion*. 47 (11) (2007) 1524–1532.

15. **Takeda S., Keeley A. R., Managi S.**, How many years away is fusion energy? A review, *J. Fusion Energy*. 42 (1) (2023) 16.

16. **Bustreo C., Casini G., Zollino G., et al.**, FRESCO, a simplified code for cost analysis of fusion power plants, *Fusion Eng. Des.* 88 (12) (2013) 3141–3151.
17. **Han W. E., Ward D. J.**, Revised assessments of the economics of fusion power, *Fusion Eng. Des.* 84 (2–6) (2009) 895–898.
18. **Cardozo N. J. Lopes**, Economic aspects of the deployment of fusion energy: The valley of death and the innovation cycle, *Phil. Trans. R. Soc. A.* 377 (2141) (2019) 20170444.
19. **Margraf R.**, A brief history of U.S. funding of fusion energy. Stanford University. Access: <http://large.stanford.edu/courses/2021/ph241/margraf1/> (Access date: 24.05.2024).
20. **Gilinsky V.**, What's fueling the commercial fusion hype? *Bulletin of the Atomic Scientists*. Access: <https://thebulletin.org/2024/02/whats-fueling-the-commercial-fusion-hype/> (Access date: 25.05.2024).
21. **McNamara S. A. M., Asunta O., Bland J., et al.**, Achievement of ion temperatures in excess of 100 million degrees Kelvin in the compact high-field spherical tokamak ST40, *Nucl. Fusion.* 63 (5) (2023) 054002.
22. **Pearson R. J., Costley A. E., Phaal R., Nuttall W. J.**, Technology Roadmapping for mission-led agile hardware development: a case study of a commercial fusion energy start-up, *Technol. Forecast. Soc.* 158 (Sept) (2020) 120064.
23. **Artsimovich L. A.**, *Upravlyayemye termoyadernye reaktsii [Controlled thermonuclear reactions]*, Fismatgis Publ., Moscow, 1961 (in Russian).
24. **Artsimovich L. A.**, *Issledovaniya po upravlyayemyim termoyadernym reaktsiyam v SSSR [Research on controlled thermonuclear reactions in the USSR]*, In book: Alikhanov A. I. (Ed.) *Nuclear Physics. Proc. 2-nd Int. Conf. on Peaceful Uses of Atomic Energy*, Geneva, 1958. In 16 Vols., *Reports of Soviet Scientists*, Vol. 1; Published by the Main Directorate for the Use of Atomic Energy under the Council of Ministers of the USSR, Moscow (1959) 5–30 (in Russian).
25. *Critical Materials for Energy Transition IRENA*. Access: [https://www.irena.org/-/media/Files/IRENA/Agency/Technical-Papers/IRENA\\_Critical\\_Materials\\_2021.pdf](https://www.irena.org/-/media/Files/IRENA/Agency/Technical-Papers/IRENA_Critical_Materials_2021.pdf) (Access date: 25.05.2024).
26. IEA (2022). *The role of critical minerals in clean energy transitions* Access: <https://www.iea.org/reports/the-role-of-critical-minerals-in-clean-energy-transitions> (Access date: 24.05.2024).

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**КОРАБЛЕВ Вадим Васильевич** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры ЮНЕСКО «Управление качеством образования в интересах устойчивого развития», советник при ректорате Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
korablev@spbstu.ru  
ORCID: 0000-0002-4363-9352

**РОЖАНСКИЙ Владимир Александрович** – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы фундаментальных физических исследований, заведующий научной лабораторией «Теория и моделирование плазмы токамаков» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
rozhansky@mail.ru  
ORCID: 0000-0003-0723-622X

**САРЫГУЛОВ Аскар Исламович** – доктор экономических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории «Междисциплинарные исследования и образование по технологическим и экономическим проблемам энергетического перехода» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
dept.cfr@unecon.ru  
ORCID: 0000-0002-8165-0122

## THE AUTHORS

**KORABLEV Vadim V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
korablev@spbstu.ru  
ORCID: 0000-0002-4363-9352

**ROZHANSKY Vladimir A.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
rozhansky@mail.ru  
ORCID: 0000-0003-0723-622X

**SARYGULOV Askar I.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
dept.cfr@unecon.ru  
ORCID: 0000-0002-8165-0122

*Статья поступила в редакцию 17.06.2024. Одобрена после рецензирования 02.07.2024.  
Принята 03.07.2024.  
Received 17.06.2024. Approved after reviewing 02.07.2024. Accepted 03.07.2024.*

Научная статья  
УДК 539.231, 539.261  
DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17407>

## ФОРМИРОВАНИЕ РАЗБАВЛЕННЫХ НИТРИДНЫХ НИТЕВИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$ ПО ТИПУ ЯДРО-ОБОЛОЧКА НА КРЕМНИИ

А. К. Кавеев<sup>1,2</sup> , В. В. Федоров<sup>2,3</sup>, Д. В. Минив<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия;

<sup>2</sup> Академический университет им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия;

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

 [kaveev@mail.ioffe.ru](mailto:kaveev@mail.ioffe.ru)

**Аннотация.** Впервые синтезированы эпитаксиальные массивы нитевидных нанокристаллов (ННК)  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  на Si (111) по типу ядро-оболочка. Продемонстрирован рост ННК с кристаллической структурой типа вюрцита по самоиндуцированному механизму с использованием молекулярно-лучевой эпитаксии с плазменной активацией азота. Методами просвечивающей электронной микроскопии и рентгеновского дифракционного анализа обнаружено уменьшение объема кристаллической решетки вюрцита при повышении содержания азота.

**Ключевые слова:**  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$ , нитевидный нанокристалл, рентгеновский дифракционный анализ, самоиндуцированный механизм роста

**Для цитирования:** Кавеев А. К., Федоров В. В., Минив Д. В. Формирование разбавленных нитридных нитевидных нанокристаллов  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  по типу ядро-оболочка на кремнии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. Т. 17. № 4. С. 88–97. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17407>

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.17407>

## FORMATION OF DILUTED NITRIDE $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$ CORE-SHELL NANOWIRES ON SILICON

A. K. Kaveev<sup>1,2</sup> , V. V. Fedorov<sup>2,3</sup>, D. V. Miniv<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Ioffe Institute of RAS, St. Petersburg, Russia;

<sup>2</sup> Alferov University of RAS, St. Petersburg, Russia;

<sup>3</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

 [kaveev@mail.ioffe.ru](mailto:kaveev@mail.ioffe.ru)

**Abstract.** Epitaxial arrays of the  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  core-shell nanowires have been synthesized on Si (111) for the first time. The growth of the nanowires with a wurtzite-type crystal structure was demonstrated by a self-induced mechanism using the molecular beam epitaxy with plasma-assisted nitrogen activation. Using the transmission electron microscopy and X-ray diffraction analysis, a volume decrease in the wurtzite crystal unit cell with increasing nitrogen content was revealed.

**Keywords:**  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$ , nanowire, X-ray diffraction analysis, self-induced growth mechanism



**For citation:** Kaveev A. K., Fedorov V. V., Miniv D. V., Formation of diluted nitride  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  core-shell nanowires on silicon, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 88–97. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17407>

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

## Введение

Узкозонные полупроводниковые нитевидные нанокристаллы (ННК) на основе  $\text{InAs}$  представляют собой перспективный материал для широкого применения в области инфракрасной оптоэлектроники и фотоники, для создания фотодетекторов и светодиодов [1, 2]. Существенная величина геометрического вклада поверхности по отношению к объему ННК приводит к релаксации упругих напряжений, вызванных несоответствием параметров решетки, что позволяет формировать аксиальные и радиальные гетероструктуры на основе ННК полупроводниковых материалов с существенным решеточным несогласованием [3]. Этот факт также позволяет осуществлять рост ННК на решеточно-рассогласованной подложке кремния [4] и обеспечивать эпитаксиальную стабилизацию метастабильных структурных фаз [5].

По сравнению с планарными аналогами, инфракрасные (ИК) детекторы на основе ННК  $\text{InAs}$  имеют спектральную чувствительность, смещенную в сторону более высоких энергий, что ограничивает их применимость [6]. Это смещение объясняется метастабильной кристаллической структурой типа вюрцита в самоиндуцированных ННК  $\text{InAs}$ . Эта структурная фаза имеет большую ширину запрещенной зоны (477 мэВ), по сравнению со структурой цинковой обманки (415 мэВ), стабильной в объемных кристаллах  $\text{InAs}$  [7]. Увеличение спектральной чувствительности в длинноволновой области (5,7 мкм при температуре 5 К) было достигнуто для фотодетекторов на основе ННК  $\text{InAsSb}$  [8]. Однако внедрение тяжелых атомов  $\text{Sb}$  в решетку  $\text{InAs}$  требует существенного снижения температуры роста и может привести к формированию резонансных каналов Оже-рекомбинации из-за увеличения спин-орбитального расщепления в валентной зоне [9].

Альтернативой для расширения диапазона фотоотклика фотодетекторов на основе ННК  $\text{InAs}$  является переход к разбавленным нитридным твердым растворам  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  [10]. Из работы [11] известно, что добавление азота в планарные слои  $\text{InAs}$  позволяет рассчитывать на уменьшение ширины запрещенной зоны  $E_g$  примерно на 80 мэВ/% (в зависимости от процентного содержания азота). Однако стабилизация твердого раствора  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  затруднена из-за фазовой сегрегации и конкуренции при внедрении атомов  $\text{V}$  группы [12]. Эпитаксиальная стабилизация  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  продемонстрирована на планарных гетероструктурах.

Разбавленные нитридные материалы, такие как  $\text{GaAsN}$ ,  $\text{GaPN}$ ,  $\text{GaAsPN}$  и  $\text{InGaNAs}$ , можно стабилизировать в форме ННК с помощью механизмов самокаталитического роста или роста пар-жидкость-кристалл с помощью золота в качестве катализатора с использованием плазменно-ассистированной молекулярно-лучевой эпитаксии (ПА-МЛЭ) [13]. Но несмотря на то, что полученные с помощью  $\text{Au}$ -катализатора ННК  $\text{InAs}$  имеют высокое кристаллическое качество вюрцитной фазы, самоиндуцированное образование ННК является предпочтительным, так как инородные атомы золота могут внедряться в растущий материал и действовать как центры безызлучательной рекомбинации, ограничивая тем самым производительность устройств [14].

Цель данного исследования – выяснить возможность формирования гетероструктуры ННК  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x/\text{InAs}$  по типу ядро-оболочка в радиальной геометрии.

## Методика эксперимента

Выращивание ННК  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  осуществлялось методом плазменно-ассистированной молекулярно-лучевой эпитаксии (ПА-МЛЭ), с использованием системы Veeco GEN III. Система была оборудована эффузионной ячейкой индия и крекерным источником мышьяка. Активация потока азота производилась с помощью источника индуктивно-связанной плазмы Riber VRF-N 600 RF. Источник азота работал при расходе

газа  $0,9 \text{ см}^3/\text{мин}$  и высокочастотной мощности  $350 \text{ Вт}$ . Контроль зарождения и мониторинг роста ННК проводился *in situ* с использованием метода дифракции быстрых электронов на отражение.

В качестве подложек для выращивания использовались трехдюймовые кремниевые пластины с высоким удельным сопротивлением (более  $1000 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ ). Перед выращиванием ННК подложки кремния были очищены с использованием модифицированной процедуры травления Шираки с последующим формированием тонкого (около  $1 \text{ нм}$ ) поверхностного слоя оксида кремния путем влажного химического окисления в кипящем аммиачно-перекисном растворе (соотношение компонентов  $\text{NH}_4\text{OH} : \text{H}_2\text{O}_2 : \text{H}_2\text{O}$  составляло  $1 : 1 : 3$ ) [15].

С целью облегчения зародышеобразования ННК, подложки кремния подвергались термическому отжигу в условиях сверхвысокого вакуума в течение  $30 \text{ мин}$  при температуре  $780 \text{ }^\circ\text{C}$ ; это приводило к образованию точечных дефектов в слое поверхностного оксида кремния, которые выступали в роли центров зарождения ННК на открытой поверхности кремния малой площади. При таких условиях нивелировался фактор рассогласования по постоянным решетки соединений  $\text{As}_3\text{V}_5$  и кремния [16, 17].

Отношение потоков мышьяка и индия определяли путем измерения эквивалентного давления пучка  $\text{As}_4/\text{In}$ , для этого использовался ионизационный датчик Баярда – Альперта. Давление потока поддерживалось на уровне  $8 \cdot 10^{-8} \text{ Торр}$ , что соответствует скорости роста планарного слоя  $150 \text{ нм/ч}$ . Стабильный самоиндуцированный рост ННК InAs был достигнут при соотношении потоков  $\text{As}_4/\text{In}$ , равном  $90$ , и температуре подложки  $460 \text{ }^\circ\text{C}$ .

Морфология синтезированных массивов ННК изучалась методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с помощью системы Zeiss SUPRA 25. Исследование кристаллической структуры и однородности ННК проводилось методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Структурные исследования также проводились методом рентгеновского дифракционного анализа (РДА) на монокристалльном четырехкружном дифрактометре Bruker Каппа Apex II, оснащенный микрофокусным источником рентгеновского излучения Incoatec I $\mu$ S 1.0  $\text{CuK}_\alpha$  ( $\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$ ).

В итоге кристаллическая структура ННК была охарактеризована путем анализа трехмерной сборки карты обратного пространства, полученной с помощью РДА. Сборка выполнялась путем измерения последовательности  $\omega$ -сканов (в диапазоне  $\pm 5^\circ$ ) с азимутальным угловым шагом  $0,1^\circ$  в области брэгговских рефлексов, соответствующих вюрцитной фазе арсенида индия. Карты в окрестности асимметричных брэгговских рефлексов были получены в некомпланарной геометрии. Были проанализированы двумерные сечения полученных сканов, соответствующие зонам Лауэ  $\langle \bar{1}1\bar{2}0 \rangle$  и  $\langle 1\bar{1}00 \rangle$  нулевого порядка для структуры вюрцита для ННК InAs. Кристаллографические данные об этой структуре были взяты из работы [18].

Результаты измерений РДА позволили выявить эпитаксиальные соотношения выращенных массивов ННК: направление роста ННК  $[0001]$  ориентировано вдоль направления  $[111] \text{ Si}$ , в то время как в плоскости подложки направление  $[\bar{1}1\bar{2}0]$  решетки вюрцита InAs ориентировано вдоль  $[1\bar{1}0]$  решетки Si.

### Экспериментальные результаты и их обсуждение

Формирование ННК  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  происходило путем роста гетероструктуры ННК по типу ядро-оболочка: т. е. оболочка  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  выращивалась на затравочном ННК (ядре) InAs при пониженной температуре роста  $- 400 \text{ }^\circ\text{C}$ . Продолжительность роста оболочки  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  была равна времени роста ядра InAs. Также для сравнения исследовался эталонный образец, состоящий только из ННК InAs.

На рис. 1 приведены результаты измерений методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Анализ морфологии ННК InAs и  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x/\text{InAs}$  показал, что при низкотемпературном росте оболочки ННК ( $400 \text{ }^\circ\text{C}$ ) скорость аксиального роста понижалась, а скорость радиального роста значительно возрастала. Снижение температуры роста приводит к уменьшению длины свободного пробега адатомов, а также к повышению эффективности их внедрения, что приводит к снижению потока атомов, достигающих верхней грани ННК. В результате рост происходит более равномерно как в аксиальном, так и в радиальном направлениях.

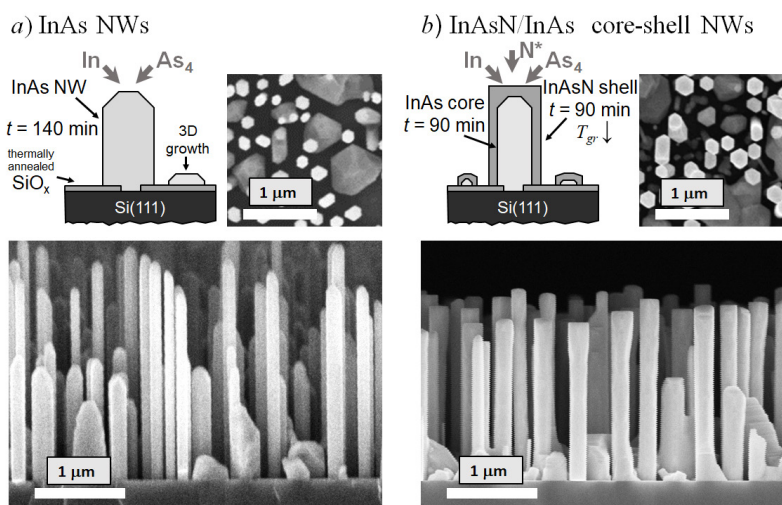


Рис. 1. СЭМ-изображения образцов ННК (NWs) в профильной (нижний ряд) и горизонтальной (верхний ряд) проекциях, соответственно: *a* – InAs, *b* – ННК  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$ .

На верхних вставках: технологические схемы выращивания ННК;

$\text{N}^*$  – активная форма азота, вырабатываемая источником ВЧ-плазмы;  $T_{gr\downarrow}$  – понижение температуры роста оболочки до  $400^\circ\text{C}$

Сравнение морфологии ННК InAs и  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x/\text{InAs}$  также позволяет оценить среднюю толщину оболочки  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$ , равную 28 нм. ННК InAs имеют конический верх, тогда как большинство гетероструктур ННК ядро-оболочка имеют плоскую верхнюю грань. Средняя высота и диаметр ННК  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x/\text{InAs}$  составляли  $2,3 \pm 0,3$  мкм и  $175 \pm 35$  нм соответственно, а для ННК InAs –  $1,9 \pm 0,4$  мкм и  $120 \pm 40$  нм. Подход к росту ННК  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  с формированием гетероструктур по типу ядро-оболочка позволяет синтезировать ННК относительно большой высоты. На СЭМ-изображениях (см. рис. 1, вид сверху) видно, что рост ННК сопровождается формированием нежелательных паразитных трехмерных островков. Этот рост происходит как при выращивании ННК InAs, так и при выращивании ННК  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x/\text{InAs}$ . Однако скорость зарождения этих островков различна.

Установлено, что присутствие потока активного азота стимулирует зародышеобразование непосредственно на поверхностном оксидном слое кремния. Этот эффект можно объяснить увеличением вероятности зарождения  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  в присутствии активной формы азота [19]. Концентрация азота оценивалась методом вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС). Приблизительное содержание азота составляло 0,5 ат. %.

Как сообщалось в работе [20], самоиндуцированные ННК InAs обладают высокой плотностью дефектов упаковки вдоль направления роста (0001). Исследование отдельных ННК с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) высокого разрешения показало, что включение потока азота не оказывает существенного влияния на плотность или тип наблюдаемых дефектов.

На рис. 2, *a* представлено типичное ПЭМ-изображение микроструктуры оболочки  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$ . На рис. 2, *b* показано

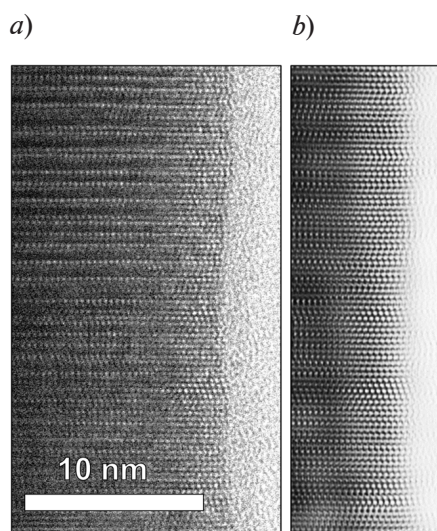


Рис. 2. ПЭМ-изображения оболочки ННК  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$ : *a* – типичное, наблюдаемое в направлении  $\langle 1\bar{1}20 \rangle$ ; *b* – фрагмент изображения на рис. 2, *a* в аналогичном масштабе, с использованием быстрой фильтрации Фурье

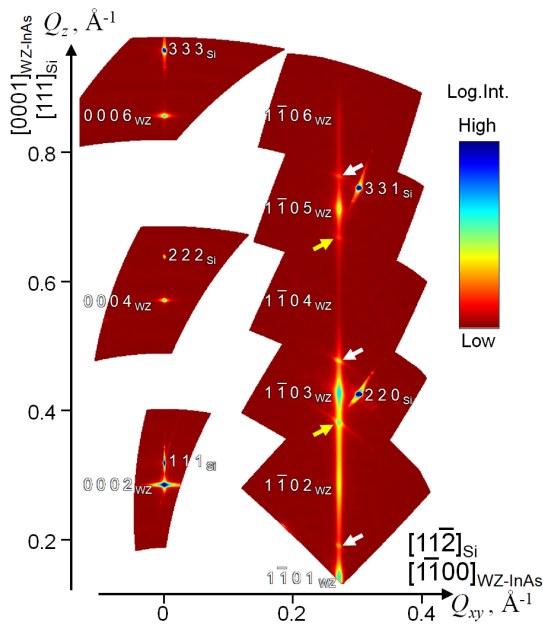


Рис. 3. 2D-сечение трехмерной сборки обратного пространства, показывающее фрагмент зоны Лауэ  $\langle 1\bar{1}20 \rangle$  нулевого порядка для НК InAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> (сборка получена методом РДА). Стрелками указаны брэгговские рефлексы (БР), соответствующие сфалеритовой фазе InAs и ее двойнику. Модельные позиции БР отмечены кружками

в отличие от эпитаксиально-ориентированной вюрцитовой фазы. Следует отметить, что при темнопольных измерениях ПЭМ и измерениях ПЭМ с высоким разрешением, областей со сфалеритовой структурой в НК не наблюдалось. Следовательно, наблюдаемые рефлексы от сфалеритовой фазы можно отнести к трехмерным паразитным островкам на поверхности оксида кремния.

Для сравнения были проведены измерения островкового слоя, не содержащего НК и выращенного на поверхности бездефектного оксида кремния. В данном слое при РДА-измерениях не было выявлено вюрцитовой фазы. Сравнение профилей интенсивности рентгеновского излучения в рефлексах типа  $\{1\bar{1}01\}$  для образцов НК InAs и InAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>/InAs показало, что добавление потока активного азота не приводит к

контрастное изображение (путем быстрой фильтрации Фурье) в увеличенном масштабе, демонстрирующее наличие собственных дефектов, которые проявляются в виде включений бислоев вюрцитовой укладки [21, 22].

Для получения комплексной информации о кристаллической структуре исследованных НК были проведены измерения методом РДА.

На рис. 3 показан фрагмент карты обратного пространства для зоны Лауэ нулевого порядка по направлению  $\langle 1\bar{1}20 \rangle$ , полученный для НК InAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>. Малый объем областей когерентного рассеяния приводит к превращению брэгговских рефлексов, связанных с кристаллографическими плоскостями  $\{1\bar{1}01\}$  и  $\{2\bar{2}01\}$ , в размытые тяжи в направлении, перпендикулярном плоскости дефекта упаковки [23]. Дифракционные рефлексы, относящиеся к двойникам сфалеритовой фазы (см. рис. 3), отмечены желтыми и серыми стрелками. По сравнению с диффузным рассеянием от дефектов упаковки вюрцитовой фазы, дифракция, связанная со сфалеритовой фазой, имеет вид кольца. Эти наблюдения позволяют предположить, что материал, находящийся в сфалеритовой фазе, хуже ориентирован

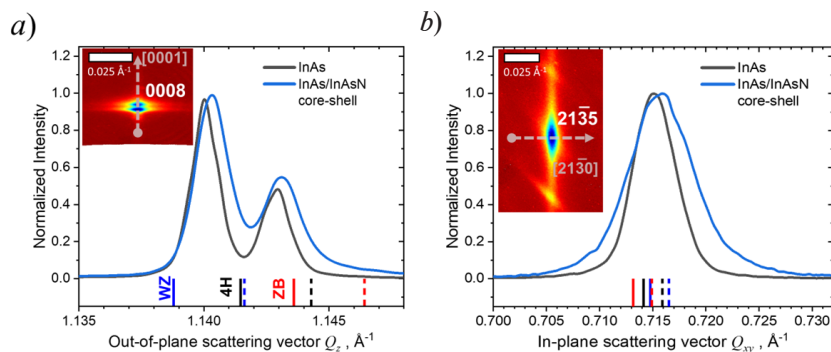


Рис. 4. Нормализованные профили интенсивности рентгеновского излучения в направлениях плоскости роста НК (a) и вне этой плоскости (b) для брэгговских рефлексов (0008) и (2135) InAs и InAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>/InAs/ядро-оболочка.

На вставках: соответствующие двумерные сечения сборки обратного пространства



изменениям относительной ширины брэгговских рефлексов для вюрцитовой фазы InAs. Также установлено наличие в ННК по типу ядро-оболочка лишь одного набора брэгговских рефлексов, специфических для вюрцита. Этот экспериментальный факт указывает на рост псевдоморфной оболочки в изучаемом объекте.

Чтобы проанализировать влияние потока активного азота на межплоскостные расстояния в выращенных массивах ННК, были измерены профили интенсивности рефлексов вдоль направлений  $[0001]$  и  $[21\bar{3}0]$ , проходящих через высокоиндексные рефлексы  $(0008)$  и  $(21\bar{3}5)$ . На рис. 4 показаны полученные профили для массивов ННК InAs и  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x/\text{InAs}$ . Вертикальные метки соответствуют ожидаемому положению максимумов интенсивности для структуры InAs типа вюрцита, политипа 4Н и структуры типа сфалерита. Переход между фазами от вюрцита к сфалериту сопровождается одновременным уменьшением межатомных расстояний в плоскости роста и увеличением межатомных расстояний вне плоскости [16]. Однако в нашем случае массивы ННК  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x/\text{InAs}$  по типу ядро-оболочка демонстрируют одновременное уменьшение этих расстояний, что говорит об уменьшении объема элементарной ячейки. Скорее всего, это связано с внедрением азота в выращенные ННК. Постоянные решетки ННК InAs и  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x/\text{InAs}$  оценивались путем аппроксимации положения серии рентгеновских брэгговских рефлексов для двух взаимно ортогональных зон Лауэ нулевого порядка.

Полученные значения параметров решетки для ННК чистого InAs составили

$$a = b = 4,277 \pm 0,002 \text{ \AA}, c = 7,017 \pm 0,002 \text{ \AA},$$

в то время как значения этих параметров для ННК ядро-оболочка  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x/\text{InAs}$  составили

$$a = b = 4,274 \pm 0,002 \text{ \AA}, c = 7,015 \pm 0,002 \text{ \AA}.$$

Таким образом, изменение параметров решетки составило  $\Delta a/a \approx -0,07\%$  и  $\Delta c/c \approx -0,03\%$ . Следует отметить, что при низкой концентрации азота в твердых растворах  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  значение параметра решетки может отклоняться от определенного по закону Vegarda [24]. Кроме того, азот может внедряться в решетку либо в виде атома замещения, либо образовывать межузельный дефект [25]. Таким образом, данные РДА подтверждают включение азота в решетку ННК, однако они не дают представления о точной концентрации азота и характере его включения.

### Заключение

В работе установлена возможность эпитаксиальной стабилизации вюрцитовой фазы разбавленного нитрида ННК  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$ , выращенных по самоиндуцированному механизму на кремниевых подложках  $\text{SiO}_x/\text{Si}$  (111), с использованием технологии ПА-МЛЭ. Включение азота подтверждено измерениями методом РДА, показывающими сохранение кристаллической фазы вюрцита в оболочке ННК  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$ . Добавка азота в ННК InAs позволила снизить ширину запрещенной зоны  $E_g$ , начиная от значения 477 мэВ, в меньшую сторону, обеспечивая таким образом сдвиг длинноволновой границы чувствительности фотодетектора на основе ННК. Геометрия ядро-оболочка позволяет регулировать размеры ННК  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x/\text{InAs}$ , что важно для приложений ИК-фотодетектирования. Полученные массивы ННК предлагаются в качестве перспективной материальной платформы для создания фотоприемников и светоизлучающих устройств, работающих в ближнем и среднем ИК-диапазонах. Монолитная интеграция наногетероструктур  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  с кремнием — одним из наиболее распространенных материалов ИК-фотоники и электроники — способна значительно улучшить функциональность современных оптоэлектронных устройств.

### Благодарности

Авторы выражают благодарность коллегам из лаборатории возобновляемых источников энергии Санкт-Петербургского академического университета им. Ж. И. Алфёрова РАН за помощь в проведении экспериментов. Также авторы благодарны С. М. Сутуруину (ФТИ им. А. Ф. Иоффе) за предоставление программного обеспечения RecSpaceQT для анализа данных РДА. Авторы благодарны Б. Я. Беру (ФТИ им. А. Ф. Иоффе) за проведение измерений ВИМС, а также Д. А. Кириленко (ФТИ им. А. Ф. Иоффе) за проведение

измерений методом ПЭМ, которые выполнены с использованием оборудования федерального ЦКП «Материаловедение и диагностика в передовых технологиях».

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sumikura H., Zhang G., Takiguchi M., Takemura N., Shinya A., Gotoh H., Notomi M. Mid-infrared lasing of single wurtzite InAs nanowire // *Nano Letters*. 2019. Vol. 19. No. 11. Pp. 8059–8065.
2. Zhang X., Huang H., Yao X. Ultrasensitive mid-wavelength infrared photodetection based on a single InAs nanowire // *ACS Nano*. 2019. Vol. 13. No. 3. Pp. 3492–3499.
3. Agarwal R. Heterointerfaces in semiconductor nanowires // *Small*. 2008. Vol. 4. No. 11. Pp. 1872–1893.
4. Schmidt W. G. III–V compound semiconductor (001) surfaces // *Applied Physics A*. 2002. Vol. 75. No. 1. Pp. 89–99.
5. Panse C., Kriegner D., Bechstedt F. Polytypism of GaAs, InP, InAs, and InSb: An *ab initio* study // *Physical Review B*. 2011. Vol. 84. No. 7. P. 075217.
6. Li Z., Allen J., Allen M., Tan H. H., Jagadish C., Fu L. Review on III-V semiconductor single nanowire-based room temperature infrared photodetectors // *Materials*. 2020. Vol. 13. No. 6. P. 1400.
7. Pournia S., Linser S., Jnawali G., et al. Exploring the band structure of wurtzite InAs nanowires using photocurrent spectroscopy // *Nano Research*. 2020. Vol. 13. No. 6. Pp. 1586–1591.
8. Xu T., Wang H., Chen X., Luo M., Zhang L., Wang Y., Chen F., Shan C., Yu C. Recent progress on infrared photodetectors based on InAs and InAsSb nanowires // *Nanotechnology*. 2020. Vol. 31. No. 29. P. 294004.
9. Marcadet X., Rakovska A., Prevot I., Glastre G., Vinter B., Berger V. J. MBE growth of room-temperature InAsSb mid-infrared detectors // *Journal of Crystal Growth*. 2001. Vol. 227–228. July. Pp. 609–613.
10. Krier A., de la Mare M., Carrington P. J., Thompson M., Zhuang Q., Patane A., Kudrawiec R. Development of dilute nitride materials for mid-infrared diode lasers // *Semiconductor Science and Technology*. 2012. Vol. 27. No. 9. P. 094009.
11. De la Mare M., Zhuang Q., Krier A., Patanè A., Dhar S. Growth and characterization of InAsN/GaAs dilute nitride semiconductor alloys for the midinfrared spectral range // *Applied Physics Letters*. 2009. Vol. 95. No. 3. P. 031110.
12. Walukiewicz W., Zide J. M. O. Highly mismatched semiconductor alloys: From atoms to devices // *Journal of Applied Physics*. 2020. Vol. 127. No. 1. P. 010401.
13. Prete P., Lovergine N. Dilute nitride III–V nanowires for high efficiency intermediate-band photovoltaic cells: Material requirements, self-assembly methods and properties // *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*. 2020. Vol. 66. No. 4. P. 100510.
14. Tambe M. J., Ren S., Gradecak S. Effects of gold diffusion on n-type doping of GaAs nanowires // *Nano Letters*. 2010. Vol. 10. No. 11. Pp. 4584–4589.
15. Ishizaka A., Shiraki Y. Low temperature surface cleaning of silicon and its application to silicon MBE // *Journal of The Electrochemical Society*. 1986. Vol. 133. No. 4. P. 666.
16. Koblmüller G., Hertenberger S., Vizbaras K., Bichler M., Bao F., Zhang J.-P., Abstreiter G. Self-induced growth of vertical free-standing InAs nanowires on Si(111) by molecular beam epitaxy // *Nanotechnology*. 2010. Vol. 21. No. 36. P. 365602.
17. Matteini F., Tütüncüoğlu G., Potts H., Jabeen F., Fontcuberta-Morrall A. Wetting of Ga on SiO<sub>x</sub> and its impact on GaAs nanowire growth // *Crystal Growth & Design*. 2015. Vol. 15. No. 7. Pp. 3105–3109.
18. Kriegner D., Panse C., Mandl B., et al. Unit cell structure of crystal polytypes in InAs and InSb nanowires // *Nano Letters*. 2011. Vol. 11. No. 4. Pp. 1483–1489.
19. Gruart M., Jacopin G., Daudin B. Role of Ga surface diffusion in the elongation mechanism and optical properties of catalyst-free GaN nanowires grown by molecular beam epitaxy // *Nano Letters*. 2019. Vol. 19. No. 7. Pp. 4250–4256.
20. Fedorov V., Vinnichenko M., Ustimenko R., et al. Non-uniformly strained core–shell InAs/InP nanowires for midinfrared photonic applications // *ACS Applied Nano Materials*. 2023. Vol. 6. No. 7. Pp. 5460–5468.

21. **Marion J. L., Sourribes M., Isakov I., Panfilova M., Liu H., Warburton P.** Mobility enhancement by Sb-mediated minimization of stacking fault density in InAs nanowires grown on silicon // *Nano Letters*. 2014. Vol. 14. No. 3. Pp. 1643–1650.
22. **Wright A. F.** Basal-plane stacking faults and polymorphism in AlN, GaN, and InN // *Journal of Applied Physics*. 1997. Vol. 82. No. 10. Pp. 5259–5261.
23. **Cayron C.** Diffraction artefacts from twins and stacking faults, and the mirage of hexagonal, polytypes or other superstructures // *Scripta Materialia*. 2021. Vol. 194. 15 March. Pp. 113629–113632.
24. **Benaissa H., Zaoui A., Ferhat M.** First principles calculations for dilute InAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> alloys // *Journal of Applied Physics*. 2007. Vol. 102. No. 11. P. 113712.
25. **Zhuang Q. D., Krier A., Stanley C. R.** Strain enhancement during annealing of GaAsN alloys // *Journal of Applied Physics*. 2007. Vol. 101. No. 10. P. 103536.

## REFERENCES

1. **Sumikura H., Zhang G., Takiguchi M., et al.**, Mid-infrared lasing of single wurtzite InAs nanowire, *Nano Lett.* 19 (11) (2019) 8059–8065.
2. **Zhang X., Huang H., Yao X.**, Ultrasensitive mid-wavelength infrared photodetection based on a single InAs nanowire, *ACS Nano*. 13 (3) (2019) 3492–3499.
3. **Agarwal R.**, Heterointerfaces in semiconductor nanowires, *Small*. 4 (11) (2008) 1872–1893.
4. **Schmidt W. G.**, III–V compound semiconductor (001) surfaces, *Appl. Phys. A*. 75 (1) (2002) 89–99.
5. **Panse C., Kriegner D., Bechstedt F.**, Polytypism of GaAs, InP, InAs, and InSb: An *ab initio* study, *Phys. Rev. B*. 84 (7) (2011) 075217.
6. **Li Z., Allen J., Allen M., et al.**, Review on III-V semiconductor single nanowire-based room temperature infrared photodetectors, *Materials*. 13(6) (2020) 1400.
7. **Pournia S., Linser S., Jnawali G., et al.**, Exploring the band structure of wurtzite InAs nanowires using photocurrent spectroscopy, *Nano Res.* 13 (6) (2020) 1586–1591.
8. **Xu T., Wang H., Chen X., et al.**, Recent progress on infrared photodetectors based on InAs and InAsSb nanowires, *Nanotechnol.* 31 (29) (2020) 294004.
9. **Marcadet X., Rakovska A., Prevot I., et al.**, MBE growth of room-temperature InAsSb mid-infrared detectors, *J. Cryst. Growth*. 227–228 (July) (2001) 609–613.
10. **Krier A., de la Mare M., Carrington P. J., et al.**, Development of dilute nitride materials for mid-infrared diode lasers, *Semicond. Sci. Technol.* 27(9) (2012) 094009.
11. **De la Mare M., Zhuang Q., Krier A., et al.**, Growth and characterization of InAsN/GaAs dilute nitride semiconductor alloys for the midinfrared spectral range, *Appl. Phys. Lett.* 95 (3) (2009) 031110.
12. **Walukiewicz W., Zide J. M. O.**, Highly mismatched semiconductor alloys: From atoms to devices, *J. Appl. Phys.* 127 (1) (2020) 010401.
13. **Prete P., Lovergine N.**, Dilute nitride III–V nanowires for high efficiency intermediate-band photovoltaic cells: Material requirements, self-assembly methods and properties, *Progr. Cryst. Gr. Char. Mater.* 66 (4) (2020) 100510.
14. **Tambe M. J., Ren S., Gradecak S.**, Effects of gold diffusion on n-type doping of GaAs nanowires, *Nano Lett.* 10 (11) (2010) 4584–4589.
15. **Ishizaka A., Shiraki Y.**, Low temperature surface cleaning of silicon and its application to silicon MBE, *J. Electrochem. Soc.* 133 (4) (1986) 666.
16. **Kobl Müller G., Hertenberger S., Vizbaras K., et al.**, Self-induced growth of vertical free-standing InAs nanowires on Si(111) by molecular beam epitaxy, *Nanotechnol.* 21 (36) (2010) 365602.
17. **Matteini F., Tütüncüoğlu G., Potts H., et al.**, Wetting of Ga on SiO<sub>x</sub> and its impact on GaAs nanowire growth, *Cryst. Growth Des.* 15(7) (2015) 3105–3109.
18. **Kriegner D., Panse C., Mandl B., et al.**, Unit cell structure of crystal polytypes in InAs and InSb nanowires, *Nano Lett.* 11(4) (2011) 1483–1489.
19. **Gruart M., Jacopin G., Daudin B.**, Role of Ga surface diffusion in the elongation mechanism and optical properties of catalyst-free GaN nanowires grown by molecular beam epitaxy, *Nano Lett.* 19 (7) (2019) 4250–4256.

20. **Fedorov V., Vinnichenko M., Ustimenko R., et al.**, Non-uniformly strained core–shell InAs/InP nanowires for midinfrared photonic applications, *ACS Appl. Nano Mater.* 6 (7) (2023) 5460–5468.
21. **Marion J. L., Sourribes M., Isakov I., et al.**, Mobility enhancement by Sb-mediated minimization of stacking fault density in InAs nanowires grown on silicon, *Nano Lett.* 14 (3) (2014) 1643–1650.
22. **Wright A. F.**, Basal-plane stacking faults and polymorphism in AlN, GaN, and InN, *J. Appl. Phys.* 82 (10) (1997) 5259–5261.
23. **Cayron C.**, Diffraction artefacts from twins and stacking faults, and the mirage of hexagonal, polytypes or other superstructures, *Scr. Mater.* 194 (15 March) (2021) 113629–113632.
24. **Benaissa H., Zaoui A., Ferhat M.**, First principles calculations for dilute InAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> alloys, *J. Appl. Phys.* 102 (11) (2007) 113712.
25. **Zhuang Q. D., Krier A., Stanley C. R.**, Strain enhancement during annealing of GaAsN alloys, *J. Appl. Phys.* 101 (10) (2007) 103536.

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**КАВЕЕВ Андрей Камильевич** – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории мощных полупроводниковых приборов Физико-технического института им. А. Ф. Иоффе РАН, ведущий научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26  
kaveev@mail.ioffe.ru  
ORCID: 0000-0002-3640-677X

**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

**МИНИВ Дмитрий Владимирович** – аспирант научно-образовательного центра нанотехнологий Академического университета им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

195220, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3  
dimin4698@gmail.com  
ORCID: 0009-0006-3064-4175

### THE AUTHORS

**KAVEEV Andrey K.**

*Ioffe Institute of RAS*

*Alferov University of RAS*

26, Polytekhnikeskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia

kaveev@mail.ioffe.ru

ORCID: 0000-0002-3640-677X

**FEDOROV Vladimir V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

*Alferov University of RAS*

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

fedorov\_vv@spbstu.ru

ORCID: 0000-0001-5547-9387



**MINIV Dmitriy V.**

*Alferov University of RAS*

8/3 Khlopina St., St. Petersburg, 195220, Russia

dimin4698@gmail.com

ORCID: 0009-0006-3064-4175

*Статья поступила в редакцию 21.05.2024. Одобрена после рецензирования 20.06.2024.  
Принята 10.07.2024.*

*Received 21.05.2024. Approved after reviewing 20.06.2024. Accepted 10.07.2024.*

## Приборы и техника физического эксперимента

Научная статья


УДК 538.956

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17408>

### **МОДЕРНИЗАЦИЯ МЕТОДИКИ ПОЛУЧЕНИЯ ТЕМПЕРАТУР ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА С ПОМОЩЬЮ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ ПЬЕЗООТКЛИКА НА ПРИМЕРЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В МОНОКРИСТАЛЛЕ PZT**

**А. Ф. Вакуленко<sup>1</sup> , П. Ю. Ванина<sup>1</sup>, А. В. Филимонов<sup>1</sup>, С. Б. Вахрушев<sup>2</sup>**

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

<sup>2</sup> Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия  
 [sasha705@mail.ru](mailto:sasha705@mail.ru)

**Аннотация.** С целью коррекции дрейфа нуля при измерении величины пьезоэлектрического отклика разработана методика чопперного усиления. Использован метод атомно-силовой микроскопии пьезоотклика в условиях непрерывного изменения температуры. С помощью такой методики получены температуры фазового перехода антисегнетоэлектрик – сегнетоэлектрик в монокристалле PZT 4%. Качественное совпадение с результатами измерения поляризации насыщения, полученными методом Сойера – Тауэра, позволяет утверждать, что сделанные технические предположения вполне состоятельны и разработанная методика достойна широкого применения при подобных измерениях.

**Ключевые слова:** сегнетоэлектрик, цирконат-титанат свинца, пьезоотклик, атомно-силовая микроскопия, фазовый переход, метод Сойера – Тауэра

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

**Для цитирования:** Вакуленко А. Ф., Ванина П. Ю., Филимонов А. В., Вахрушев С. Б. Модернизация методики получения температур фазового перехода с помощью атомно-силовой микроскопии пьезоотклика на примере исследования фазового перехода в монокристалле PZT // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 98–105. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17408>

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.17408>

### **MODERNIZATION OF THE METHODOLOGY FOR OBTAINING PHASE TRANSITION TEMPERATURES USING THE PIEZORESPONSE FORCE MICROSCOPY EXEMPLIFIED BY STUDY OF A PHASE TRANSITION IN THE PZT SINGLE CRYSTAL**

**A. F. Vakulenko<sup>1</sup> , P. Yu. Vanina<sup>1</sup>, A. V. Filimonov<sup>1</sup>, S. B. Vakhrushev<sup>2</sup>**

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

<sup>2</sup> Ioffe Institute, St. Petersburg, Russia

 [sasha705@mail.ru](mailto:sasha705@mail.ru)

**Abstract.** A chopper amplification technique has been developed to correct zero drift when measuring the magnitude of the piezoelectric response using the PFM method under conditions of continuous temperature change. Employing this technique, the temperatures of the antiferroelectric – ferroelectric phase transition of a PZT 4% single crystal were obtained. A qualitative agreement with the results of measuring the saturation polarization obtained by the Sawyer – Tower method makes it possible to assert that the technical assumptions made are quite reasonable and the developed method is worthy of widespread use in such measurements.

**Keywords:** ferroelectric, lead zirconate titanate, piezoresponse, atomic force microscopy, phase transition, Sawyer – Tower method

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

**For citation:** Vakulenko A. F., Vanina P. Yu., Filimonov A. V., Vakhrushev S. B., Modernization of the methodology for obtaining phase transition temperatures using the piezoresponse force microscopy exemplified by study of a phase transition in the PZT single crystal, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 98–105. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17408>

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

### Введение

Метод атомно-силовой микроскопии пьезоотклика (АСМП) широко используется для определения доменной конфигурации в сегнетоэлектриках [1, 2], исследования движения доменных стенок [3], а также процессов переключения поляризации [4, 5]. В основе метода лежит явление обратного пьезоэлектрического эффекта, когда материал с ненулевой поляризацией изменяет размер при приложении внешнего электрического поля. Измерение величины и направления вектора поляризации осуществляется путем детектирования фазы и амплитуды колебания зонда атомно-силового микроскопа (АСМ); колебания генерируются переменным электрическим полем малой величины, которое прикладывается к образцу. Деформацию материала или отклонения зонда АСМ под действием электрического поля вызывают также и многие другие явления, например электрострикция или электростатическое взаимодействие с поверхностным зарядом [6 – 8].

Стоит отметить, что разделить влияние различных факторов, для того чтобы зарегистрировать непосредственно поляризацию сегнетоэлектриков, оказывается крайне затруднительным. На данный момент существуют достаточно эффективные (основанные на АСМП-спектроскопии), однако сложные в реализации методы для разделения вкладов электростатического взаимодействия и пьезоэлектрического отклика [9]. Тем не менее, основной областью применения метода АСМП является исследование материалов, гарантированно находящихся в сегнетоэлектрической фазе. При этом задачи идентификации момента перехода образца в СЭ-состояние требуют особого, зачастую индивидуального, подхода.

Пьезоэлектрический отклик – это комплексная величина: его амплитуда пропорциональна величине поляризации, а фаза определяется направлением вектора поляризации в образце. Величину пьезоотклика, полученную экспериментально в отсутствие поляризации в образце, называют вектором смещения, и он практически никогда не принимает значения, близкого к нулю. Более того, значение вектора смещения зависит от выбранной измерительной частоты, температуры, механических свойств зонда и образца. Можно рассматривать изменения данного вектора как дрейф нуля измерительной системы. Измерение абсолютной величины пьезоотклика крайне затруднено дрейфом нуля, что подробно описано в работе [10].

В данной работе исследована непрерывная температурная эволюция величины пьезоэлектрического отклика монокристалла  $\text{PbZr}_{0,96}\text{Ti}_{0,04}\text{O}_3$  (PZT 4%) с целью получения информации о температурах фазовых переходов между антисегнетоэлектрической (АСЭ) и сегнетоэлектрической (СЭ) фазами.

Поскольку эффект дрейфа нуля не позволяет надежно получать даже относительные значения величины пьезоотклика, вследствие непрерывно изменяющейся температуры, мы применили широко используемый в измерительной технике способ устранения этого дрейфа, называемый методом чопперного усилителя (*англ.* chopper amplifier).

### Материалы и методы

Исследуемый образец представлял собой пластину монокристалла  $\text{PbZr}_{0,96}\text{Ti}_{0,04}\text{O}_3$  толщиной  $35 \pm 3$  мкм и ориентацией поверхности (001). Поверхности пластины были отшлифованы до уровня шероховатости менее 100 нм. На обе стороны пластины были нанесены проводящие электроды хром-никель толщиной 84 нм (Cr – 4 нм, Ni – 80 нм) с помощью метода электронно-лучевого напыления. Рентгенографические данные, позволившие получить кристаллографическую ориентацию, были получены на рентгеновском дифрактометре SuperNova.

Измерение пьезоэлектрического отклика проводилось с использованием криогенного атомно-силового микроскопа Attocube Systems AttoAFM I, работающего в диапазоне от гелиевой до комнатной температур. Был использован кремниевый зонд марки HA\_HR\_DCP с алмазным проводящим покрытием (жесткость балки зонда – 35 Н/м). Для измерения сигналов пьезоэлектрического отклика применялся синхронный усилитель Stanford Research Systems SR844 с частотной полосой от 20 кГц до 200 МГц. Измерения проводились на постоянной частоте 60 кГц. Управление приборами и сбор данных осуществлялся по USB-интерфейсу с использованием программной среды NI LabView 2017.

Величина пьезоэлектрического отклика измерялась в одной точке поверхностного электрода при линейном изменении температуры ( $5^\circ\text{C}/\text{мин}$ ) и подаче на образец биполярных импульсов электрического поля амплитудой  $8,5$  кВ/см и периодом 2 с. Данной величины поля было достаточно для переключения поляризации в СЭ-фазе образца PZT 4%, но недостаточно в его АСЭ-фазе. Благодаря тому, что величина пьезоотклика пропорциональна величине поляризации, была возможность наблюдать ее рост при переходе образца в СЭ-фазу и спад при возврате в АСЭ-фазу. В общем случае применение сплошного поверхностного электрода понижает контраст между доменами различной ориентации [11]. Однако в нашем случае этот эффект не играет роли, так как измерения проводились в условиях однородного электрического поля плоского электрода, приводящего образец в монодоменное состояние. В таких условиях результаты измерений не зависят от выбранной точки на поверхности. Эффект электростатического взаимодействия зонда с поверхностью также исключался благодаря равенству потенциалов поверхностного электрода и проводящего зонда.

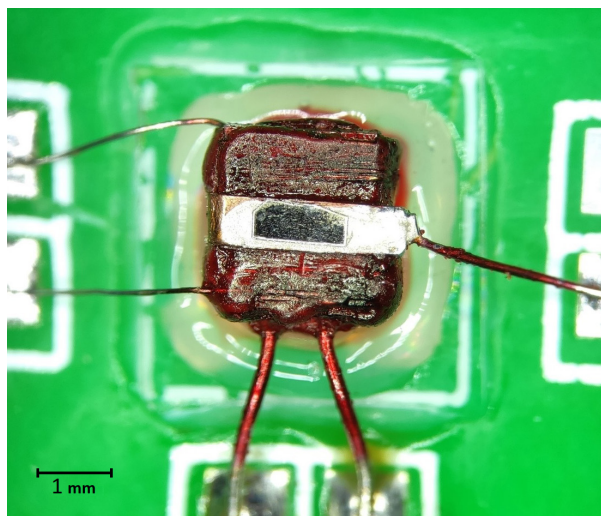


Рис. 1. Специальный нагреватель (вид сверху), расширяющий температурный диапазон измерения. Образец расположен на медном теплопроводящем электроде

С учетом того факта, что исследуемый фазовый переход АСЭ–СЭ находится за пределами штатного температурного диапазона, используемого АСМ, нагрев образца осуществлялся компактным нагревателем (рис. 1), разработанным специально для данного эксперимента и расширяющим температурный диапазон до  $130^\circ\text{C}$ . Нагреватель представляет собой платиновый термодатчик PT1000 ( $2 \times 2$  мм), обмотанный тонкой нихромовой проволокой. Термодатчик не только служит измерителем температуры, но и одновременно является основной термостатирующей массой нагревателя. На поверхности термодатчика располагается медный столик для фиксации образца; столик также служит нижним контактным электродом. Нагреватель расположен на стеклотекстолитовой печатной плате, являющейся несущим каркасом и обеспечивающей разводку электрических

контактов нагревателя к проводам. Суммарная толщина конструкции не превышает 4 мм, что позволяет использовать ее практически в любом атомно-силовом микроскопе. Контроль и изменение температуры образца со стабильностью около 0,05 К обеспечивались контроллером с программной реализацией ПИД-регулятора, изготовленным специально для данного эксперимента.

С учетом того, что микроскоп AttoAFM I имеет интерферометрическую систему детектирования отклонения зонда и его рабочий отрезок медленно меняется вследствие изменения температуры, сбор данных в ходе измерений кратковременно прерывался примерно через каждые 10 °С для коррекции данного изменения.

### Результаты и их обсуждение

На рис. 2 представлены временные зависимости вещественной и мнимой компонент сигнала пьезоотклика, а также значений температуры исследованного образца.

Коррекция дрейфа нуля проводилась следующим образом. На основе измеренных данных для каждого сигнала были построены верхняя ( $P\uparrow$ ) и нижняя ( $P\downarrow$ ) огибающие, поскольку каждый измеренный сигнал представлял собой меандр с переменной амплитудой, которая зависела от температуры. Обозначения  $P\uparrow$  и  $P\downarrow$  относятся к предельным (при данной величине поля) противоположным направлениям поляризации в образце. Затем для каждой температуры использовались величины полученных огибающих, чтобы построить так называемое сигнальное созвездие: позиции точек  $P\uparrow$  и  $P\downarrow$  на комплексной плоскости.

На рис. 3,а представлены сигнальные созвездия для нескольких температур. Точками красного и синего цвета обозначены значения комплексного сигнала пьезоотклика для противоположных направлений поляризации, черными точками отмечены величины вектора смещения ( $P = 0$ ).

На рис. 3,а видно, что с ростом температуры положение нулевой точки, а также наклон виртуальной линии, соединяющей точки  $P\uparrow$  и  $P\downarrow$ , заметно изменяются. Если иметь в распоряжении одновременно значения сигнала для противоположных направлений поляризации, то появляется возможность определять амплитуду пьезоотклика как половину расстояния между этими точками. На рис. 3,б представлена температурная зависимость скорректированной амплитуды пьезоотклика.

С помощью полученной температурной зависимости можно сделать заключение, что переход образца в СЭ-фазу происходит при нагревании в температурной области от 100 до 115 °С. В наблюдаемом фазовом переходе АСЭ – СЭ имеет место значительный температурный гистерезис, поскольку обратный переход начинается при понижении температуры примерно до 50 °С и продолжается вплоть до 20 °С. Максимальное значение пьезоотклика достигается в точке, предшествующей возврату в АСЭ-фазу. Также стоит отметить, что при нагреве образца в температурной области АСЭ-фазы значение величины пьезоотклика составляет около 0,06 мВ вследствие наведенной поляризации (а не эффекта смещения нуля).

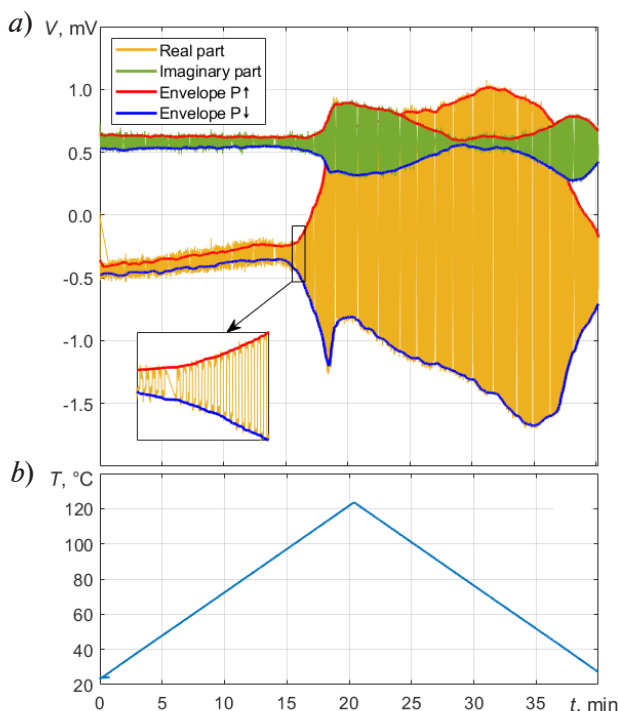


Рис. 2. Временные зависимости вещественной и мнимой компонент сигнала пьезоотклика образца  $\text{PbZr}_{0,96}\text{Ti}_{0,04}\text{O}_3$  (а), а также соответствующая программная реализация температурной динамики, которой подвергался образец.

Цветные огибающие линии на рис. 2,а использовались для построения сигнальных созвездий (см. далее)

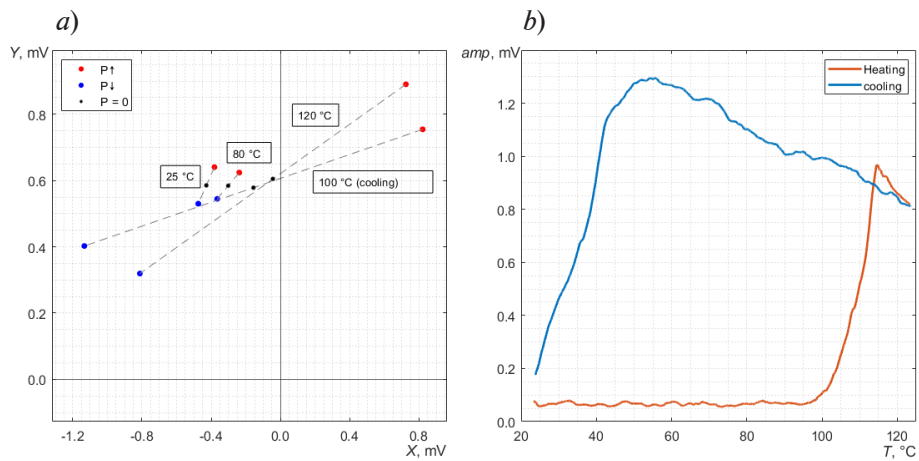


Рис. 3. Процедура идентификации момента перехода образца в сегнетоэлектрическое состояние: *a* – сигнальные созвездия для нескольких температур; *b* – температурная зависимость скорректированной амплитуды пьезоотклика образца  $\text{PbZr}_{0,96}\text{Ti}_{0,04}\text{O}_3$  (переход образца в СЭ-фазу происходит при нагревании в температурной области от 100 до 115 °С).

Красные и синие точки – значения комплексного сигнала пьезоотклика для противоположных направлений поляризации, черные точки – вектор смещения

Для оценки значимости результатов было проведено сравнение с результатами измерения поляризации насыщения  $P_s(T)$ . Зависимость  $P_s(T)$  была получена методом измерения петель сегнетоэлектрического гистерезиса (схема Сойлера – Тауэра) на установке, описанной в нашей статье [12]. Полученная зависимость поляризации насыщения  $P_s(T)$  представлена на рис. 4,*a*; добавлен также ее фрагмент в области максимального значения (рис. 4,*b*). Данный эксперимент был проведен непосредственно после измерения пьезоотклика методом АСМП; при этом не было возможности провести отжиг образца в параэлектрической фазе. Вероятно, вследствие данного факта температура обоих фазовых переходов понизились приблизительно на 5 – 10 °С. Несмотря на это, общий характер поведения зависимости  $P_s(T)$  имеет схожий тренд с таковым для амплитуды пьезоотклика.

Таким образом, можно утверждать, что применение метода чопперного усиления сигнала АСМП при непрерывно изменяющейся температуре позволяет изучать фазовый переход в СЭ-фазу, а также фиксировать особенности поведения поляризации насыщения в зависимости от температуры.

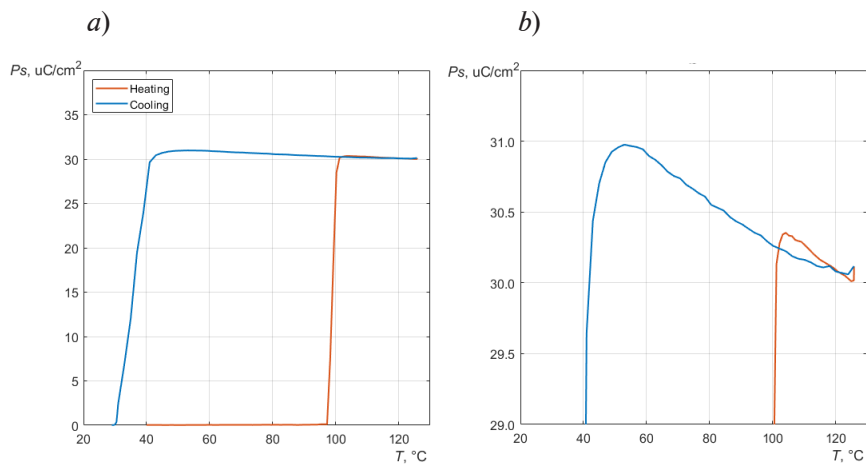


Рис. 4. Температурная зависимость поляризации насыщения, полученная методом Сойлера – Тауэра (*a*) и ее увеличенный фрагмент в области максимальных значений  $P_s(T)$  (*b*).

Кривые нагрева и охлаждения образца даны красным и синим цветами соответственно

### Заключение

Исследование было направлено на разработку методики чопперного усиления с целью коррекции дрейфа нуля при измерении величины пьезоэлектрического отклика методом АСМП в условиях непрерывного изменения температуры. С помощью разработанной методики получены температуры фазового перехода АСЭ – СЭ монокристалла  $\text{PbZr}_{0,96}\text{Ti}_{0,04}\text{O}_3$ . Качественное совпадение с результатами измерения поляризации насыщения, полученными методом Сойера – Тауэра, позволяет утверждать, что сделанные технические предположения вполне состоятельны и описанная методика достойна широкого применения при подобных измерениях.

Планируется дальнейшее развитие методики, которое будет выражено в усложнении состава и порядка импульсов напряжения, прикладываемых к образцу. Один из будущих вариантов предполагает добавление промежутков с нулевым напряжением между импульсами чередующейся полярности. Мы надеемся, что такое усовершенствование позволит точнее определять комплексный вектор смещения сигнала пьезоотклика, при этом лишь незначительно увеличит сложность обработки полученных данных. В то же время калибровочные измерения материала с хорошо известным пьезоэлектрическим коэффициентом позволят проводить точные количественные измерения.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kuerten L., Krohns S., Schoenherr P., Holeszek K., Pomjakushina E., Lottermoser T., Trassin M., Meier D., Fiebig M. Local control of improper ferroelectric domains in  $\text{YMnO}_3$  // *Physical Review B*. 2020. Vol. 102. No. 9. P. 094108.
2. Kumar A., Guy J. G. M., Zhang L., Chen J., Gregg J. M., Scott J. F. Nanodomain patterns in ultra-tetragonal lead titanate ( $\text{PbTiO}_3$ ) // *Applied Physics Letters*. 2020. Vol. 116. No. 18. P. 182903.
3. Zhang D., Sando D., Sharma P., Cheng X., Ji F., Govinden V., Weyland M., Nagarajan V., Seidel J. Superior polarization retention through engineered domain wall pinning // *Nature Communications*. 2020. Vol. 11. No. 1. P. 349.
4. Jesse S., Baddorf A. P., Kalinin S. V. Switching spectroscopy piezoresponse force microscopy of ferroelectric materials // *Applied Physics Letters*. 2006. Vol. 88. No. 6. P. 062908.
5. Huang Ch.-R., Luo X., Chen X.-G., Song X.-J., Zhang Zh.-X., Xiong R.-G. A multiaxial lead-free two-dimensional organic-inorganic perovskite ferroelectric // *National Science Review*. 2021. Vol. 8. No. 5. P. nwaa232.
6. Hong J. W., Park S., Khim Z. G. Measurement of hardness, surface potential, and charge distribution with dynamic contact mode electrostatic force microscope // *Review of Scientific Instruments*. 1999. Vol. 70. No. 3. Pp. 1735–1739.
7. Balke N., Jesse S., Li Q., Maksymovych P., Okatan M. B., Strelkov E., Tselev A., Kalinin S. V. Current and surface charge modified hysteresis loops in ferroelectric thin films // *Journal of Applied Physics*. 2015. Vol. 118. No. 7. P. 072013.
8. Nonnenmacher M., O'Boyle M. P., Wickramasinghe H. K. Kelvin probe force microscopy // *Applied Physics Letters*. 1991. Vol. 58. No. 25. Pp. 2921–2923.
9. Balke N., Maksymovych P., Jesse S., Herklolotz A., Tselev A., Eom Ch.-B., Kravchenko I. I., Yu P., Kalinin S. V. Differentiating ferroelectric and nonferroelectric electromechanical effects with scanning probe microscopy // *ACS (American Chemical Society) Nano*. 2015. Vol. 9. No. 6. Pp. 6484–6492.
10. Jungk T., Hoffmann B., Soergel E. Quantitative analysis of ferroelectric domain imaging with piezoresponse force microscopy // *Applied Physics Letters*. 2006. Vol. 89. No. 16. P. 163507.
11. Jungk T., Hoffmann A., Soergel E. Impact of elasticity on the piezoresponse of adjacent ferroelectric domains investigated by scanning force microscopy // *Journal of Applied Physics*. 2007. Vol. 102. No. 8. P. 084102.
12. Вакуленко А. Ф., Вахрушев С. Б., Филимонов А. В., Чжан Н. Установка для измерения петель сегнетоэлектрического гистерезиса на основе модифицированного метода Сойера – Тауэра // *Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки*. 2019. Т. 12. № 4. С. 89–96.

## REFERENCES

1. Kuerten L., Krohns S., Schoenherr P., et al., Local control of improper ferroelectric domains in  $\text{YMnO}_3$ , Phys. Rev. B. 102 (9) (2020) 094108.
2. Kumar A., Guy J. G. M., Zhang L., et al., Nanodomain patterns in ultra-tetragonal lead titanate ( $\text{PbTiO}_3$ ), Appl. Phys. Lett. 116 (18) (2020) 182903.
3. Zhang D., Sando D., Sharma P., et al., Superior polarization retention through engineered domain wall pinning, Nat. Commun. 11 (1) (2020) 349.
4. Jesse S., Baddorf A. P., Kalinin S. V., Switching spectroscopy piezoresponse force microscopy of ferroelectric materials, Appl. Phys. Lett. 88 (6) (2006) 062908.
5. Huang Ch.-R., Luo X., Chen X.-G., et al., A multiaxial lead-free two-dimensional organic-inorganic perovskite ferroelectric, Natl. Sci. Rev. 8 (5) (2021) nwaa232.
6. Hong J. W., Park S., Khim Z. G., Measurement of hardness, surface potential, and charge distribution with dynamic contact mode electrostatic force microscope, Rev. Sci. Instrum. 70 (3) (1999) 1735–1739.
7. Balke N., Jesse S., Li Q., et al., Current and surface charge modified hysteresis loops in ferroelectric thin films, J. Appl. Phys. 2015. Vol. 118 (7) (2015) 072013.
8. Nonnenmacher M., O'Boyle M. P., Wickramasinghe H. K., Kelvin probe force microscopy, Appl. Phys. Lett. 58 (25) (1991) 2921–2923.
9. Balke N., Maksymovych P., Jesse S., et al., Differentiating ferroelectric and nonferroelectric electromechanical effects with scanning probe microscopy, ACS Nano. 9 (6) (2015) 6484–6492.
10. Jungk T., Hoffmann Á., Soergel E., Quantitative analysis of ferroelectric domain imaging with piezoresponse force microscopy, Appl. Phys. Lett. 89 (16) (2006) 163507.
11. Jungk T., Hoffmann Á., Soergel E., Impact of elasticity on the piezoresponse of adjacent ferroelectric domains investigated by scanning force microscopy, J. Appl. Phys. 102 (8) (2007) 084102.
12. Vakulenko A. F., Vakhrushev S. B., Filimonov A. V., Zhang N., An automatic system for measuring the ferroelectric hysteresis loops using the modified Sawyer – Tower circuit, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 12 (4) (2019) 89–96 (in Russian).

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ВАКУЛЕНКО Александр Феликсович** – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

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

**ВАНИНА Полина Юрьевна** – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
p.yu.vanina@gmail.com  
ORCID: 0000-0002-4113-0405

**ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович** – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
filimonov@rphf.spbstu.ru  
ORCID: 0000-0002-2793-5717



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

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

s.vakhrushev@mail.ioffe.ru

ORCID: 0000-0003-4867-1404

#### THE AUTHORS

**VAKULENKO Aleksandr F.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

sasha705@mail.ru

ORCID: 0000-0001-5541-3409

**VANINA Polina Yu.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

p.yu.vanina@gmail.com

ORCID: 0000-0002-4113-0405

**FILIMONOV Alexey V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

filimonov@rphf.spbstu.ru

ORCID: 0000-0002-2793-5717

**VAKHRUSHEV Sergey B.**

*Ioffe Institute*

26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia

s.vakhrushev@mail.ioffe.ru

ORCID: 0000-0003-4867-1404

*Статья поступила в редакцию 26.06.2024. Одобрена после рецензирования 12.07.2024. Принята 17.07.2024.*

*Received 26.06.2024. Approved after reviewing 12.07.2024. Accepted 12.07.2024.*

Original article

UDC 538.955-405

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM17409>

## VERTICAL SPIN VALVE PERFORMANCE OF NiFe/Co-PANI/NiFe SYSTEM

K. R. Nemade<sup>1</sup> , P. B. Maheshwary<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Indira Mahavidyalaya, Kalamb, India;

<sup>2</sup> Rashtrasant Tukadoji Maharaj Nagpur University, Nagpur, India

 [krnemade@gmail.com](mailto:krnemade@gmail.com)

**Abstract.** The organic materials are found to be potent candidates for spintronics applications. Here, we have presented a cobalt-loaded polyaniline (Co-PANI)-based spin valve with NiFe alloy as ferromagnetic contacts. The spin valve signal was observed at temperatures from 10 K to 300 K. The  $IV$  curve of the spin valve exhibited a linear relationship, which showed that Co-PANI behaved like metal in this valve. The highest value of the magnetoresistance (MR) was found to be 8.13% at 10 K, whereas it decreased to 3.32 % at 300 K. Similarly, the bias current effect showed that the highest value of MR was 3.46 % for 10 A, which reduced down to 0.93% for 40 A.

**Keywords:** polymeric composites, magnetic materials, spin-valve, organic spintronics

**For citation:** Nemade K. R., Maheshwary P. B., Vertical spin valve performance of NiFe/Co-PANI/NiFe system, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 106–113. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17409>

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 538.955-405

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17409>

## ПОКАЗАТЕЛИ РАБОТЫ ПОДВЕСНОГО СПИНОВОГО КЛАПАНА СИСТЕМЫ NiFe/Co-PANI/NiFe

К. Р. Немаде<sup>1</sup> , П. Б. Махешваре<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Колледж Индиры Махавидьялая, г. Каламб, Индия

(филиал Университета Санд-Гадж Баба в г. Амравати, Индия);

<sup>2</sup> Университет Раштрасант Тукадоджи Махарадж Нагпур, г. Нагпур, Индия

 [krnemade@gmail.com](mailto:krnemade@gmail.com)

**Аннотация.** Установлено, что органические материалы являются перспективными для применения в спинтронике. В работе представлен спиновый клапан на основе полианилина, допированного кобальтом (Co-PANI), с железоникелевым сплавом в качестве ферромагнитных контактов (система NiFe/Co-PANI/NiFe). Сигнал от спинового клапана наблюдался в температурном диапазоне от 10 К до 300 К. Вольтамперная характеристика этого устройства была линейной, что указывало на поведение материала Co-PANI, свойственное металлу. Наивысшее значение магнетосопротивления, которое составило 8,13 %, было достигнуто при температуре 10 К; затем значение снижалось до 3,32 % при 300 К. Аналогично проявилось и влияние тока смещения: наибольшее значение магнетосопротивления, равное 3,46 %, было получено при токе 10 А, а затем оно снизилось до 0,93 % при 40 А.

**Ключевые слова:** полимерный композит, магнитный материал, подвесной спиновый клапан, органическая спинтроника



**Ссылка при цитировании:** Немаде К. Р., Махешваре П. Б. Показатели работы подвешенного спинового клапана системы NiFe/Co-PANI/NiFe // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 106–113. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17409>

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

## Introduction

The organic materials are found to be more appropriate for spintronics application due to their outstanding characteristics that is a long spin relaxation time of spin polarized electrons. Similarly, the small spin-orbit coupling is another virtue of organic materials, which make it promising alternative over existing inorganic spintronics [1]. Organic spintronic device technology has a range of versatile applications, such as magnetic-field sensing, logic devices, oscillators, light emitting device and memory. In current decade, the field of organic spintronics is prospering gradually and some significant reports are summarized here.

Z. H. Xiong et al. [6] critically studied the use of a spin valve made of organic materials. The spin valve is a device with multilayer structure consisting of magnetic and nonmagnetic materials, known as a spacer. In this device, the electrical resistance depends on the spin of electrons passing through the device, which can be controlled by an external magnetic field. This study underlined that spin-polarized carrier injection, transport and detection are the key processes in the spintronics, which can be easily achieved in the organic spintronic materials [2].

The first tunable organic magnetoresistance effect in polyaniline (PANI) modified with poly(p-phenylene-2,6-benzobisoxazole) synthesized by a surface-initiated polymerization was reported by H. Gu et al. [3]. The organic magnetoresistance effect in the PANI modified with poly(p-phenylene-2,6-benzobisoxazole) varied from 1.2 to 5.1, and  $-34.8\%$  for the values of fibers 5, 10, 30, and 60 wt. %, respectively. The result of investigation showed the magnetoresistance to be tunable in polyaniline [3]. H. Gu et al. critically reviewed giant magnetoresistance characteristics of nanostructured polyaniline. The giant magnetoresistance effect in conducting polymers, especially in polyaniline, has deserved close attention due to easy and cost-effective synthesis techniques, good transport properties and high giant magnetoresistance signals relative to other organic spintronic materials. N. Tanty et al. [4] reported the low temperature transport properties and magnetoresistance measurements of polyaniline-carbon nanotube composite. The result of this study showed that the transition from positive to negative magnetoresistance was achieved at a higher concentration of multi-walled carbon nanotubes. Using the wave function shrinkage effect and quantum interference effect, N. Tanty et al. demonstrated the transition in magnetoresistance from positive to negative one. A. L. Lin et al. [5] studied the magnetoresistance phenomenon in polyaniline-iron oxide nanoparticle organic hybrid composite. The material under study showed a positive magnetoresistance of  $85.7\%$  at room temperature. The polyaniline-iron oxide exhibited memory effect, i. e., the device could maintain its resistive state even when the power being switched off [6]. But a serious problem associated with organic spintronics materials arises when spin is injected into medium. Since ferromagnetic contacts and organic semiconductors do not match in impedance, the spin current through the interface disappears immediately [7].

Inspiring by the challenges associated with organic spintronics technology, we decided to study the spin-valve effect in the cobalt-loaded polyaniline (Co-PANI) composite from a magnetoresistance (MR) perspective. Similarly, we analyzed the effect of temperature and bias current on the spin-valve performance.

## Experimental

In the present work, cobalt-containing polyaniline (Co-PANI) was prepared using the *ex-situ* procedure. The starting materials polyaniline (PANI),  $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  and other chemicals were purchased from Sigma-Aldrich and used without further treatment. In the preparation of Co-PANI composite,  $0.5\%$  by weight  $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  was added in 30 ml of double distilled water under constant magnetic stirring for 10 min. Similarly, 5 g of PANI was added in 30 ml of double

distilled water and kept for probe-sonication (30 min). After completion of ultrasonic treatment of the probe with a dose of PANI, the solution of  $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  was added in the solution of PANI under constant magnetic stirring. After this step, the final suspension was again left for probe sonication (30 min). Finally, the solution was filtered and washed with deionized water. The resulting final product was dried at  $60^\circ\text{C}$  in an oven.

The structural study of Co-PANI composite was performed using X-ray diffraction (XRD) analysis with Rigaku Miniflex XRD set up  $\text{CuK}_\alpha$  radiation ( $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$ ). The surface morphology of Co-PANI composite was analyzed by field emission scanning electron microscopy (FE-SEM) on the SEM setup of ZEISS SIGMA operating at 5 kV ETH voltage. Raman spectroscopy was applied to study the chemical structure of composites. The Bruker RFS 27 Raman spectrometer was used for Raman analysis. To explore the ferromagnetism in the Co-PANI composite, Vibrating Sample Magnetometer (VSM) technique was used and the data recorded using VSM set up (Quantum Design Model-PAR 155).

In the process of fabrication of the Co-PANI-based spin-valve device, first pre-patterned NiFe electrode (bottom FM) 50 nm in thickness deposited by electron-beam lithography on  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  substrate was taken. The Co-PANI composite  $\sim 1.2 \mu\text{m}$  thick was transferred to this bottom electrode by spin coating technique. After this step, in the second run of electron-beam lithography, NiFe (Top FM) electrode was deposited on the Co-PANI layer of the same thickness. Fig.1,*a* shows the schematic of the Co-PANI-based spin valve.

Next, the characteristics of the spin valve were measured using a four-terminal setup to analyze the performance of the spin valve. In this study, the bias current was applied perpendicular to the device, whereas magnetic field employed in-plane at  $45^\circ$  to the direction of NiFe electrodes. The all measurements of the Co-PANI composite-based spin valve were investigated on the physical properties measurements system made by Quantum Design. The measurement design and optical micrograph of the spin valve is shown in Fig. 1,*b*.

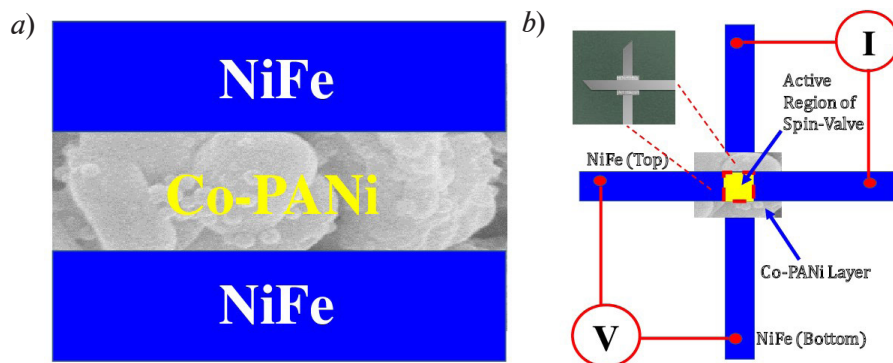


Fig. 1. Schematic (*a*) and measurement (*b*) structures of the Co-PANI-based vertical spin-valve device with optical micrograph

## Results and discussion

Fig. 2,*a* depicts the XRD pattern of the Co-PANI composite. This pattern that exhibits noisy behavior with some sharp peaks, indicates that the composite is in the semi-crystalline state. Fig. 2,*b* shows the Raman spectrum of the Co-PANI composite. The C–N stretching band of semiquinoid form of PANI appears in the region of  $1222 \text{ cm}^{-1}$ . The weak broad hump around  $1140 \text{ cm}^{-1}$  may arise due to a vibration mode. The band that appears around  $1390 \text{ cm}^{-1}$  is attributed to the C–N stretching vibration from benzenoid. The band at  $1650 \text{ cm}^{-1}$  is outcome of the C=N stretching from quinoid (Q) structure. The degree of protonation of PANI improves in the presence of metal oxide, this may be due to metal oxide extract electron from PANI [8]. Fig. 2,*c* shows the SEM image of the Co-PANI composite. This image shows that the composite sample has irregular morphology. More detailed observation of the SEM image shows that spherical Co nanoparticles appear on the PANI surface. Fig. 2,*d* shows the typical hysteresis loops observed for PANI and Co-PANI composite samples. The area with the hysteresis loop significantly increased

for the Co-PANI composite. This is attributed to larger magnetization of Co nanoparticles and interfaces formed between Co nanoparticles and PANI.

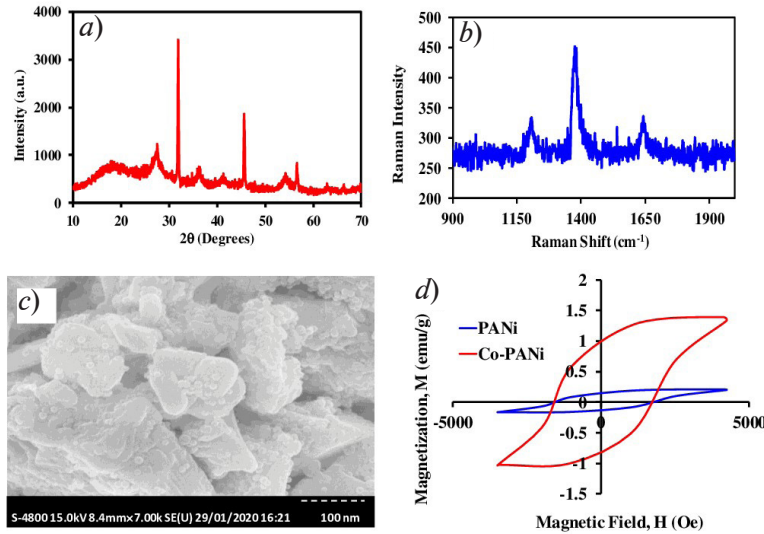


Fig. 2. The XRD pattern (a), Raman spectrum (b), SEM image (c) of the Co-PANI composite and hysteresis loops observed for the PANI and Co-PANI composite samples (d)

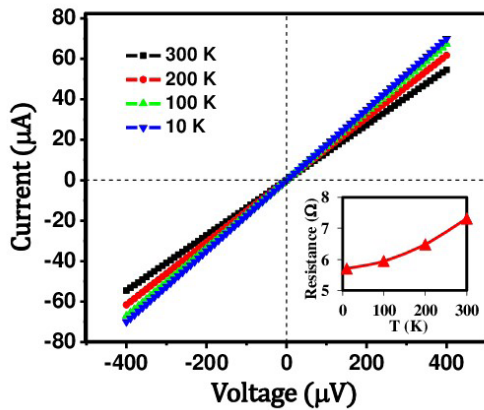


Fig. 3. Current-voltage characteristics of the spin valve at different temperatures from 10 K to 300K. Inset: the resistance curve as a function of temperature at zero magnetic field

Fig. 3 depicts the current-voltage ( $IV$ ) characteristics of NiFe/Co-PANI/NiFe spin valve recorded at temperatures 10, 100, 200 and 300 K. The linear  $IV$  curve reveals the Ohmic nature of contacts occurs between NiFe and Co-PANI [9]. Next, the inset of Fig. 3 shows the variation of resistance with temperature. It can be seen that the resistance increases with increasing temperature, which indicates that Co-PANI behaves like metal in the spin-valve device. In other words, the thin layer of the Co-PANI reveals conductive property and no tunneling characteristics present in the thin layer of the Co-PANI [10].

In the present research, spin-valve effect in the Co-PANI-based device was analyzed by studying the magnetoresistance ratio (MR, %). It is defined as

$$MR = [(R_{ap} - R_p)/R_p] \cdot 100 (\%),$$

where  $R_{ap}$  is the resistance depending on magnetic field,  $R_p$  is the resistance bound up with parallel alignment of magnetizations [11].

Fig. 4,a shows the MR signal of NiFe/Co-PANI/NiFe spin valve that includes the bistable resistance state, where the high state and low state are associated with the antiparallel and parallel magnetization configurations between FM electrodes, respectively. Measurements of MR in the spin-valve show the highest value  $MR = 8.13 \%$  at 10 K and the lowest value  $MR = 3.32 \%$  at 300 K.

Further, Fig. 4,b shows the variation of MR of spin-valve and the spin polarization as a function of temperature (from 10 K to 300 K). The necessary values of the spin polarization were estimated using the relation

$$MR = (2P_1P_2)/(1 - P_2P_2),$$

where  $P$  is the spin-polarization [12].

In our case, both FM contacts were NiFe, therefore  $P_1 = P_2$ . It is observed that both MR and the spin polarization monotonically reduce with increasing temperature. The decrease in MR magnitude with increasing temperature is associated with several processes such as inelastic scattering with phonons, surface states and thermal smearing of electrons in FM metals [13]. Finally, the effect of bias current on MR of spin-valve was investigated for current values 10, 20, 30 and 40  $\mu\text{A}$  at room temperature 300 K. Fig. 4,c shows the MR recorded for different values of bias currents. It is clearly observed that the amplitude of MR decreases with increasing the bias current. The highest value of MR was found to be  $MR = 3.46\%$  for 10  $\mu\text{A}$  and it decreased monotonically with increasing the bias current. Fig. 4,d shows the variation of MR and the spin-polarization with the bias current value. It is observed that both quantities decrease monotonically with the bias current. The decrease in MR with the current bias is associated with accumulation of the spin excitations at the interfaces between NiFe and Co-PANI. Moreover, the generated localized states at interfaces act as a metal layer in the vertical spin valve [14].

Table shows the MR values reported in literature about spin valves based on organic

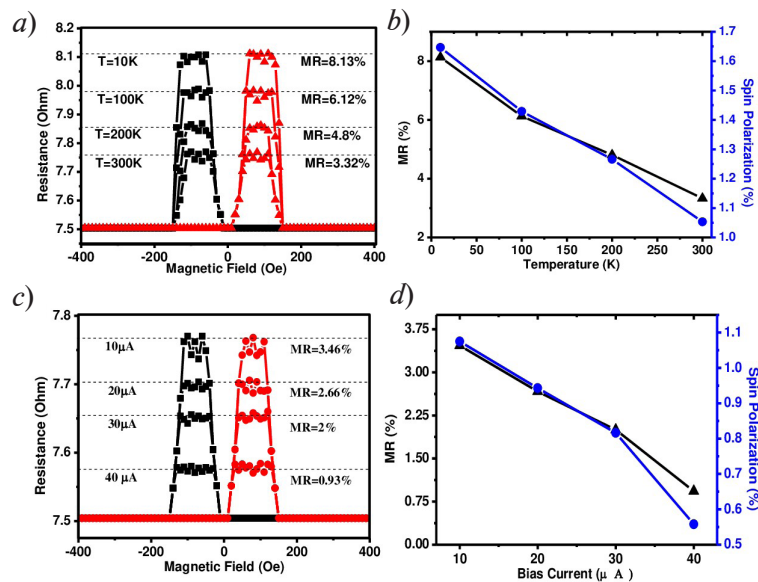


Fig. 4. The data obtained for the spin valve:

*a* – the temperature dependence of the MR; *b* – variation of the MR and spin polarization as a function of temperature; *c* – the bias current dependence of the MR; *d* – variation of the MR and spin polarization as a function of bias current

Table

**MR values reported in literature about spin valves based on organic semiconductors with various ferromagnetic electrodes**

Organic semiconductor	FM electrode	T, K	MR, %	Reference
Copper (II)-phthalocyanine	Fe/Co	40	6.4	[15]
Bathocuproine	Co/NiF	Room	3.5	[16]
Polymer-P(NDI2OD-T2)	LSMO/Co/Al		6.8	[17]
Co-PANI	NiFe/NiFe	10	8.13	This work
		300	3.32	



semiconductors with various ferromagnetic (FM) electrodes. The results obtained in the present investigation motivate further research. The main accomplishment of the present study is that the MR can be tuned to a specific value by controlling the temperature or bias current.

### Conclusions

In conclusion, we have successfully demonstrated the spin-valve effect in the Co-PANI layer sandwiched between NiFe as FM electrodes. The findings in the present work shows that magnetoresistance (MR) is sensitive to the temperature and bias current of a spin-valve device. It was observed that MR decreased with increasing temperature. Similarly, the MR also decreased with increasing the bias current. Current-voltage characteristics of the spin valve revealed that semiconducting Co-PANI layer sandwiched between NiFe as FM electrodes, behaved like a metal layer. The present study showed that PANI based spin valves were expected to be an attractive category of materials due to their ease of preparation for spintronics application, that open up new opportunities for spintronics technology.

### Acknowledgements

The authors are thankful very much to the Chief Director of Indira College, Kalamb Dist. Yavatmal for providing necessary facilities.

### REFERENCES

1. **Vardeny Z. V.**, Organic spintronics. 1st Ed. CRC Press, Boca Raton, USA, 2010.
2. **Ghu H., Xu X., Cai J., et al.**, Controllable organic magnetoresistance in polyaniline coated poly(p-phenylene-2,6-benzobisoxazole) short fibers, *Chem. Commun.* 55 (68) (2019) 10068–10071.
3. **Gu H., Guo J., Yan X., et al.**, Electrical transport and magnetoresistance in advanced polyaniline nanostructures and nanocomposites, *Polymer.* 55 (17) (2014) 4405–4419.
4. **Tanty N., Patra A., Maity K. P., Prasad V.**, Tuning magnetoresistance and electrical resistivity by enhancing localization length in polyaniline and carbon nanotube composites, *Bull. Mater. Sci.* 42 (5) (2019) 198.
5. **Lin A. L., Wu T., Chen W., Wee A. T. S.**, Room temperature positive magnetoresistance via charge trapping in polyaniline-iron oxide nanoparticle composites, *Appl. Phys. Lett.* 103 (3) (2013) 032408.
6. **Xiong Z. H., Wu D., Vardeny Z. V., Shi J.**, Giant magnetoresistance in organic spin-valves, *Nature.* 427 (6977) (2004) 821–824.
7. **Richter C. A., Bittle E. G.**, Dopants give organic electronics a new spin, *Nat. Electron.* 2 (3) (2019) 1–2.
8. **Grzeszczuk M., Granska A., Szostak R.**, Raman spectroelectrochemistry of polyaniline synthesized using different electrolytic regimes – multivariate analysis, *Int. J. Electrochem. Sci.* 8 (7) (2013) 8951–8965.
9. **Xu L., Feng J., Zhao K., et al.**, Magnetoresistance effect in NiFe/BP/NiFe vertical spin valve devices, *Adv. Cond. Matter Phys.* 2017 (26 Febr) (2017) 9042823.
10. **Wang W., Narayan A., Tang L., et al.**, Spin-valve effect in NiFe/MoS<sub>2</sub>/NiFe junctions, *Nano Lett.* 15 (8) (2015) 5261–5267.
11. **Iqbal M. Z., Iqbal M. W., Siddique S., et al.**, Room temperature spin valve effect in NiFe/WS<sub>2</sub>/Co junctions, *Sci. Rep.* 6 (12 Febr) (2016) 21038.
12. **Kravets V. G.**, Correlation between the magnetoresistance, IR magnetorelectance, and spin-dependent characteristics of multilayer magnetic films, *Phys. Res. Int.* 2012 (1; 1 Febr) (2012) 323279.
13. **Akerman J. J., Roshchin I. V., Slaughter J. M., et al.**, Origin of temperature dependence in tunneling magnetoresistance, *Europhys. Lett.* 63 (1) (2003) 104–110.
14. **Zhang S., Levy P. M., Marley A. C., Parkin S. S. P.**, Quenching of magnetoresistance by hot electrons in magnetic tunnel junctions, *Phys. Rev. Lett.* 79 (19) (1997) 3744–3747.
15. **Xu W., Brauer J., Szulcowski G., et al.**, Electronic, magnetic, and physical structure of cobalt deposited on aluminum tris(8-hydroxy quinoline), *Appl. Phys. Lett.* 94 (23) (2009) 233302.
16. **Sun X., Bedoya-Pinto A., Llopis R., et al.**, Flexible semi-transparent organic spin valve based on bathocuproine, *Appl. Phys. Lett.* 105 (8) (2014) 083302.

17. Li F., Li T., Chen F., Zhang F., Excellent spin transport in spin valves based on the conjugated polymer with high carrier mobility, *Sci. Rep.* 5 (23 March) (2015) 9355.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vardeny Z. V. *Organic spintronics*. 1st Ed. Boca Raton, USA: CRC Press, 2010. 352 p.
2. Ghu H., Xu X., Cai J., et al. Controllable organic magnetoresistance in polyaniline coated poly(p-phenylene-2,6-benzobisoxazole) short fibers // *Chemical Communications*. 2019. Vol. 55. No. 68. Pp. 10068–10071.
3. Gu H., Guo J., Yan X., Wei H., Zhang X., Liu J., Huang Y., S. Wei S., Guo Z. Electrical transport and magnetoresistance in advanced polyaniline nanostructures and nanocomposites // *Polymer*. 2014. Vol. 55. No. 17. Pp. 4405–4419.
4. Tanty N., Patra A., Maity K. P., Prasad V. Tuning magnetoresistance and electrical resistivity by enhancing localization length in polyaniline and carbon nanotube composites // *Bulletin of Materials Science*. 2019. Vol. 42. No. 5. P. 198.
5. Lin A. L., Wu T., Chen W., Wee A. T. S. Room temperature positive magnetoresistance via charge trapping in polyaniline-iron oxide nanoparticle composites // *Applied Physics Letters*. 2013. Vol. 103. No. 3. P. 032408.
6. Xiong Z. H., Wu D., Vardeny Z. V., Shi J. Giant magnetoresistance in organic spin-valves // *Nature*. 2004. Vol. 427. No. 6977. Pp. 821–824.
7. Richter C. A., Bittle E. G. Dopants give organic electronics a new spin // *Nature Electronics*. 2019. Vol. 2. No. 3. Pp. 1–2.
8. Grzeszczuk M., Granska A., Szostak R. Raman spectroelectrochemistry of polyaniline synthesized using different electrolytic regimes – multivariate analysis // *International Journal of Electrochemical Science*. 2013. Vol. 8. No. 7. Pp. 8951–8965.
9. Xu L., Feng J., Zhao K., Lv W., Han X., Liu Z., Xu X., Huang H., Zeng Z. Magnetoresistance effect in NiFe/BP/NiFe vertical spin valve devices // *Advances in Condensed Matter Physics*. 2017. Vol. 2017. 26 February. P. 9042823.
10. Wang W., Narayan A., Tang L., et al. Spin-valve effect in NiFe/MoS<sub>2</sub>/NiFe junctions // *Nano Letters*. 2015. Vol. 15. No. 8. Pp. 5261–5267.
11. Iqbal M. Z., Iqbal M. W., Siddique S., Khan M. F., Ramay S. M. Room temperature spin valve effect in NiFe/WS<sub>2</sub>/Co junctions // *Scientific Reports*. 2016. Vol. 6. 12 February. P. 21038.
12. Kravets V. G. Correlation between the magnetoresistance, IR magnetorelectance, and spin-dependent characteristics of multilayer magnetic films // *Physics Research International*. 2012. Vol. 2012. No. 1 (1 February). P. 323279.
13. Akerman J. J., Roshchin I. V., Slaughter J. M., Dave R. W., Schuller I. K. Origin of temperature dependence in tunneling magnetoresistance // *Europhysics Letters*. 2003. Vol. 63. No. 1. Pp. 104–110.
14. Zhang S., Levy P. M., Marley A. C., Parkin S. S. P. Quenching of magnetoresistance by hot electrons in magnetic tunnel junctions // *Physical Review Letters*. 1997. Vol. 79. No. 19. Pp. 3744–3747.
15. Xu W., Brauer J., Szulczewski G., Driver M. S., Caruso A. N. Electronic, magnetic, and physical structure of cobalt deposited on aluminum tris(8-hydroxy quinoline) // *Applied Physics Letters*. 2009. Vol. 94. No. 23. P. 233302.
16. Sun X., Bedoya-Pinto A., Llopis R., Casanova F., Hueso L. E. Flexible semi-transparent organic spin valve based on bathocuproine // *Applied Physics Letters*. 2014. Vol. 105. No. 8. P. 083302.
17. Li F., Li T., Chen F., Zhang F. Excellent spin transport in spin valves based on the conjugated polymer with high carrier mobility // *Scientific Reports*. 2015. Vol. 5. 23 March. P. 9355.

### THE AUTHORS

**NEMADE Kailash Rumbhau**

*Indira Mahavidyalaya, Kalamb Dist. Yavatmal*  
Ralegaon Road, Kalamb Maharashtra  
krnemade@gmail.com



**MAHESHWARY Prashant Brajmohan**

*Rashtrasant Tukadoji Maharaj Nagpur University, Nagpur, India*  
42XQ+JRJ, Amravati Rd, Gokulpeth, Nagpur, Maharashtra 440033, India.  
prashantmaheshwary51@gmail.com  
ORCID: 0000-0002-6896-4610

**СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ**

**НЕМАДЕ Кайлаш Рамбхау** – *Ph.D.*, доцент колледжа Индиры Махавидьялая, г. Каламб (филиал Университета Санд-Гадж Баба в г. Амравати), Индия.

MH SH 236, Dist, near Shree Saraswati Temple, Malkapur, Kalamb, Maharashtra 445401, India  
krnemade@gmail.com

**МАХЕШВАРИ Прашант Брамджмохан** – *Ph.D.*, декан факультета науки и технологий Университета Раштрасант Тукадоджи Махарадж Нагпур, г. Нагпур, Индия.

42XQ+JRJ, Amravati Rd, Gokulpeth, Nagpur, Maharashtra 440033, India  
prashantmaheshwary51@gmail.com  
ORCID: 0000-0002-6896-4610

*Received 22.09.2023. Approved after reviewing 03.06.2024. Accepted 03.06.2024.*

*Статья поступила в редакцию 22.09.2023. Одобрена после рецензирования 03.06.2024.  
Принята 03.06.2024.*

## Физическая электроника

Научная статья

УДК 621.384.8

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17410>

### ЭФФЕКТИВНОСТЬ ФОКУСИРУЮЩЕЙ СИСТЕМЫ ПРИ ТРАНСПОРТИРОВКЕ ИОННОГО ТОКА В СИСТЕМУ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ОТКАЧКИ МАСС-СПЕКТРОМЕТРА

**Т. В. Помозов** <sup>✉</sup>, **М. З. Мурадымов**, **Е. А. Ткач**, **М. И. Явор**

Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия

<sup>✉</sup> [tim-kor@mail.ru](mailto:tim-kor@mail.ru)

**Аннотация.** Проведено экспериментальное исследование транспортировки заряженных частиц в ионном источнике с коронным разрядом и фокусирующей системой, состоящей из тонких диафрагм, с учетом газодинамического течения в окрестности сопла. Показано, что область влияния газодинамического течения на транспортировку ионов в окрестности сопла не превышает двух диаметров сопла. Представлены результаты сравнения эффективности транспортировки ионного пучка в ионном источнике с фокусирующей системой и без нее. Использование фокусирующей системы позволяет втрое увеличить ток на коллекторе и на порядок величины повысить сумму токов, приходящих на сопло и коллектор.

**Ключевые слова:** ионный источник, масс-спектрометр, система дифференциальной откачки, фокусирующая система, транспортировка ионов

**Для цитирования:** Помозов Т. В., Мурадымов М. З., Ткач Е. А., Явор М. И. Эффективность фокусирующей системы при транспортировке ионного тока в систему дифференциальной откачки масс-спектрометра // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 114–120. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17410>

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.17410>

### THE EFFICIENCY OF A FOCUSING SYSTEM WHEN ION CURRENT TRANSPORTING TO THE DIFFERENTIAL PUMPING SYSTEM OF A MASS SPECTROMETER

**T. V. Pomozov** <sup>✉</sup>, **M. Z. Muradymov**, **E. A. Tkach**, **M. I. Yavor**

Institute for Analytical Instrumentation RAS, St. Petersburg, Russia

<sup>✉</sup> [tim-kor@mail.ru](mailto:tim-kor@mail.ru)

**Abstract.** In this work, a charge particle beam transport in a corona discharge ion source with a thin diaphragm focusing system taking into account the gas-dynamic flow in the vicinity of the nozzle has been studied experimentally. The space of influence of the gas-dynamic flow on the ion transport in the vicinity of the nozzle was shown not to exceed two nozzle diameters. The results of comparing the efficiency of the ion beam transport in the ion source with using the focusing system and without it are presented. Using the focusing system allowed one to triple the current entering the collector and to raise the sum of currents entering the nozzle and collector by an order of magnitude.

**Keywords:** ion source, mass spectrometer, differential pumping system, focusing system, ion transport



**For citation:** Pomozov T. V., Muradymov M. Z., Tkach E. A., Yavor M. I., The efficiency of a focusing system when ion current transporting to the differential pumping system of a mass spectrometer, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 114–120. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17410>

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

## Введение

Источники ионов с ионизацией при атмосферном давлении давно используются в различных типах масс-спектрометров при решении широкого круга задач в самых разнообразных областях исследования вещества: протеомике, биоорганической химии, экологии, криминалистике и др. [1 – 3]. Главный общий недостаток таких источников – это существенные (два порядка и более от общего тока источника) потери трансмиссии ионного пучка при транспортировке из области ионизации с атмосферным давлением через сопло в первую ступень системы дифференциальной откачки (СДО) газодинамического интерфейса масс-спектрометра [4]. Предпринимаемые к настоящему времени попытки увеличения трансмиссии ионного пучка указывают на необходимость осуществления электростатической фокусировки ионов на сопло [5 – 9].

В работе [10] нами была исследована численно и экспериментально перспективная фокусирующая система из тонких диафрагм [11] в источнике ионов с коронным разрядом в стоячем газе; система продемонстрировала свою высокую эффективность и правильность подхода к выбору ее геометрии. Однако на транспортировку ионов в реальных ионных источниках с ионизацией при атмосферном давлении оказывает воздействие не только электростатическое поле, но и газодинамическое течение нейтрального газа в окрестности сопла (сток газа в сопло).

Поскольку численный расчет динамики движения ионов при таких условиях весьма затруднителен, цель данного экспериментального исследования – оценить эффективность транспортировки ионного пучка в источнике с фокусировкой в первую ступень СДО масс-спектрометра в присутствии газодинамического течения в окрестности сопла.

## Экспериментальная установка и средства измерения

Схема компактной экспериментальной установки для исследования транспортировки ионного тока из источника ионов с фокусирующей системой через сопло в первую ступень СДО показана на рис. 1.

Ионный источник с положительным коронным разрядом и фокусирующая система, состоящие из коронирующего острия *б* и набора изолированных друг от друга четырех тонких диафрагм *1–4*, детально описаны в наших работах [10, 11]. За четвертой диафрагмой с наименьшим диаметром отверстия, сформирована зона откачки, имитирующая первую ступень СДО газодинамического интерфейса. Таким образом, эта диафрагма представляет собой сопло, через которое осуществляется натекание газа из области атмосферного давления в область форвакуума. В вакуумной камере *δ* для измерения тока, проходящего за сопло, установлен коллектор *9*, выполненный в виде цилиндрического электрода толщиной 1,5 мм. Все электроды установки (кроме заземленного сопла) подключены к высокостабильным высоковольтным регулируемым блокам питания *26–30* и электрометрам *14–19*, регистрирующим токи, протекающие по электродам. Вакуумная камера *δ* откачивается масляным форвакуумным насосом *13* и оснащена устройствами контроля давления остаточного газа *11* и регулировки скорости откачки *12*. В конструкции экспериментальной установки предусмотрена возможность изменять расстояние от коронирующего острия *б* до противоиэлектрода *1* (первой диафрагмы фокусирующей системы) и положение коллектора *9* внутри зоны откачки.

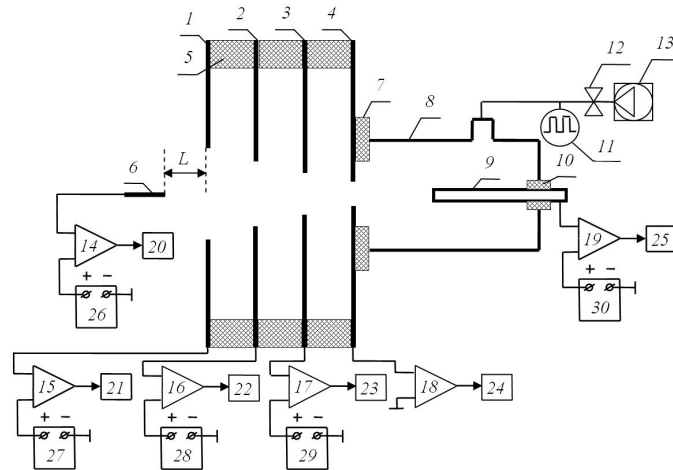


Рис. 1. Блок-схема экспериментальной установки:

1 – 4 – тонкие диафрагмы, 5 – керамические вставки, 6 – коронирующее острие, 7 – изолятор, 8 – вакуумная камера, 9 – коллектор (медный стержень), 10 – вильсоновское уплотнение, 11 – датчик вакуумного давления, 12 – вентиль, 13 – форвакуумный насос, 14–19 – электрометры, 20–25 – цифровые измерители токов, 26–30 – высокостабильные высоковольтные блоки питания.

Толщина тонких диафрагм составляет 0,1 мм, керамических вставок – 1 мм

### Результаты и обсуждение

Эффективность транспортировки ионного пучка в первую ступень СДО в рассматриваемом ионном источнике с фокусировкой определяется прежде всего величинами токов, регистрируемых на коллекторе  $I_c$  и сопле  $I_4$ . Кроме того, основные тенденции в перераспределении токов на электродах системы в зависимости от разности потенциалов между диафрагмами фокусирующей системы  $\Delta U$ , расстояния  $L$  от коронирующего острия до противоэлектрода и тока коронного разряда  $I_p$  в целом аналогичны таковым для рассматриваемой ранее системы в отсутствие газодинамического течения в окрестности сопла [10]. Поэтому ниже будут рассматриваться экспериментальные зависимости токов на коллекторе и сопле от давления в зоне откачки при следующих условиях:

ток коронного разряда  $I_p = 1$  мкА,

расстояние от коронирующего острия до противоэлектрода  $L = 7$  мм,

разность потенциалов между диафрагмами фокусирующей системы

$\Delta U$  варьировалось от  $-300$  до  $-900$  В,

давление  $p$  в вакуумной камере варьировалось от 750 до 9 Торр,

расстояние от сопла до коллектора – 10 мм,

потенциал коллектора  $U_c = -300$  В.

На рис. 2 представлены зависимости тока на коллекторе  $I_c$ , сопле  $I_4$  и суммы токов  $I_4 + I_c$  от давления в зоне откачки при разных значениях разности потенциалов  $\Delta U$  между электродами фокусирующей системы. Повышение разности потенциалов  $\Delta U$  с  $-300$  до  $-900$  В сопровождается ростом регистрируемого тока на коллекторе  $I_c$  примерно в 1,5 раза (это составляет около 6,7 % от общего тока коронного разряда) и ростом тока на сопле  $I_4$  примерно в 3,4 раза при давлении в вакуумной камере 9 Торр вследствие усиления фокусирующих свойств системы.

Анализ распределений токов, приходящих на электроды, показывает, что токи, регистрируемые на первых трех диафрагмах фокусирующей системы, практически не зависят от давления в зоне откачки. Отсюда можно заключить, что область влияния газодинамического течения (стока в сопло) не превышает диаметра отверстия в третьей диафрагме (1,2 мм) при диаметре сопла 0,5 мм. Таким образом, протяженность области влияния газодинамического течения можно оценить как два диаметра сопла.

Снижение давления за соплом сопровождается повышением массового расхода воздуха. Увеличение этого расхода ограничено достижением скорости звука в критическом сечении сопла, которое происходит при давлении около 230 Торр, когда сумма токов на сопле и коллекторе  $I_4 + I_c$  становится практически неизменной (см. рис. 2).

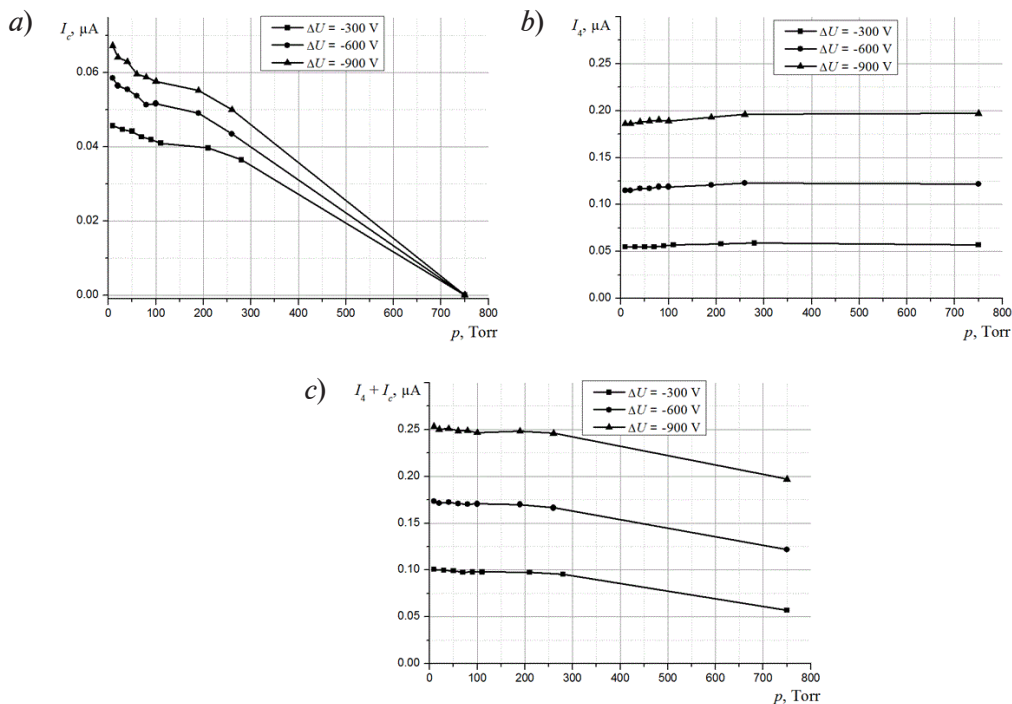


Рис. 2. Токовые характеристики ионного источника с фокусирующей системой: зависимости токов  $I_c$ , приходящих на коллектор (а),  $I_4$ , приходящих на сопло (б), и суммы  $I_4 + I_c$  (с) от давления в вакуумной камере для разных значений разности потенциалов  $\Delta U$  между диафрагмами

Целесообразность использования фокусирующей системы с тонкими диафрагмами можно оценить, если сравнить эффективности транспортировки ионного пучка в первую ступень СДО в источнике ионов с фокусирующей системой и в ее отсутствие; в последнем случае достаточно заменить широкие изоляторы между диафрагмами в рассматриваемой схеме (см. рис. 1) на тонкие фторопластовые прокладки толщиной 0,1 мм. В этом случае исходная система из тонких диафрагм преобразуется в заземленный квазиплоский противозлектрод.

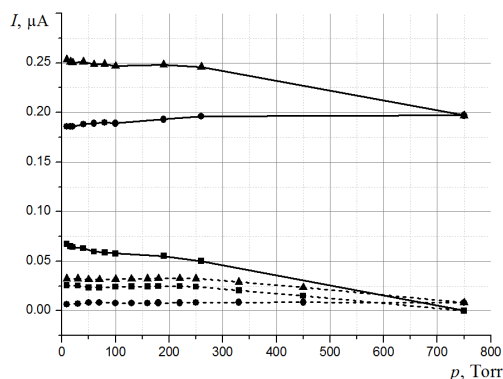
Сравнение зависимостей токов, регистрируемых на коллекторе ( $I_c$ ), сопле ( $I_4$ ), и суммы токов  $I_4 + I_c$  от давления в вакуумной камере в источнике ионов с фокусировкой при  $\Delta U = -900\text{ В}$  и в схеме с квазиплоским противозлектродом представлено на рис. 3.

Полученные экспериментальные результаты демонстрируют трехкратный рост тока на коллекторе  $I_c$  и увеличение почти на порядок (приблизительно в 8 раз) суммы токов  $I_4 + I_c$ , регистрируемых на сопле и коллекторе при использовании фокусирующей системы при заданных условиях эксперимента.

Влияние газодинамического течения в окрестности сопла на транспортировку ионного пучка можно оценить, если сравнить приведенные в таблице значения приходящих на сопло и коллектор токов в источнике ионов с фокусирующей системой в стоячем газе и с откачкой.

Из представленных данных видно, что газодинамическое течение, несмотря на ограниченную пространственную область воздействия, существенно повышает эффективность транспортировки ионов за сопло и сопровождается ростом тока на коллекторе  $I_c$  примерно в 4,5 раза и увеличением суммы токов  $I_4 + I_c$  в 2,5 раза. Практически аналогичное увеличение токов на сопле и коллекторе экспериментально наблюдается и в схеме источника ионов без фокусировки с откачкой.

Таблица



Сравнение значений токов на коллекторе и суммы токов, приходящих на сопло и коллектор в ионном источнике, при разных условиях эксперимента

Обозначение тока в ионном источнике	Значение тока, нА		$I_2 / I_1$
	$I_1$	$I_2$	
$I_c$	15	67	4,47
$I_4 + I_c$	100	253	2,53

Рис. 3. Сравнение зависимостей от давления токов  $I_c$ , приходящих на коллектор (■),  $I_4$ , приходящих на сопло (●), и суммы  $I_4 + I_c$  (▲) в ионном источнике с фокусировкой ( $\Delta U = -900$  В, сплошные линии) и без нее (пунктиры)

Обозначения:  $I_c$  – ток на коллекторе;  $I_4$  – ток, приходящий на сопло;  $I_1$  – токи, протекающие в ионном источнике с фокусировкой в стоячем газе;  $I_2$  – токи там же, но при откачке газа за соплом. Остальные условия эксперимента:  $I_p = 1$  мкА,  $L = 7$  мм,  $\Delta U = -900$  В.

### Заключение

В настоящей работе экспериментально исследована эффективность транспортировки ионного пучка в первую ступень СДО с использованием фокусирующей системы на основе тонких диафрагм в источнике с коронным разрядом с учетом как электростатической фокусировки ионов, так и газодинамических эффектов в окрестности сопла. Область влияния газодинамического течения (стока в сопло) на перераспределение ионного тока не превышала двух диаметров сопла. Тем не менее, газодинамическое течение существенно повышает эффективность транспортировки ионного пучка за сопло.

Полученные результаты могут служить основой для дальнейшего совершенствования конструкции источников ионов с ионизацией при атмосферном давлении с целью увеличения чувствительности масс-спектрометра.

Поскольку электростатическая фокусировка ионного пучка сопровождается ростом почти на порядок величины тока, регистрируемого на сопле, одной из перспективных модификаций рассмотренной ионно-оптической схемы источника представляется увеличение диаметра сопла, с организацией дополнительной области дифференциальной откачки. Это направление и планируется как естественное продолжение наших исследований.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Галль Л. Н., Баженов А. Н., Шкуров В. А., Бабаин В. А., Галль Н. Р. Масс-спектрометрия ЭРИАД как новый метод изотопного и элементного анализа // Масс-спектрометрия. 2007. Т. 4. № 1. С. 11–18.
2. Лебедев А. Т. Масс-спектрометрия в органической химии. М: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2003. 494 с.
3. Covey T. R., Thomson B. A., Schneider B. B. Atmospheric pressure ion sources // Mass Spectrometry Reviews. 2009. Vol. 28. No. 6. Pp. 870–897.
4. Willoughby R. C., Sheehan E. W., Fries D. Transmission of ions through laminated conductance pathways from atmospheric pressure. Режим доступа: [http://www.lcms.com/products/pdf/ion\\_conductance\\_asms\\_2004\\_abstract.pdf](http://www.lcms.com/products/pdf/ion_conductance_asms_2004_abstract.pdf) (Дата обращения: 01.12.2022).
5. Sheehan E. W., Willoughby R. C. Apparatus and method for focusing ions and charged particles at atmospheric pressure. United State Patent No. 6744041B2 (2004).
6. Андреева А. Д., Мурадымов М. З., Курнин И. В., Галль Л. Н. Электростатическая фокусировка ионов в газодинамических интерфейсах масс-спектрометров // Научное приборостроение. 2006. Т. 16. № 3. С. 80–87.



7. Кузьмин Д. А., Мурадымов М. З., Краснов Н. В., Помозов Т. В., Арсеньев А. Н. Транспортировка ионов в источниках с ионизацией при атмосферном давлении. I. Субстантивная геометрия // Научное приборостроение. 2017. Т. 27. № 4. С. 8–16.
8. Кузьмин Д. А., Мурадымов М. З., Краснов Н. В., Помозов Т. В., Арсеньев А. Н., Краснов М. Н. Транспортировка ионов в источниках с ионизацией при атмосферном давлении. II. Инверсная геометрия // Научное приборостроение. 2017. Т. 27. № 4. С. 17–23.
9. Arseniev A. N., Kurnin I. V., Krasnov N. V., Muradymov M. Z., Yavor M. I., Pomozov T. V., Krasnov M. N. Optimization of ion transport from atmospheric pressure ion sources // International Journal for Ion Mobility Spectrometry. 2019. Vol. 22. No. 1. Pp. 31–38.
10. Помозов Т. В., Мурадымов М. З., Ткач Е. А. Эффективность фокусирующей системы на основе тонких диафрагм в ионном источнике с коронным разрядом // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 2. С. 52–60.
11. Помозов Т. В., Краснов Н. В. Влияние особенностей электрического поля в системе диафрагм на транспортировку потока заряженных частиц при атмосферном давлении // Научное приборостроение. 2021. Т. 31. № 3. С. 3–9.

## REFERENCES

1. Gall L. N., Bazhenov A. N., Shkurov V. A., et al., ERIAD (ESI) mass spectrometry as a new method of isotopic and elemental analysis, Mass-Spektrometriya [Mass Spectrometry]. 4 (1) (2007) 11–18 (in Russian).
2. Lebedev A. T., Mass-spektrometriya v organicheskoy khimii [Mass spectrometry in organic chemistry], Publishing House BINOM, Knowledge Laboratory, Moscow, 2003 (in Russian).
3. Covey T. R., Thomson B. A., Schneider B. B., Atmospheric pressure ion sources, Mass Spectrom. Rev. 28 (6) (2009) 870–897.
4. Willoughby R. C., Sheehan E. W., Fries D., Transmission of ions through laminated conductance pathways from atmospheric pressure, [http://www.lcms.com/products/pdf/ion\\_conductance\\_asms\\_2004\\_abstract.pdf](http://www.lcms.com/products/pdf/ion_conductance_asms_2004_abstract.pdf). Accessed December 01, 2022.
5. Sheehan E. W., Willoughby R. C., Apparatus and method for focusing ions and charged particles at atmospheric pressure, United State Patent, No. 6744041B2 (2004).
6. Andreyeva A. D., Muradymov M. Z., Kurnin I. V., Gall L. N., An electrostatic focusing effect in the gas dynamical interface of the mass spectrometer, Nauchnoe Priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 16 (3) (2006) 80–87 (in Russian).
7. Kuzmin D. A., Muradymov M. Z., Krasnov N. V., et al., Transport of ions in sources with ionization at atmospheric pressure. I. Substantive geometry, Nauchnoe Priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 27 (4) (2017) 8–16 (in Russian).
8. Kuzmin D. A., Muradymov M. Z., Krasnov N. V., et al., Transport of ions in sources with ionization at atmospheric pressure. II. Inverse geometry, Nauchnoe Priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 27 (4) (2017) 17–23 (in Russian).
9. Arseniev A. N., Kurnin I. V., Krasnov N. V., et al., Optimization of ion transport from atmospheric pressure ion sources, Int. J. Ion Mobil. Spectrom. 22 (1) (2019) 31–38.
10. Pomozov T. V., Muradymov M. Z., Tkach E. A., The efficiency of a focusing system based on thin diaphragms in the ion source with a corona discharge, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 16 (2) (2023) 52–60 (in Russian).
11. Pomozov T. V., Krasnov N. V., Influence of features of the electric field in the diaphragm system on the transportation of the flow of charged particles at atmospheric pressure, Nauchnoe Priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 31 (3) (2021) 3–9 (in Russian).

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ПОМОЗОВ Тимофей Вячеславович** – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией медицинской масс-спектрометрии Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия.

198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31-33, лит. А.

tim-kor@mail.ru

ORCID: 0000-0001-8925-7600

**МУРАДЫМОВ Марат Зарифович** – старший научный сотрудник лаборатории медицинской масс-спектрометрии Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия.

198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31-33, лит. А.  
m.muradymov@gmail.com  
ORCID: 0000-0002-7969-496X

**ТКАЧ Егор Андреевич** – аспирант Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия.

198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31-33, лит. А.  
egorka765@gmail.com  
ORCID: 0009-0003-8001-7469

**ЯВОР Михаил Игоревич** – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник лаборатории оптики заряженных частиц и математического моделирования Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия.

198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31-33, лит. А.  
mikhail.yavor@gmail.com  
ORCID: 0000-0002-0547-987X

#### THE AUTHORS

**POMOZOV Timofey V.**

*Institute for Analytical Instrumentation, RAS*  
31-33, Ivan Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia  
tim-kor@mail.ru  
ORCID: 0000-0001-8925-7600

**MURADYMOV Marat Z.**

*Institute for Analytical Instrumentation, RAS*  
31-33, Ivan Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia  
m.muradymov@gmail.com  
ORCID: 0000-0002-7969-496X

**TKACH Egor A.**

*Institute for Analytical Instrumentation, RAS*  
31-33, Ivan Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia  
egorka765@gmail.com  
ORCID: 0009-0003-8001-7469

**YAVOR Mikhail I.**

*Institute for Analytical Instrumentation RAS*  
31-33, Ivan Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia  
mikhail.yavor@gmail.com  
ORCID: 0000-0002-0547-987X

*Статья поступила в редакцию 10.05.2024. Одобрена после рецензирования 01.07.2024. Принята 01.07.2024.*

*Received 10.05.2024. Approved after reviewing 01.07.2024. Accepted 01.07.2024.*



Научная статья


УДК 533.9.01

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17411>

## ИОННАЯ ДИФФУЗИЯ В ПЕРИФЕРИЙНУЮ ОБЛАСТЬ ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА В ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНЫХ ГАЗАХ

А. П. Головицкий 

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

 alexandergolovitski@yahoo.com

**Аннотация.** В работе теоретически изучено влияние диффузионного проникновения отрицательных ионов из центральной области ион-ионной плазмы на электрон-ионную плазму периферийной области положительного столба тлеющего разряда в сильно электроотрицательных газах. Показано, что такое проникновение отвечает за образование в периферийной области профиля концентрации электронов, близкого к линейному, а также приводит к существенному сокращению поперечного размера области. Получены явные приближенные аналитические выражения для параметров профиля электронной концентрации. Результаты специально проведенного вычислительного эксперимента были сопоставлены с таковыми, полученными через приближенное решение, и установлено их хорошее согласие (погрешность не превысила 13 %). Проведенное исследование важно для корректных количественных оценок скорости ионизации, электронной температуры и продольного поля в положительном столбе электроотрицательного разряда.

**Ключевые слова:** отрицательные ионы, плазма тлеющего разряда, расслоение плазмы, ионная диффузия

**Для цитирования:** Головицкий А. П. Ионная диффузия в периферийную область тлеющего разряда в электроотрицательных газах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 121–129. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17411>

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.17411>

## IONIC DIFFUSION INTO THE PERIPHERAL AREA OF A GLOW DISCHARGE IN THE ELECTRONEGATIVE GASES

A. P. Golovitskii 

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

 alexandergolovitski@yahoo.com

**Abstract.** In the paper, the effect of negative ion diffusive penetration from the central space representing the ion-ion plasma on the electron-ion plasma located in the peripheral area of a positive column of a glow discharge in the strong electronegative gases has been studied. The said penetration was shown to be responsible for formation of an electron density profile being close to linear within the peripheral area and also for sufficient reduction of its transverse size. The explicit approximate analytic expressions for parameters of electron density profile were found. The results of a specially conducted computational experiment were compared with those obtained through the approximate solution, and their good agreement was established (the error did not exceed 13%). The research carried out is important for correct quantitative evaluations of ionization rate, electron temperature and a longitudinal field in a positive column of an electronegative glow discharge.

**Keywords:** negative ions, glow discharge plasma, plasma stratification, ionic diffusion

**For citation:** Golovitskii A. P., Ionic diffusion into the peripheral area of a glow discharge in the electronegative gases, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 121–129. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17411>

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

### Введение

Для стационарной неизотермической плазмы положительного столба электроотрицательных газов характерно такое явление, как поперечное к току расслоение на области разного ионного состава и свойств. Причинами расслоения названной плазмы принято считать ее неизотермичность, а конкретно то, что электронная температура  $T_e$  существенно превышает ионную  $T_i$  ( $T_i \ll T_e$ ) наряду с наличием в плазме отрицательных ионов [1].

Кратко опишем эволюцию электроотрицательной плазмы к квазистационарному состоянию. Предположим, что в начальный момент времени условие строгой нейтральности плазмы при соизмеримых концентрациях заряженных частиц выполнено в любой ее точке. Такое состояние, однако, нельзя рассматривать как стационарное. Поскольку коэффициенты диффузии электронов  $D_e$  и ионов разных знаков  $D_p, D_n$  различны, т. е.  $D_e \gg D_p, D_n$ , должен начаться сильный диффузионный уход электронов из объема плазмы к стенкам разрядной трубки. В плазме возникает положительный заряд и появляется электрическое поле  $E_x$ , сдерживающее дальнейший уход электронов. Такой процесс имеет место в любой плазме. Но конкретно в электроотрицательной плазме это же поле вызывает дрейф отрицательных ионов от периферии к центру, так как  $T_n \ll T_e$  ( $T_n$  – температура отрицательных ионов). Отрицательные ионы как бы «занимают места» электронов, ушедших ранее к стенкам. Таким образом, концентрация отрицательных ионов  $n_n$  на периферии снижается, а в объеме повышается; при этом положительный заряд, вызванный уходом электронов, нейтрализуется приходом отрицательных ионов, стягиваемых к центру. Это ослабляет поле  $E_x$ , тормозившее электроны, и приводит к продолжению их свободной диффузии с большим коэффициентом (порядка  $D_e$ ). При наступлении квазистационарного состояния описанные процессы приводят к следующим эффектам:

во-первых, к падению градиента и величины концентрации электронов  $n_e$  в объеме плазмы, а также к «уплощению» пространственного распределения  $n_e$ ;

во-вторых, к накоплению отрицательных ионов в объеме и к спаду  $n_n$  в периферийной области (далее будет применяться термин «оболочка» плазмы).

Оболочка почти не содержит отрицательных ионов и в итоге превращается в обычную электрон-ионную ( $e-i$ ) плазму, в которой выполняется соотношение концентраций

$$n_e \approx n_p \gg n_n$$

( $n_p$  – концентрация положительных ионов) и существует электрическое поле  $E_x$ , уносящее отрицательные ионы в центр, тормозящее основную массу электронов и увлекующее положительные ионы к стенке. Другими словами, в оболочке реализуется режим ухода заряженных частиц на стенку, близкий к амбиполярному. Для такого режима характерно формирование в оболочке потенциального барьера высотой порядка нескольких  $T_e$ . Преодолеть его и уйти на стенки отрицательные ионы не могут, ввиду неизотермичности плазмы ( $T_n \ll T_e$ ). По этой причине отрицательные ионы и рождаются, и гибнут (вследствие отлипания и/или ион-ионной рекомбинации) лишь внутри плазмы.

В центральной области (далее используется термин «сердцевина») концентрации ионов намного превышают концентрацию электронов:

$$n_p \approx n_n \gg n_e,$$

т.е. плазма здесь фактически становится ион-ионной ( $i-i$ ).

Поперечное поле  $E_x$  в такой плазме является слабым, и имеет место диффузия электронов, близкая к свободной, при почти плоском профиле концентрации электронов  $n_e$ .



В узкой переходной области между ( $i-i$ )- и ( $e-i$ )-плазмами имеются большие градиенты концентраций ионов (см. например, статьи [1, 2, 5 – 7]).

Отметим, что в опубликованных теоретических работах, посвященных анализу формы профилей концентрации заряженных частиц в электроотрицательной плазме, исследователи пренебрегали влиянием ионной диффузии; при этом профиль концентрации  $n_e$  у стенки газоразрядной трубки оказывался близким к синусоидальному. Влияние проникновения отрицательных ионов в оболочку вследствие конечной ионной диффузии фактически не учитывалось в разработке теорий, а сводилось лишь к общим разумным рассуждениям, что можно признать недостатком этих теорий.

Задачами данной работы являлись количественный анализ влияния конечной ионной диффузии на структуру плазмы в оболочке, а также вывод аналитических выражений, адекватно описывающих профили концентраций  $n_n$ ,  $n_e$  и толщину самой оболочки.

Решение указанных задач представляет не только чисто теоретический интерес, но и важно для корректных количественных оценок скорости ионизации, электронной температуры и продольного поля в положительном столбе электроотрицательного разряда, так как эти величины определяются размером оболочки (помимо свойств газового наполнения).

### Описание модели

В данной работе рассмотрен положительный столб тлеющего разряда низкого и среднего давления (до 30 Торр), когда электронная температура полагается постоянной по сечению разрядного прибора. Подобные разряды используются в мощных источниках УФ-излучения, а также в технологиях травления полупроводниковых материалов.

Исходные стационарные уравнения для компонентов потоков заряженных частиц  $\Gamma_j$ , поперечных току, и для их дивергенций имеют следующий вид [1, 2]:

$$\begin{aligned} \nabla \Gamma_e &= (v_i - v_a)n_e + v_d n_n; \\ \nabla \Gamma_p &= v_i n_e; \\ \nabla \Gamma_n &= v_a n_e - v_d n_n; \\ \Gamma_j &= -D_j \text{grad}_x(n_j) + z_j n_j \mu_j E_x; \\ \Gamma_p - \Gamma_n - \Gamma_e &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $v_i$ ,  $v_a$ ,  $v_d$  – частоты ионизации, прилипания и отлипания (*англ.* ionization, attachment, detachment);  $z_j$  – знак заряда;  $n_j$ ,  $\mu_j$  – концентрации и подвижности частиц  $j$ -го сорта,  $\mu_j = \text{const}$ ;  $\Gamma_e$ ,  $\Gamma_p$ ,  $\Gamma_n$  – потоки электронов, а также положительно и отрицательно заряженных ионов, соответственно.

Здесь потоки и концентрации рассматриваются как одномерные функции пространственной координаты, перпендикулярной току разряда, – радиальной для цилиндрической геометрии или поперечной (по оси  $x$ ) для плоской геометрии, поэтому система (1) является скалярной и в ней фигурируют лишь соответствующие (радиальные или поперечные) компоненты оператора  $\nabla$ .

Граничные условия таковы:

$$n_e(x_w) = n_p(x_w) = n_n(x_w) = 0; \Gamma_n(x_w) = 0,$$

где  $x_w$  – абсолютная координата стенки, отсчитываемая от геометрического центра плазмы.

Здесь и далее использованы следующие обозначения:

$$\begin{aligned} v &= v_i / D_{ap}^*; \alpha = v_a / D_{an}^*; \beta = v_d / D_{an}^*; \\ D_{ap}^* &= \mu_p T_e / (ex_w^2); D_{an}^* = D_{ap}^* / \mu; \mu = \mu_p / \mu_n; \end{aligned}$$

$T_j$  – температуры частиц  $j$ -го сорта,  $T_j = \text{const}$  (полагаются константами); индексы  $e$ ,  $p$ ,  $n$  соответствуют электронам, положительным и отрицательным ионам;  $E_x$  – электрическое поле, поперечное направлению протекания тока и вызванное пространственным зарядом

плазмы;  $X = x/x_w$  – поперечная безразмерная координата;  $X_0$  – безразмерная координата границы раздела областей  $(e-i)$ -и  $(i-i)$ -плазм;  $n_{e0}$  – электронная концентрация в центре плазмы при  $X = 0$ ;

$$n(X) = n_e(X)/n_{e0}; N(X) = n_n(X)/n_{e0}; P(X) = n_p(X)/n_{e0}.$$

Для простоты положим ионные температуры равными, т. е.  $T_i = T_p = T_n$  и обозначим  $\tau = T_i/T_e$ .

### Анализ процессов, происходящих в тлеющем разряде в электроотрицательных газах

Уравнения (1) можно преобразовать к следующему, удобному для анализа виду с безразмерными переменными:

$$\left. \begin{aligned} -\Delta N \tau + \nabla \left( \frac{N}{n} \nabla n \right) &= \alpha n - \beta N; \\ -\Delta P \tau - \nabla \left( \frac{P}{n} \nabla n \right) &= \nu n. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

В тех местах оболочки, где мало отрицательных ионов, т.е.  $N \rightarrow 0$  (непосредственно у стенки, где поле  $E_x$  сильное и способно вытеснить эти ионы в сердцевину), можно принять  $n \approx P$  и пренебречь ионной диффузией, по сравнению с сильным ионным дрейфом [1], т. е. принять там  $\tau \rightarrow 0$ . Тогда систему (2) можно свести к однородному линейному уравнению относительно  $n(X)$ :

$$\Delta n = -(\alpha + \nu)n.$$

Его решение при нулевом граничном условии на стенке  $n(1) = 0$  в плоской геометрии таково:

$$n(X) \approx n_1 \sin \left[ \sqrt{\nu + \alpha} (1 - X) \right]. \quad (3)$$

В нашей статье [5] показано, что при  $\alpha \gg 1$  (случай сильной электроотрицательности; ограничимся далее этим случаем) оболочка будет тонкой, поэтому решение (3) верно и для цилиндрической геометрии. Абсолютная величина  $n_1$  будет оценена ниже (см. далее выражение (6)).

Из системы (2) следует, что

$$\frac{N}{n} \frac{dn}{dX} \approx \alpha \int_0^Y n(Y) dY,$$

где  $Y = 1 - X$ .

Отсюда, с учетом решения (3), можно получить:

$$N(Y) \approx \frac{\alpha n_1}{\nu + \alpha} \left[ \operatorname{tg}(\sqrt{\nu + \alpha} Y) - \sin(\sqrt{\nu + \alpha} Y) \right]. \quad (4)$$

Проведем анализ полученного выражения. При  $X \rightarrow 1 - \delta$ , где

$$\delta = \frac{\pi}{2} \frac{1}{\sqrt{\nu + \alpha}}, \quad (4a)$$

будет  $N(X) \rightarrow \infty$ , а также, согласно выражению (3), будет  $\frac{dn}{dX} \rightarrow 0$  и поле в плазме

$$E_x \propto -T_e \frac{1}{n} \frac{dn}{dX} \rightarrow 0.$$

Последнее позволило в нашей работе [5] (при допущении  $\tau \rightarrow 0$ ) положить величину  $X_0 = 1 - \delta$  границей раздела  $(i-i)$ - и  $(e-i)$ -плазм, ибо поле  $E_x$  уносит отрицательные ионы из оболочки в объем, формируя сердцевину  $(i-i)$ -плазмы, а в обратную сторону, в пренебрежении ионной диффузией при  $\tau \rightarrow 0$ , отрицательные ионы двигаться не могут.

Оценим величину  $\left. \frac{dn}{dX} \right|_{X=1}$  у стенки при  $\tau > 0$ . На границе оболочка – стенка идет амбиполярный уход на стенку равных потоков электронов и положительных ионов, которые направлены к стенке [1, 5, 7].

С одной стороны, из данных статьи [5] (см. там уравнение (27) вида

$$F_p(X) = \Gamma_p(X) / (D_{ap}^* x_W n_{e0})$$

для приведенного потока положительных ионов) следует, что у самой стенки этот поток выражается как

$$F_p(1) = -(1 + \tau) \left. \frac{dn}{dX} \right|_{X=1}.$$

С другой стороны, поток положительных ионов на стенку вырабатывается ионизацией, происходящей во всей плазме, т. е. на стенку в итоге приходит поток

$$F_p(1) \approx v \int_0^1 n(X) X^\gamma dX,$$

где  $\gamma = 0$  в плоской геометрии и  $\gamma = 1$  в цилиндрической геометрии.

Приравнивая друг к другу эти выражения для  $F_p(1)$ , имеем:

$$\left. \frac{dn}{dX} \right|_{X=1} \approx -\frac{v}{1 + \tau} \int_0^1 n(X) X^\gamma dX.$$

Для случая  $\alpha \gg 1$  оболочка тонкая и основной вклад в интеграл дает сердцевина, а в ней при  $\alpha \gg 1$  концентрация  $n(X)$  мало отличается от единицы [1, 2, 5]. Тогда

$$\left. \frac{dn}{dX} \right|_{X=1} \approx -\frac{v}{(1 + \tau)(1 + \gamma)}. \quad (5)$$

Поток отрицательных ионов направлен от периферии к центру плазмы, а у самой стенки  $N(1) = 0$ , следовательно, там выполняется приближенное равенство (3), а тогда

$$\left. \frac{dn}{dX} \right|_{X=1} \approx -n_1 \sqrt{v + \alpha}.$$

Сопоставляя это приближенное равенство с выражением (5), получим:

$$n_1 \approx \frac{v}{(1 + \tau)(1 + \gamma)\sqrt{v + \alpha}}. \quad (6)$$

### Результаты вычислительного эксперимента и их обсуждение

Выражение (5) дает значения  $\left. \frac{dn}{dX} \right|_{X=1}$ , хорошо соответствующие вычислительному эксперименту, отклонение не превышает 13%. Результаты вычислительного эксперимента представлены в таблице, где для примера приняты значения  $\alpha = 25$ ,  $\beta = 1$  и геометрия плазмы считается плоской.

Вычислительный эксперимент представляет собой строгое численное решение системы (2) как задачи на собственные значения (подробно о нем см. в нашей работе [5]). К вычислительному эксперименту и к математическому моделированию в физике электроотрицательных разрядов часто прибегают вплоть до настоящего времени [2 – 4, 8 – 10], ввиду отсутствия количественной информации о пространственной структуре электроотрицательных разрядов, полученной в реальных экспериментах, – из-за сложности выполнения и интерпретации экспериментальных данных. Отмеченное в таблице соответствие все же косвенно свидетельствует об адекватности использованных в данной работе теоретических приближений.

Как видно из таблицы, величина  $n_1$  при  $\tau \geq 0,005$  может значительно превзойти единицу. Это не входит в противоречие ни с уравнением для  $n(X)$  в оболочке (которое, как отмечалось, является однородным), ни с его решением (3). Но по определению  $n(X) \leq 1$ ,

Таблица

**Сопоставление результатов вычислительного эксперимента и полученного приближенного решения**

Значение параметра		Результат решения					
		Вычислительный эксперимент		Приближенное, по формуле			
				(5)	(8)	(6)	(4a)
$\tau$	$\nu$	$\left. \frac{dn}{dX} \right _{X=1}$	$X_0$	$\left. \frac{dn}{dX} \right _{X=1}$	$X_0$	$n_1$	$1-\delta$
0,003	6,15	-5,44	0,76	-6,14	0,84	1,1	0,72
0,010	7,63	-6,77	0,86	-7,55	0,87	1,3	0,73
0,050	13,65	-12,01	0,94	-13,0	0,923	2,1	0,75
0,100	20,67	-17,12	0,97	-18,8	0,95	2,8	0,77

Обозначения:  $\tau$  – отношение ионной температуры к электронной;  $\nu$  – нормализованная частота ионизации;  $X_0$  – безразмерная координата перехода оболочка – сердцевина при конечных значениях  $\tau$ ;  $n_1$  – максимум электронной концентрации в оболочке согласно выражениям (3) и (6), в пренебрежении ионной диффузией;  $1 - \delta$  – координата перехода оболочка – сердцевина, в пренебрежении ионной диффузией.

Примечание. Приняты значения нормализованных частот прилипания и отлипания отрицательных ионов  $\alpha = 25$ ,  $\beta = 1$ , соответственно, и геометрия плазмы считается плоской.

поэтому при шивке  $n(X)$  на границе оболочка – сердцевина величина  $n(X)$  обязана быть ограничена сверху единицей. Следовательно,  $n(X)$  в оболочке при  $\tau > 0$ , имея синусоидальную зависимость (3) от  $X$ , не достигает ее максимума, а поэтому толщина оболочки должна быть меньшей, чем величина  $\delta$ . Отсюда также вытекает, что зависимость  $n(X)$  в оболочке при  $\tau \geq 0,005$  оказывается близкой к линейной части кривой (3), т. е.

$$n(X) \Big|_{\substack{X_0 < X < 1 \\ \alpha \gg \beta}} \approx (1 - X) \frac{\nu}{(1 + \tau)(1 + \gamma)}, \quad (7)$$

что подтверждается результатами вычислительного эксперимента (см. рис. 1, а).

Физически, близость к линейности  $n(X)$  в оболочке вблизи стенки обусловлена диффузионным проникновением отрицательных ионов со стороны сердцевины в оболочку. Это вызывает нейтрализацию ими поля  $E_x$  в оболочке вблизи границы с сердцевиной – около максимума синусоидальной зависимости (3) – там, где поле  $E_x$  слабое, а вид зависимости (3) – нелинеен. Нейтрализация  $E_x$  способствует и уходу электронов к стенке в режиме свободной, а не амбиполярной диффузии, что сглаживает электронный профиль вблизи границы с сердцевиной, делая его близким к характерному для самой сердцевины (см. рис. 1,а). Ионная диффузия таким образом способствует увеличению поперечного размера сердцевины ( $i$ -)плазмы и сокращению размера пристеночной области ( $e$ -)плазмы (см. рис. 1,б), т. е. области, которая свободна от отрицательных ионов и где выполняется соотношение (3). Вследствие такого сокращения, от зависимости (3) остается лишь ее участок вблизи самой стенки, близкий к линейному.

Данные, показанные на рис. 1, легко переводятся в абсолютные размерные значения концентраций умножением на величину  $n_{e0}$ . Эта величина зависит и от тока разряда, и от состава газового наполнения. Обычно  $n_{e0}$  определяют экспериментально по току разряда с использованием либо теоретической зависимости профиля  $n(X)$ , либо полученной путем вычислительного эксперимента. Например, для разрядов в смесях инертных газов и хлора, используемых как источники мощного УФ-излучения, значения величины  $n_{e0}$  при плотностях токов до 15 мА/см<sup>2</sup> лежат в диапазоне  $(0,4 - 3,0) \cdot 10^{10}$  см<sup>-3</sup>.

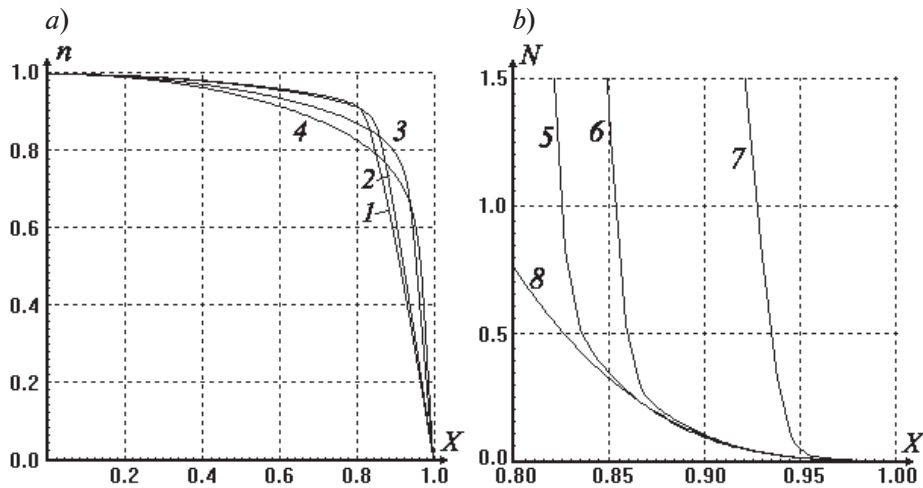


Рис. 1. Профили концентраций электронов (а) и отрицательных ионов (b), полученных путем вычислительного эксперимента при  $\alpha = 25$ ,  $\beta = 1$  и в плоской геометрии:  $\tau = 0,005$  (1, 5),  $0,010$  (2, 6),  $0,050$  (3),  $0,100$  (4, 7); для сравнения представлена зависимость по формуле (9) при  $\alpha = 25$  (кривая 8)

Оценим величину  $X_0$ , т. е. координату перехода оболочка – сердцевина при конечных значениях  $\tau$ . При  $\tau \geq 0,005$  для  $n(X)$  в оболочке можно принять линейную зависимость (7). Поскольку  $n_1 > 1$  (см. таблицу), а в сердцевине при сильной электроотрицательности (при  $\alpha \gg 1$ ) должно быть  $n(X) \approx 1$ , то в первом приближении  $X_0$  можно рассчитать как абсциссу точки пересечения зависимости (7) с единицей. Тогда получим формулу

$$X_0 \approx 1 - \frac{(1+\tau)(1+\gamma)}{\nu}. \quad (8)$$

При  $\tau \geq 0,005$  формула (8) обеспечивает весьма неплохое согласие с данными вычислительного эксперимента (см. таблицу). Величина  $1 - X_0$  может оказаться гораздо меньше, чем  $\delta$  (по сравнению со случаем пренебрежения ионной диффузией, см. рис. 1, b). Следовательно, для  $N(X)$  в оболочке в таких случаях можно вместо выражения (4) принять первый член его разложения в ряду Тейлора:

$$N(X) \approx \frac{\alpha\nu}{2(1+\tau)(1+\gamma)}(1-X)^3. \quad (9)$$

Лишь при нереально малых  $\tau \rightarrow 0$  (порядка 0,001 и меньше) соответствие результатов расчетов по формуле (8) таковым, полученным путем вычислительного эксперимента, ухудшается; лучшие результаты тогда дает формула  $X_0 \approx 1 - \delta$ . Величины частоты ионизации  $\nu$  в таблице взяты из вычислительного эксперимента, однако для априорных оценок  $\nu$  можно воспользоваться и аналитическими формулами из наших статей [5, 6], так как результаты оказываются близкими.

### Заключение

В заключение следует заметить, что ионная температура не может сделаться ниже температуры нейтрального газа, которая в реальных газовых разрядах, как правило, превышает 400 К; таким образом, значения  $\tau$  обычно составляют 0,01 и более. Как видно из таблицы, учет влияния ионных температур в таких случаях необходим, так как иначе могут возникнуть серьезные погрешности априорных модельных расчетов толщины оболочки и зависящих от нее энергетических параметров электроотрицательной плазмы, таких как электронная температура и частота ионизации.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Цендин Л. Д.** Расслоение газоразрядной плазмы в электроотрицательных газах // Журнал технической физики. 1989. Т. 59. № 1. С. 21–28.
2. **Franklin R. N., Snell J.** The recombination-dominated positive column with finite ion temperature // Journal of Physics D: Applied Physics. 1994. Vol. 27. No. 10. Pp. 2102–2106.
3. **Dhawan R., Malik H. K.** Modelling of electronegative collisional warm plasma for plasma-surface interaction process // Plasma Science and Technology. 2021. Vol. 23. No. 4. P. 045402.
4. **Dhawan R., Malik H. K.** Sheath characteristics in plasma carrying finite mass negative ions and ionization at low frequency // Chinese Journal of Physics. 2020. Vol. 66. August. Pp. 560–572.
5. **Головицкий А. П., Цендин Л. Д.** Простые аналитические формулы для оценки параметров положительного столба тлеющего разряда в электроотрицательных газах // Журнал технической физики. 2014. Т. 84. № 3. С. 44–49.
6. **Головицкий А. П.** Простые аналитические формулы для оценки параметров положительного столба электроотрицательного тлеющего разряда при наличии галогенов в составе газовой смеси // Журнал технической физики. 2014. Т. 84. № 11. С. 21–30.
7. **Богданов Е. А., Кудрявцев А. А., Цендин Л. Д., Арсланбеков Р. Р., Колобов В. И., Кудрявцев В. В.** Обоснование двухтемпературной кинетической ( $2T$  fluid) модели с помощью сопоставления кинетического и fluid расчетов при моделировании плазмы положительного столба кислородного разряда постоянного тока // Журнал технической физики. 2003. Т. 73. № 8. С. 45–55.
8. **Paul R., Adhikari S., Moulick R., Kausik S. S., Saikia B. K.** Magnetized plasma sheath in the presence of negative ions // Physics of Plasmas. 2020. Vol. 27. No. 6. P. 063520.
9. **El Bojaddaini M., El Kaouini M., Chatei H.** Sheath structure behavior in collisional non-extensive plasma with negative ions // The European Physical Journal Plus. 2024. Vol. 139. No.5. P. 373.
10. **Dhawan R., Malik H. K.** Sheath formation criterion in collisional electronegative warm plasma // Vacuum. 2020. Vol. 177. No. 6. P. 109354.

## REFERENCES

1. **Tsendin L. D.**, Plasma stratification in a discharge in an electronegative gas, *Sov. Phys. Tech. Phys.* 34 (1) (1989) 11–15.
2. **Franklin R. N., Snell J.**, The recombination-dominated positive column with finite ion temperature, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 27 (10) (1994) 2102–2106.
3. **Dhawan R., Malik H. K.**, Modelling of electronegative collisional warm plasma for plasma-surface interaction process, *Plasma Sci. Technol.* 23 (4) (2021) 045402.
4. **Dhawan R., Malik H. K.**, Sheath characteristics in plasma carrying finite mass negative ions and ionization at low frequency, *Chin. J. Phys.* 66 (Aug) (2020) 560–572.
5. **Golovitskii A. P., Tsendin L. D.**, Simple analytic formulas for estimating the parameters of the positive column of a glow discharge in electronegative gases, *Tech. Phys.* 59 (3) (2014) 353–359.
6. **Golovitskii A. P.**, Simple analytic relations for estimating parameters of the positive column of an electronegative glow discharge in a halogen-containing gas mixture, *Tech. Phys.* 59 (11) (2014) 1599–1609.
7. **Bogdanov E. A., Kudryavtsev A. A., Tsendin L. D., et al.**, Substantiation of the two-temperature kinetic model by comparing calculations within the kinetic and fluid models of the positive column plasma of a dc oxygen discharge, *Tech. Phys.* 48 (8) (2003) 983–994.
8. **Paul R., Adhikari S., Moulick R., et al.**, Magnetized plasma sheath in the presence of negative ions, *Phys. Plasmas.* 27 (6) (2020) 063520.
9. **El Bojaddaini M., El Kaouini M., Chatei H.**, Sheath structure behavior in collisional non-extensive plasma with negative ions, *Eur. Phys. J. Plus.* 139 (5) (2024) 373.
10. **Dhawan R., Malik H. K.**, Sheath formation criterion in collisional electronegative warm plasma, *Vacuum.* 177 (6) (2020) 109354.



**СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ**

**ГОЛОВИЦКИЙ Александр Петрович** – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
alexandergolovitski@yahoo.com  
ORCID: 0000-0003-4292-0959

**THE AUTHOR**

**GOLOVITSKII Alexander P.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
alexandergolovitski@yahoo.com  
ORCID: 0000-0003-4292-0959

*Статья поступила в редакцию 30.05.2024. Одобрена после рецензирования 17.06.2024.  
Принята 17.06.2024.*

*Received 30.05.2024. Approved after reviewing 17.06.2024. Accepted 17.06.2024.*

## Ядерная физика

Научная статья

УДК 539.12

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17412>

### **АСИММЕТРИЯ СИВЕРСА В ГЛУБОКОНЕУПРУГОМ РАССЕЙАНИИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЛЕПТОНОВ НА ПОПЕРЕЧНО-ПОЛЯРИЗОВАННЫХ ПРОТОНАХ**

**Е. В. Музяев <sup>✉</sup>, Я. А. Бердников**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

<sup>✉</sup> [muzyaev.ev@edu.spbstu.ru](mailto:muzyaev.ev@edu.spbstu.ru)

**Аннотация.** В статье предложен алгоритм расчета, позволяющий получать значение асимметрии Сиверса в полуинклюзивном глубоконеупругом рассеянии заряженных лептонов на поперечно-поляризованном протоне с помощью генератора событий PYTHIA8 и плагина StringSpinner. Расчет был проведен в кинематике эксперимента COMPASS: мюон с энергией 160 ГэВ рассеивается на покоящейся протонной мишени. Показано, что с помощью предложенного алгоритма можно с высокой точностью определять асимметрию Сиверса конечного адрона.

**Ключевые слова:** полуинклюзивное глубоконеупругое рассеяние, поляризация, асимметрия, генератор событий

**Финансирование:** Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2024-0033).

**Для цитирования:** Музяев Е. В., Бердников Я. А. Асимметрия Сиверса в глубоконеупругом рассеянии заряженных лептонов на поперечно-поляризованных протонах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 130–137. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17412>

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.17412>

### **THE SIVERS ASYMMETRY IN DEEP INELASTIC CHARGED LEPTON SCATTERING ON A TRANSVERSE POLARIZED PROTON TARGET**

**E. V. Muzyaev <sup>✉</sup>, Ya. A. Berdnikov**

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

<sup>✉</sup> [muzyaev.ev@edu.spbstu.ru](mailto:muzyaev.ev@edu.spbstu.ru)

**Abstract.** In the paper, it has been proposed a calculation algorithm that allows obtaining the value of the Sivers asymmetry in semi-inclusive deep inelastic scattering of charged leptons on a transversely polarized proton using the event generator PYTHIA8 and the StringSpinner plug-in. The calculation was performed in the kinematics of the COMPASS experiment: a muon with an energy of 160 GeV scatters on a stationary proton target. The proposed algorithm was shown to make it possible to estimate high accurately the Sivers asymmetry of the final hadron.

**Keywords:** semi-inclusive deep inelastic scattering, polarization, Sivers asymmetry, event generator

**Funding:** The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2024-0033).

**For citation:** Muzyaev E. V., Berdnikov Ya. A., The Sivers asymmetry in deep inelastic charged lepton scattering on a transverse polarized proton target, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 130–137. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17412>

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

### Введение

Информация о внутренней структуре нуклонов совершенно необходима для познания природы взаимодействий, ответственных за образование атомных ядер. Поэтому изучение этой структуры относится к важнейшим проблемам современной физики элементарных частиц [1]. Особенно интересен вопрос, как характеристики кварков и глюонов, входящих в состав нуклона, влияют на его спин [2]. Одним из способов исследования спиновой структуры нуклона является изучение глубоконеупругого рассеяния (ГНР) [3]. Под глубоконеупругим рассеянием обычно подразумевается процесс рассеяния ультрарелятивистского лептона (электрона или мюона) на адроне (например, протоне) или на адронной системе (например, дейтроне). В данном случае речь идет о рассеянии, при котором лептон, регистрируемый в конечном состоянии, имеет заметно меньшую энергию, чем начальный лептон. Другими словами, при таком рассеянии имеет место достаточно большой сброс энергии налетающей частицы, который слабо изменяет направление движения относительно направления полета налетающего лептона [3].

В приближении однофотонного обмена (в случае, когда лептон взаимодействует с мишенью путем обмена виртуальным фотоном) процесс ГНР может быть представлен диаграммой Фейнмана (рис. 1).

В ГНР происходит множественное рождение адронов  $X$  при столкновениях заряженных лептонов (электронов или мюонов) высоких энергий с адронами. В таком процессе лептон взаимодействует с частицами, составляющими нуклон, – с партонами. Согласно партонной модели, предложенной Р. Фейнманом, партон – это точечноподобная частица (кварк  $q$  или глюон  $g$ ), которая несет часть импульса адрона  $h$  (в частности, протона) [4].

Явление множественного рождения адронов в ГНР называется адронизацией. Так именуется процесс формирования адронов из цветных объектов – кварков и глюонов. Физическая причина явления адронизации – неспособность кварков и глюонов существовать в свободном состоянии, так как в результате хромодинамического взаимодействия кварки и глюоны комбинируются в бесцветные частицы – адроны.

В физике ядра и элементарных частиц существует несколько моделей адронизации [5]: струнная фрагментация, независимая фрагментация и кластерная адронизация.

Одной из наиболее развитых моделей адронизации в физике элементарных частиц высоких энергий считается струнная фрагментация – процесс многократного разрыва глюонной струны между цветными кварками с образованием бесцветных адронов в местах разрыва [6]. При этом

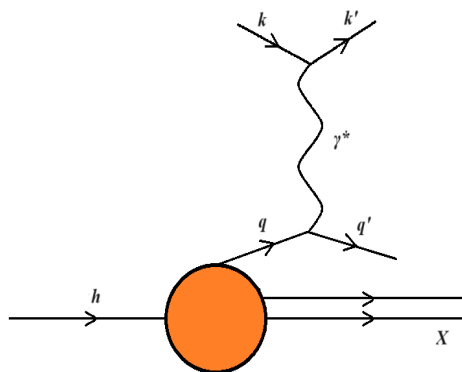


Рис. 1. Диаграмма Фейнмана для глубоконеупругого рассеяния (в однофотонном  $\gamma^*$ -обмене) лептона на кварке адрона с рождением большого числа частиц  $X$ :  $\gamma^*$  – виртуальный фотон;  $k, k'$  – налетающий и рассеянный лептон, соответственно;  $q, q'$  – кварк до и после взаимодействия, соответственно;  $h$  – адрон

образовавшиеся частицы, быстроты которых близки к скорости снаряда или мишени, называют «фрагментами» снаряда или мишени, соответственно.

Вероятность образования бесцветного адрона из фрагментирующей цветной струны описывается функцией фрагментации (ФФ). Чтобы сфрагментировать, кварк и антикварк, формирующие струну, должны обладать достаточной для этого энергией. Вероятность обнаружить в нуклоне партон (кварк), который обладает долей импульса нуклона при квадрате 4-импульса  $Q^2$ , переданном виртуальным фотоном, называется партонной функцией распределения (ПФР) [7].

В эксперименте Европейской мюонной коллаборации (ЕМС) было показано, что спин нуклона не равен суммарному спину валентных кварков. Данная проблема получила название «спиновый кризис» [8]. Для исследования этой проблемы были проведены эксперименты HERMES [9] и COMPASS [10], в которых рассматривались явления полуйнклюзивного (с рождением и регистрацией выделенного адрона) глубоконеупругого рассеяния (ПГНР) лептонов на поперечно-поляризованном протоне. Было показано [11], что наблюдается азимутальная асимметрия мезонов, образованных в процессе рассеяния. Возникновение азимутальных асимметрий связывается с поляризационными эффектами.

Моделирование процессов в Монте-Карло-генераторе событий PYTHIA8 [12] – это один из способов проверки теоретических моделей. На данный момент в PYTHIA8 не учтены эффекты поляризации, и поэтому для генерации событий с поляризованными частицами требуются сторонние плагины. Один из этих плагинов – StringSpinner [13], который включает в модель фрагментации поляризационные эффекты на основе  $^3P_0$ -модели [14]. Данный плагин создан для расчета асимметрии Коллинза, и результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментом [15].

Целью настоящей работы являлась разработка алгоритма и программы расчета асимметрии Сиверса в полуйнклюзивном глубоконеупругом рассеянии лептонов с использованием Монте-Карло-генератора событий PYTHIA8 и плагина StringSpinner.

### Методика исследования

Рассмотрим полуйнклюзивное глубоконеупругое рассеяние на поперечно-поляризованной протонной мишени в приближении однофотонного обмена:

$$l + p^\uparrow \rightarrow l' + h + X,$$

где  $l, l'$  – налетающий и рассеянный лептон, соответственно;  $p^\uparrow$  – поперечно-поляризованный протон;  $h$  – регистрируемый адрон,  $X$  – остальные частицы.

Схематическое представление процесса в виде трехмерной диаграммы показано на рис. 2.

На рис. 2 осями  $x_r, y_r, z_r$  обозначена система покоя мишени: ось  $z_r$  сонаправлена с импульсом рассеянного кварка; ось  $x_r$  лежит в плоскости, в которой происходит рассеяние; ось  $y_r$  перпендикулярна плоскости рассеяния.

Кинематику ПГНР удобно описывать с помощью переменной Бьёркена, которая означает долю импульса партона по отношению к импульсу нуклона [3]:

$$x_{\text{Бж}} = \frac{Q^2}{2Pq}, \quad (1)$$

где  $Q^2 = -q^2$  – квадрат 4-импульса виртуального фотона  $\gamma^*$ ;  $P$  – 4-импульс протона-мишени.

Кроме этого, введем переменную  $y$  – долю энергии налетающего лептона, передаваемую виртуальному фотону [3]:

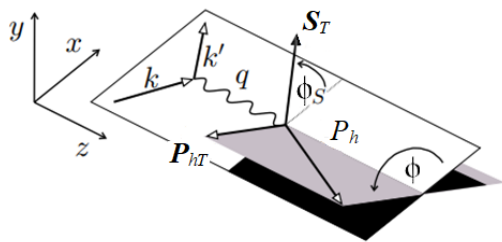


Рис. 2. Диаграмма процесса полуйнклюзивного глубоконеупругого рассеяния в приближении однофотонного обмена [9]:

$k, k'$  – 4-импульсы налетающего и рассеянного лептона;  $S_T$  – вектор поляризации нуклона;

$P_h, P_{hT}$  – 4-импульс образовавшегося адрона и его поперечный импульс;  $\phi$  – угол между плоскостью рассеяния и направлением импульса адрона;

$\phi_S$  – угол между вектором поляризации и плоскостью рассеяния;  $q = k - k'$  – 4-импульс виртуального фотона

$$y = \frac{P \cdot q}{P \cdot k'} \quad (2)$$

Введем также переменную  $z$  – долю импульса виртуального фотона, переданную вылетающему адрону  $h$ :

$$z = \frac{P \cdot P_h}{P \cdot k'} \quad (3)$$

Для установления структуры частиц и их свойств широко используется метод, связанный с определением сечения рассеяния. Рассмотрим дифференциальное сечение образования адронов в ПГНР в лидирующем твисте (первый порядок разложения по степеням  $1/Q^2$  [16]). В работе [17] было показано, что сечение рассеяния можно разложить на сумму функций фрагментации.

Таким образом, дифференциальное сечение рождения адронов в ПГНР на поперечно-поляризованном протоне можно представить в виде разложения по степеням квадрата 4-импульса виртуального фотона  $Q^2$  [18]:

$$\frac{d\sigma}{dx_{Bj} dy dz dP_{hT} d\phi d\phi_S} \propto S_T \left[ \sin(\phi - \phi_S) F_{UT}^{\sin(\phi - \phi_S)} + D_{NN} \sin(\phi + \phi_S) F_{UT}^{\sin(\phi + \phi_S)} \right] + \dots, \quad (4)$$

где  $D_{NN}$  – отношение продольного потока виртуальных фотонов к поперечному,  $D_{NN} = 2(1-y)/[1+(1-y)^2]$ ;  $F_{UT}^{\sin(\phi - \phi_S)}$  – структурная функция Сиверса, пропорциональная

значению  $\sin(\phi - \phi_S)$ ;  $F_{UT}^{\sin(\phi + \phi_S)}$  – структурная функция Коллинза, пропорциональная значению  $\sin(\phi + \phi_S)$ .

Указанные структурные функции зависят от величин  $x_{Bj}$ ,  $Q^2$ ,  $z$ ,  $P_{hT}$ . Их нижние индексы  $U$ ,  $T$  обозначают поляризацию:  $U$  – неполяризованное состояние,  $T$  – поперечная поляризация (например,  $UT$  обозначает неполяризованный лептон и поперечно-поляризованную мишень). Здесь  $S_T = |\mathbf{S}_T|$  – модуль поперечного вектора поляризации (см. рис. 2).

В сечение образования адронов наибольший вклад вносят две односпиновые азимутальные асимметрии: Сиверса и Коллинза (в зависимости от  $\sin(\phi - \phi_S)$  и  $\sin(\phi + \phi_S)$  соответственно) [19]. Асимметрия  $\sin(\phi - \phi_S)$  возникает в результате эффекта Сиверса: взаимодействия рассеянного кварка в конечном состоянии с «остатком» нуклона-мишени.

Функцию распределения кварков в поперечно-поляризованном протоне  $f_{q,p\uparrow}(x_{Bj}, k_T^2)$

можно представить в виде разности функции распределения партона (ПФР) кварков в неполяризованном протоне и функции Сиверса [20]:

$$f_{q,p\uparrow}(x_{Bj}, k_T^2) = f_1^q(x_{Bj}, k_T^2) - f_{1T}^{\perp q}(x_{Bj}, k_T^2) (\mathbf{P} \times \mathbf{k}_T) \frac{\mathbf{S}}{M}, \quad (5)$$

где  $M$  – масса протона ( $M = 938$  МэВ);  $\mathbf{k}_T$  – поперечный импульс кварка;  $\mathbf{P}$  – импульс протона;  $\mathbf{S}$  – вектор спина протона;  $f_1^q$  – функция распределения кварков в неполяризованном протоне;  $f_{1T}^{\perp q}$  – функция Сиверса, которая обозначает зависимость между поперечным импульсом «пораженного» кварка и поляризацией мишени; индекс  $\perp q$  означает, что ПФР проинтегрирована по поперечному импульсу кварка, а индекс 1 означает лидирующий твист.

В терминах функций фрагментаций асимметрию Сиверса можно представить в виде интегральной свертки функции Сиверса и функции  $D_1$  – плотности вероятности того, что поперечный импульс образовавшегося адрона относится к фрагментирующему кварку  $q$  [21]:

$$A_{Siv} \propto \sin(\phi - \phi_S) \sum_q e_q^2 f_{1T}^{\perp q}(x_{Bj}, k_T^2) * D_1(z, k_T^2), \quad (6)$$

где  $e_q$  – электрический заряд кварка,  $A_{Siv}$  – асимметрия Сиверса. Суммирование проводится по кваркам  $q$ .

Таким образом, зная величину асимметрии Сиверса, можно определить зависимость между поперечным импульсом «пораженного» кварка и поляризацией мишени при заданных параметрах переменной Бьёркена и переменной  $z$ . На практике асимметрию Сиверса

можно найти, если известно угловое распределение множественности образовавшихся адронов, обнаруженных в детекторе.

Распределение множественности образовавшегося адрона  $h$  зависит от асимметрии Сиверса следующим образом [22]:

$$\frac{dN_h}{dx_{\text{Bj}} dz dP_T d\phi_{\text{Siv}}} \propto 1 + S_T A_{\text{Siv}} \sin(\phi - \phi_S), \quad (7)$$

где  $N_h$  – число образовавшихся адронов,  $\phi_{\text{Siv}} = \phi - \phi_S$  – угол Сиверса.

Расчет на основе предложенной модели процесса ПГНР был выполнен в модифицированном нами Монте-Карло-генераторе PYTHIA8 с использованием плагина StringSpinner. Данный плагин использует модель фрагментации поляризованных партонов «струна  ${}^+3P_0$ », которая является расширением классической лундовской модели адронизации с добавлением в нее спиновой степени свободы [15].

### Результаты

Представим расчет асимметрии Сиверса согласно этой модели. Процесс разбивается на несколько кинематических регионов по переменной Бьёркена  $x_{\text{Bj}}$  (доля поперечного 4-импульса партона от 4-импульса нуклона), в которых суммируются по отдельности азимутальная модуляция  $\sin(\phi - \phi_S)$ , вектор поляризации  $S_T$  от каждого попавшего в кинематический регион события; затем полученные значения нормируются на число событий. Далее асимметрия Сиверса рассчитывается по формуле (4):

$$A_{\text{Siv}} = \frac{\langle \sin(\phi - \phi_S) \rangle}{\langle S_T \rangle}, \quad (8)$$

где угловые скобки означают усреднение по числу выделенных адронов.

Для моделирования процессов ПГНР использовалась кинематика эксперимента COMPASS: неполяризованный мюон  $\mu^-$  с энергией 160 ГэВ рассеивается на поперечно-поляризованной протонной мишени. Отбор событий производился в кинематической области по переменной Бьёркена  $x_{\text{Bj}} \{0,003; 0,400\}$ , переменной  $z$  в интервале  $0,2 < z < 0,7$ , переменной  $y$  в интервале  $0,05 < y < 0,95$  и по переданному импульсу  $Q^2 > 1$  ГэВ.

Рассчитаны зависимости асимметрии Сиверса заряженных пионов от переменной Бьёркена  $x_{\text{Bj}}$ . Проведено сравнение полученных результатов с данными эксперимента COMPASS (рис. 3). Расчетные данные получены с помощью PYTHIA8 с модифицированным StringSpinner.

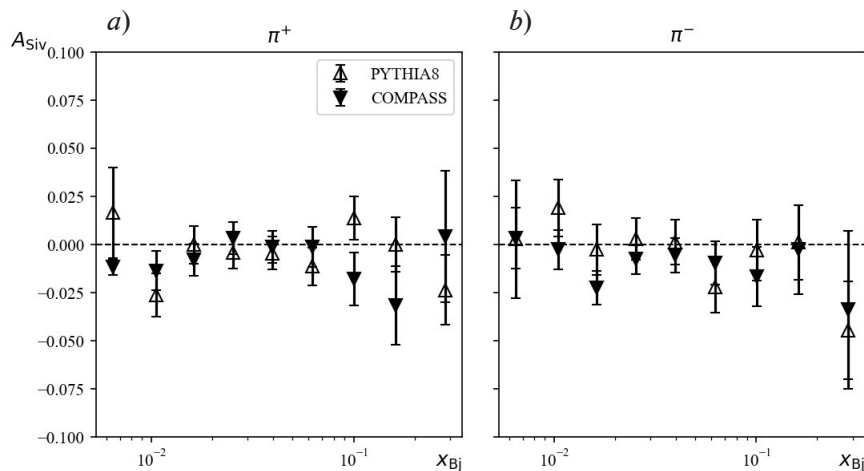


Рис. 3. Графики экспериментальных (черные треугольники) и рассчитанных (пустые символы) зависимостей асимметрии Сиверса от переменной Бьёркена при рассеянии мюонов  $\mu^-$  с энергией 160 ГэВ на поперечно-поляризованных протонах с рождением положительных ( $\pi^+$ ) (a) и отрицательных ( $\pi^-$ ) (b) мезонов



Согласно полученным данным, асимметрия Сиверса заряженных  $\pi$ -мезонов отлична от нуля. Тем самым существует влияние поляризации кварков на угловое распределение частиц.

Результаты расчетов, выполненных на основе предложенного метода, хорошо согласуются с экспериментальными данными в пределах погрешностей.

### Заключение

В настоящем исследовании разработан метод расчета асимметрии Сиверса с использованием программного пакета PYTHIA8 и плагина StringSpinner. Поскольку результаты расчетов, выполненных на основе предложенного метода, хорошо согласуются с экспериментальными данными в пределах погрешностей, нами доказана целесообразность использования данной модели для расчетов асимметрии Сиверса заряженных пионов в процессе полуинклюзивного глубоконеупругого рассеяния мюона на поляризованном протоне.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ashman J., Badelek B., Baum G., et al.** An investigation of the spin structure of the proton in deep inelastic scattering of polarized muons on polarized protons // *Nuclear Physics B*. 1989. Vol. 328. No. 1. Pp. 1–35.
2. **Ioffe B.** The nucleon spin problem // *Surveys in High Energy Physics*. 1995. Vol. 8. No. 1–4. Pp. 107–134.
3. **Blümlein J.** The theory of deeply inelastic scattering // *Progress in Particle and Nuclear Physics*. 2013. Vol. 69. March. Pp. 28–84.
4. **Feynman R.** Very high-energy collisions of hadrons // *Physical Review Letters*. 1969. Vol. 23. No. 24. P. 1415.
5. **Sjöstrand T.** Status of fragmentation models // *International Journal of Modern Physics A*. 1988. Vol. 3. No. 4. Pp. 751–823.
6. **Andersson B., Gustafson G., Ingelman G., Sjöstrand T.** Parton fragmentation and string dynamics // *Physics Reports*. 1983. Vol. 97. No. 2–3. Pp. 31–145.
7. **Metz A., Vossen A.** Parton fragmentation functions // *Progress in Particle and Nuclear Physics*. 2016. Vol. 91. November. Pp. 136–202.
8. **Soper D. E.** Parton distribution functions // *Nuclear Physics B – Proceedings Supplements*. 1997. Vol. 53. No. 1–3. Pp. 69–80.
9. **Leader E., Anselmino M. A.** Crisis in the parton model: where, oh where is the proton's spin? // *Zeitschrift für Physics C. Particles and Fields*. 1988. Vol. 41. No. 2. Pp. 239–246.
10. **Airapetian A., Akopov N., Akopov Z., et al.** Single-spin asymmetries in semi-inclusive deep-inelastic scattering on a transversely polarized hydrogen target // *Physical Review Letters*. 2005. Vol. 94. No. 1. P. 012002.
11. **Abbon P., Albrecht E., Alexakhin V. Yu., et al.** The COMPASS experiment at CERN // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. 2007. Vol. 577. No. 3. Pp. 455–518.
12. **Adolf C., Akhunzyanov R., Alekseev M. G., et al.** Measurement of azimuthal hadron asymmetries in semi-inclusive deep inelastic scattering off unpolarised nucleons // *Nuclear Physics B*. 2014. Vol. 886. September. Pp. 1046–1077.
13. **Sjöstrand T., Mrenna S., Skands P.** A brief introduction to PYTHIA 8.1 // *Computer Physics Communications*. 2008. Vol. 178. No. 11. Pp. 852–867.
14. **Kerbizi A., Lönnblad L.** StringSpinner – adding spin to the PYTHIA string fragmentation // *Computer Physics Communications*. 2022. Vol. 272. March. P. 108234.
15. **Kerbizi A., Artru X., Belghobsi Z., Martin A.** Simplified recursive  $^3P_0$  model for the fragmentation of polarized quarks // *Physical Review D*. 2019. Vol. 100. No. 1. P. 014003.
16. **Kerbizi A., Lönnblad L.** Extending StringSpinner to handle vector-meson-spin // 2023. 23.05. arXiv: 2305.05058 [hep-ph]; <https://doi.org/10.48550/arXiv.2305.05058>.
17. **Ji X., Ma J.-P., Yuan F.** QCD factorization for spin-dependent cross sections in DIS and Drell – Yan processes at low transverse momentum // *Physical Letters B*. 2004. Vol. 597. No. 3–4. Pp. 299–308.

18. **Anselmino M., Boglione M., D'Alesio U., Melis S., Murgia F., Nocera E. R., Prokudin A.** General helicity formalism for polarized semi-inclusive deep inelastic scattering // *Physical Review D*. 2011. Vol. 83. No. 11. P. 114019.
19. **Efremov A., Goeke K., Schweitzer P.** Sivers and Collins single spin asymmetries // *European Physic Journal Special Topics*. 2008. Vol. 162. No. 1. Pp. 1–11.
20. **Jaffe R.** Spin, twist and hadron structure in deep inelastic processes // arXiv: 9602236, 1996. <https://doi.org/10.48550/arXiv.hep-ph/9602236>.
21. **Bacchetta A., D'Alesio U., Diehl M., Miller C. A.** Single-spin asymmetries: The Trento conventions // *Physical Review D*. 2004. Vol. 70. No. 11. P. 117504.
22. **Bacchetta A., Diehl M., Goeke K., Metz A., Mulders P. J., Shlegel M.** Semi-inclusive deep inelastic scattering at small transverse momentum // *Journal of High Energy Physics*. 2007. Vol. 2007. No. 2. Pp. 093–093.

## REFERENCES

1. **Ashman J., Badelek B., Baum G., et al.**, An investigation of the spin structure of the proton in deep inelastic scattering of polarized muons on polarized protons, *Nucl. Phys. B*. 328 (1) (1989) 1–35.
2. **Ioffe B.**, The nucleon spin problem, *Surveys in High Energy Phys.* 8 (1–4) (1995) 107–134.
3. **Blümlein J.**, The theory of deeply inelastic scattering, *Prog. Part. Nucl. Phys.* 69 (March) (2013) 28–84.
4. **Feynman R.**, Very high-energy collisions of hadrons, *Phys. Rev. Lett.* 23 (24) (1969) 1415.
5. **Sjöstrand T.**, Status of fragmentation models, *Int. J. Mod. Phys. A*. 3 (4) (1988) 751–823.
6. **Andersson B., Gustafson G., Ingelman G., Sjöstrand T.**, Parton fragmentation and string dynamics, *Phys. Rep.* 97 (2–3) (1983) 31–145.
7. **Metz A., Vossen A.**, Parton fragmentation functions, *Prog. Part. Nucl. Phys.* 91 (Nov) (2016) 136–202.
8. **Soper D. E.**, Parton distribution functions, *Nucl. Phys. B – Proc. Suppl.* 53 (1–3) (1997) 69–80.
9. **Leader E., Anselmino M. A.**, Crisis in the parton model: where, oh where is the proton's spin? *Z. Phys. C*. 41 (2) (1988) 239–246.
10. **Airapetian A., Akopov N., Akopov Z., et al.**, Single-spin asymmetries in semi-inclusive deep-inelastic scattering on a transversely polarized hydrogen target, *Phys. Rev. Lett.* 94 (1) (2005) 012002.
11. **Abbon P., Albrecht E., Alexakhin V. Yu., et al.**, The COMPASS experiment at CERN, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*. 577 (3) (2007) 455–518.
12. **Adolf C., Akhunzyanov R., Alekseev M. G., et al.**, Measurement of azimuthal hadron asymmetries in semi-inclusive deep inelastic scattering off unpolarised nucleons, *Nucl. Phys. B*. 886 (Sept) (2014) 1046–1077.
13. **Sjöstrand T., Mrenna S., Skands P.**, A brief introduction to PYTHIA 8.1, *Comp. Phys. Commun.* 178 (11) (2008) 852–867.
14. **Kerbizi A., Lönnblad L.**, StringSpinner – adding spin to the PYTHIA string fragmentation, *Comp. Phys. Commun.* 272 (March) (2022) 108234.
15. **Kerbizi A., Artru X., Belghobsi Z., Martin A.**, Simplified recursive  $^3P_0$  model for the fragmentation of polarized quarks, *Phys. Rev. D*. 100 (1) (2019) 014003.
16. **Kerbizi A., Lönnblad L.**, Extending StringSpinner to handle vector-meson-spin, 2023.23.05, arXiv: 2305.05058 [hep-ph]; <https://doi.org/10.48550/arXiv.2305.05058>.
17. **Ji X., Ma J.-P., Yuan F.**, QCD factorization for spin-dependent cross sections in DIS and Drell – Yan processes at low transverse momentum, *Phys. Lett. B*. 597 (3–4) (2004) 299–308.
18. **Anselmino M., Boglione M., D'Alesio U., et al.**, General helicity formalism for polarized semi-inclusive deep inelastic scattering, *Phys. Rev. D*. 83 (11) (2011) 114019.
19. **Efremov A., Goeke K., Schweitzer P.**, Sivers and Collins single spin asymmetries, *Europ. Phys. J. ST*. 162 (1) (2008) 1–11.
20. **Jaffe R.**, Spin, twist and hadron structure in deep inelastic processes, arXiv: 9602236, 1996. <https://doi.org/10.48550/arXiv.hep-ph/9602236>.
21. **Bacchetta A., D'Alesio U., Diehl M., Miller C. A.**, Single-spin asymmetries: The Trento conventions, *Phys. Rev. D*. 70 (11) (2004) 117504.
22. **Bacchetta A., Diehl M., Goeke K., et al.**, Semi-inclusive deep inelastic scattering at small transverse momentum, *J. High Energy Phys.* 2007 (2) (2007) 093–093.



**СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ**

**МУЗЯЕВ Евгений Валерьевич** – студент Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

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

muzyaev.ev@edu.spbstu.ru

ORCID: 0009-0005-7144-4746

**БЕРДНИКОВ Ярослав Александрович** – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

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

berdnikov@spbstu.ru

ORCID: 0000-0003-0309-5917

**THE AUTHORS**

**MUZYAEV Evgeny V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

muzyaev.ev@edu.spbstu.ru

ORCID: 0009-0005-7144-4746

**BERDNIKOV Yaroslav A.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

berdnikov@spbstu.ru

ORCID: 0000-0003-0309-5917

*Статья поступила в редакцию 27.06.2024. Одобрена после рецензирования 02.08.2024. Принята 02.08.2024.*

*Received 27.06.2024. Approved after reviewing 02.08.2024. Accepted 02.08.2024.*

Научная статья

УДК 539.122

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17413>

## РОЖДЕНИЕ ПРЯМЫХ ФОТОНОВ ВО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯХ ЯДЕР ДЕЙТЕРИЯ ПРИ ЭНЕРГИЯХ 13,5 И 27,0 ГэВ

Д. С. Шапаев , Я. А. Бердников

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

 [dima.shapaev@yandex.ru](mailto:dima.shapaev@yandex.ru)

**Аннотация.** В работе получены расчетным путем инвариантные спектры и факторы ядерной модификации прямых фотонов в столкновениях дейтронных пучков при энергиях  $\sqrt{s_{NN}} = 13,5$  и  $27,0$  ГэВ/нуклон, характерных для экспериментов, планирующихся в проекте NICA. Расчеты проводились как для ядерно-модифицированных функций партонного распределения, так и для функций распределения партонов, найденных для свободных нуклонов. Установлено, что учет ядерно-модифицированных функций партонного распределения слабо влияет на предсказания спектров прямых фотонов по поперечному импульсу и факторов ядерной модификации прямых фотонов в указанных взаимодействиях. Также оказалось, что факторы ядерной модификации прямых фотонов, рожденных в столкновениях дейтронов при рассматриваемых энергиях, незначительно зависят от поперечного импульса в диапазоне  $1 - 5$  ГэВ и отличаются от 1,0, принимая значения около 0,8.

**Ключевые слова:** прямой фотон, фактор ядерной модификации, SPD, NICA, функция распределения партонов

**Финансирование:** Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2024-0033).

**Для цитирования:** Шапаев Д. С., Бердников Я. А. Рождение прямых фотонов во взаимодействиях ядер дейтерия при энергиях 13,5 и 27,0 ГэВ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 138–146. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17413>

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17413>

## THE CREATION OF DIRECT PHOTONS DURING INTERACTIONS OF DEUTERIUM NUCLEI AT ENERGIES OF 13.5 GeV AND 27.0 GeV

D. S. Shapaev , Ya. A. Berdnikov

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

 [dima.shapaev@yandex.ru](mailto:dima.shapaev@yandex.ru)

**Abstract.** In this study, the invariant spectra and nuclear modification factors of direct photons produced in deuteron collisions at energies  $\sqrt{s_{NN}} = 13.5$  and  $27.0$  GeV/nucleon, relevant to the NICA project have been obtained by calculation. In doing this, both nuclear modified parton distribution functions and parton distribution ones found for free nucleons were used. Our analysis indicated that the predicted spectra of direct photons as a function of the transverse momentum, as well as the nuclear modification factors in these interactions were scarcely affected by accounting for the nuclear parton distribution function. It also turned out that the nuclear modification factors for direct photons generated in deuteron collisions at the specified energies depended slightly on the transverse momentum within the range from 1 to 5 GeV, differed from unity, exhibiting values around 0.8.

**Keywords:** direct photon, nuclear modification factor, SPD, NICA, parton distribution function



**Funding:** The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2024-0033).

**For citation:** Shapaev D. S., Berdnikov Ya. A., The creation of direct photons during interactions of deuterium nuclei at energies of 13.5 GeV and 27.0 GeV, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 138–146. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17413>

## Введение

Одной из физических задач по спиновой физике в эксперименте Spin Physics Detector (SPD) [1] на коллайдере Nuclotron-based Ion Collider fAcility (NICA) [2] является изучение рождения прямых фотонов в протон-протонных столкновениях при энергии  $\sqrt{s_{pp}} = 27,0$  ГэВ и дейтрон-дейтронных столкновениях при энергии  $\sqrt{s_{NN}} = 13,5$  ГэВ/нуклон [3].

Основными источниками образования прямых фотонов служат жесткие процессы: глюонное комптоновское рассеяние  $qg \rightarrow q\gamma$  или  $\bar{q}g \rightarrow \bar{q}\gamma$  и кварк-антикварковая аннигиляция  $q\bar{q} \rightarrow g\gamma$  [4].

Здесь использованы следующие обозначения:  $q, \bar{q}, g, \gamma$  – кварк, антикварк, глюон и прямой фотон соответственно.

При энергии  $\sqrt{s} = 24$  ГэВ в столкновениях протонов, полное сечение процесса  $q\bar{q} \rightarrow g\gamma$  в 4 раза меньше такого для процессов глюонного комптоновского рассеяния  $qg \rightarrow q\gamma$  и  $\bar{q}g \rightarrow \bar{q}\gamma$ . Таким образом, комптоновское рассеяние является основным механизмом рождения прямых фотонов при энергиях SPD NICA [3].

Вместе с тем, еще одной задачей SPD является извлечение (и уточнение) неизвестных (малоизвестных) функций распределения партонов (*англ.* Parton Distribution Function (PDF)) [3]. Партоны – это частицы, входящие в состав протонов, нейтронов и других адронов, в рамках партонной модели, предложенной Ричардом Фейнманом в 1969 г.

Функция распределения партонов  $f_i(x; Q^2)$  применяется для описания вероятности нахождения в адроне  $i$ -го партона;  $x$  – параметр партона, определяющий долю импульса нуклона, которую несет партон;  $Q^2$  – величина, которая следует выражению

$$Q^2 = -q^2,$$

где  $q^2$  – 4-импульс виртуальной частицы [5].

Эксперименты по глубоконеупругому рассеянию, которые активно используются для изучения внутренней структуры нуклонов, показали, что PDF для нуклонов (протонов и нейтронов), которые связаны в ядрах – не такие же, как для функций распределения партонов, рассчитанных для свободных протонов, а модифицированы нетривиальным образом [6]. В ядерно-модифицированных функциях распределения партонов (*англ.* nuclear Parton Distribution Function, (nPDF)) учитывается и взаимодействие нуклона с окружающими его нуклонами, составляющими ядро.

Цель настоящей работы – сравнительный анализ особенностей рождения прямых фотонов в столкновениях ядер дейтерия.

При этом используются ядерно-модифицированные функции партонного распределения (nPDF) и результаты рождения прямых фотонов с применением функций распределения партонов, полученных для свободных протонов (PDF).

## Методика исследования

Расчетный анализ рождения прямых фотонов в дейтрон-дейтронных столкновениях проведен в данной работе на основе программного пакета Pythia8 [7], модифицированного нами, и рассматривает эти столкновения при энергиях 13,5 и 27,0 ГэВ/нуклон.

Выбраны варианты расчета, в которых используются два вида функций: функций распределения партонов, полученных для свободных нуклонов (PDF); ядерно-модифицированных (в данном случае в дейтроне) функций партонного распределения (nPDF).

Как хорошо известно, инвариантные спектры прямых фотонов вида

$$(1/2\pi p_T) \cdot d^2N_\gamma/dp_T dy$$

в столкновениях частиц  $a$  и  $b$  могут быть получены исходя из следующего выражения [8]:

$$\frac{1}{2\pi p_T} \cdot \frac{d^2N_\gamma}{dp_T dy} = \frac{1}{2\pi p_T} \cdot \frac{1}{N_{ab}} \cdot \frac{N_\gamma(\Delta p_T)}{\Delta p_T \Delta y},$$

где  $p_T$  – поперечный импульс прямых фотонов;  $y$  – быстрота;  $N_{ab}$  – число столкновений частиц  $a$  и  $b$ , в которых могут рождаться прямые фотоны;  $N_\gamma(\Delta p_T)$  – число рожденных прямых фотонов в диапазонах быстрот  $\Delta y$  и поперечного импульса  $\Delta p_T$  прямых фотонов.

По аналогии с работой [9], в данной статье рассмотрен диапазон быстрот  $|y| < 3$ .

Поскольку рассматриваемые нами энергии столкновений пучков дейтронов много больше энергии связи нуклонов в дейтроне (2,23 МэВ), в качестве модели дейтрона можно принять модель несвязанных (свободных) нуклонов, для которых в рамках партонной модели используются партонные функции распределения свободных нуклонов (PDF). На основе такой модели столкновения пучков дейтронов можно представить как взаимодействие каждого нуклона одного ядра с каждым нуклоном другого. При этом возможны четыре комбинации нуклон-нуклонных столкновений:  $pp$ ,  $pn$ ,  $np$ ,  $nn$ . Если учесть близкие значения полных сечений этих взаимодействий [10], то можно принять без существенной потери точности, что эти взаимодействия равновероятны. В таком случае спектр прямых фотонов в дейтронных столкновениях вычисляется как

$$\frac{d^2N_{dd \rightarrow \gamma X}}{dp_T dy} = (1/4) \cdot \left( \frac{d^2N_{pp \rightarrow \gamma X}}{dp_T dy} + \frac{d^2N_{pn \rightarrow \gamma X}}{dp_T dy} + \frac{d^2N_{np \rightarrow \gamma X}}{dp_T dy} + \frac{d^2N_{nn \rightarrow \gamma X}}{dp_T dy} \right), \quad (1)$$

где  $\gamma$  – прямые фотоны;  $X$  – все остальные частицы, которые могут рождаться в столкновениях дейтронов или нуклонов.

В процессе столкновения дейтронов разнообразные комбинации взаимодействующих нуклонов ( $pp$ ,  $pn$ ,  $np$ ,  $nn$ ) могут приводить к разному количеству прямых фотонов. Это объясняется тем, что вероятность образования прямых фотонов пропорциональна квадрату электрического заряда кварка, участвующего в процессе кварк-глюонного или кварк-антикваркового взаимодействия [9]:

$$|M_{qg \rightarrow \gamma q}|^2 = -\frac{16}{3} \pi^2 \alpha_{em} \alpha_s e_q^2 \frac{\hat{s}^2 + \hat{t}^2}{\hat{s}\hat{t}}, \quad (2)$$

$$|M_{q\bar{q} \rightarrow \gamma g}|^2 = \frac{128}{9} \pi^2 \alpha_{em} \alpha_s e_q^2 \frac{\hat{u}^2 + \hat{t}^2}{\hat{u}\hat{t}}, \quad (3)$$

где  $\hat{s}, \hat{t}, \hat{u}$  – переменные Мандельштама;  $\alpha_{em}, \alpha_s$  – константы электромагнитного и сильного взаимодействий, соответственно;  $e_q$  – электрический заряд кварка;  $|M_{qg \rightarrow \gamma q}|, |M_{q\bar{q} \rightarrow \gamma g}|$  – модули амплитуды для кварк-глюонного и кварк-антикваркового взаимодействий, соответственно.

Здесь следует учитывать различный кварковый состав протона ( $uud$ ) и нейтрона ( $udd$ ), где электрический заряд  $u$ -кварка равен  $+2/3$  элементарного заряда, а  $d$ -кварка равен  $-1/3$ , и тогда спектры прямых фотонов, рожденных в электромагнитном взаимодействии, должны отличаться в протон-протонных, протон-нейтронных и нейтрон-нейтронных столкновениях.

Альтернативным подходом к исследованию столкновений пучков дейтронов является применение ядерно-модифицированных функций партонного распределения (nPDF), полученных для дейтронов [11 – 13]. В этом случае мы учитывали, что эти функции получены из экспериментальных данных, где нуклоны, составляющие ядро дейтерия, связаны друг с другом.

Поскольку Pythia8 в процессе расчетов спектра прямых фотонов позволяет использовать только одну партонную функцию распределения (например, эту функцию в свободном протоне (PDF)), инвариантный спектр прямых фотонов для nPDF можно получить



через вычисление весового коэффициента  $w$  [14]. Последний характеризует отношение вероятностей обнаружения партона для двух различных функций распределения партонов при одинаковых значениях переменных  $x$  и  $Q^2$ .

В нашем случае мы рассчитываем отношение функций nPDF к функциям PDF. Тогда спектр прямых фотонов для функций nPDF можно получить, если умножить этот весовой коэффициент на выражение для спектра прямых фотонов, полученное с использованием функций PDF.

Вычисление весового коэффициента производится по следующей формуле [14]:

$$w = \frac{x_1 f_i^{p/d}(x_1; Q^2)}{x_1 f_i^p(x_1; Q^2)} \cdot \frac{x_2 f_i^{p/d}(x_2; Q^2)}{x_2 f_i^p(x_2; Q^2)}, \quad (4)$$

где  $x_1 f_i^{p/d}(x_1; Q^2)$ ,  $x_2 f_i^{p/d}(x_2; Q^2)$  – дейтронные ядерно-модифицированные функции распределения партонов (nPDF) в первом и втором ядрах;  $x_1 f_i^p(x_1; Q^2)$ ,  $x_2 f_i^p(x_2; Q^2)$  – функции распределения партонов, полученные для свободных протонов (PDF) первого и второго ядер.

Таким образом, внедрение нашей модификации в программный пакет Pythia8 приводит к возрастанию скорости формирования спектров прямых фотонов. Это обусловлено возможностью получения спектров прямых фотонов как для функций PDF, так и для nPDF в рамках одного запуска симуляции вычислений спектров прямых фотонов.

В настоящей работе результаты, полученные для дейтрон-дейтронных столкновений с рождением прямых фотонов, рассчитаны с использованием генератора событий Монте-Карло, предусмотренного в пакете Pythia8. Функции партонного распределения были взяты из программного пакета LHAPDF6 [14], который подключается непосредственно к генератору событий. Компьютерный анализ включал применение следующих партонных функций распределения (далее их нумерация фигурирует в подписях к рисункам).

Для функций PDF: nNNPDF30\_nlo\_as\_0118\_p [11] (FI), TUJU21\_nlo\_1\_1 [12] (FII), nCTEQ15HIX\_FullNuc\_1\_1 [13] (FIII);

для функций nPDF: nNNPDF30\_nlo\_as\_0118\_A2\_Z1 [11] (FIV), TUJU21\_nlo\_2\_1 [12] (FV), nCTEQ15HIX\_FullNuc\_2\_1 [13] (FVI), которые были сформулированы на основе разных экспериментальных данных.

Сравнительный анализ особенностей рождения прямых фотонов в дейтрон-дейтронных столкновениях с применением ядерно-модифицированных PDF и PDF, полученных для свободных протонов, проводился попарно между следующими функциями: FVI и FIII, FV и FII, FIV и FI.

Для количественной оценки спектров прямых фотонов в дейтрон-дейтронных столкновениях с применением ядерно-модифицированных функций распределения партонов (nPDF) и спектров, полученных с применением функций распределения партонов, взятых для свободных протонов (PDF), обычно используется фактор ядерной модификации  $R_{dd \rightarrow \gamma X}$  прямых фотонов [15 – 17].

Величина  $R_{dd \rightarrow \gamma X}$  описывается как следующее отношение:

$$R_{dd \rightarrow \gamma X} = \frac{1}{N_{coll}} \frac{d^2 N_{dd \rightarrow \gamma X} / dp_T dy}{d^2 N_{pp \rightarrow \gamma X} / dp_T dy}, \quad (5)$$

где в числителе стоит инвариантный спектр прямых фотонов в столкновениях ядер дейтерия, который нормируется на количество бинарных нуклон-нуклонных столкновений  $N_{coll}$  (для  $d + d$ ), а в знаменателе – инвариантный спектр прямых фотонов в протон-протонных столкновениях.

### Полученные результаты и их обсуждение

На рис. 1 сравниваются инвариантные спектры прямых фотонов в зависимости от поперечного импульса  $p_T$  при энергиях 13,5 и 27,0 ГэВ/нуклон, соответственно, для различных функций партонного распределения (см. функции FI – FVI).

Для большей наглядности на рис. 1,  $a - c$  и  $g - j$  один из спектров (черные гистограммы) умножен на коэффициент, равный 2. Систематические неопределенности получены в данной работе только для функций партонного распределения FIV – FVI с помощью метода, описанного в работе [18]. Для наборов функций FI – FIII определение систематических неопределенностей оказалось невозможным.

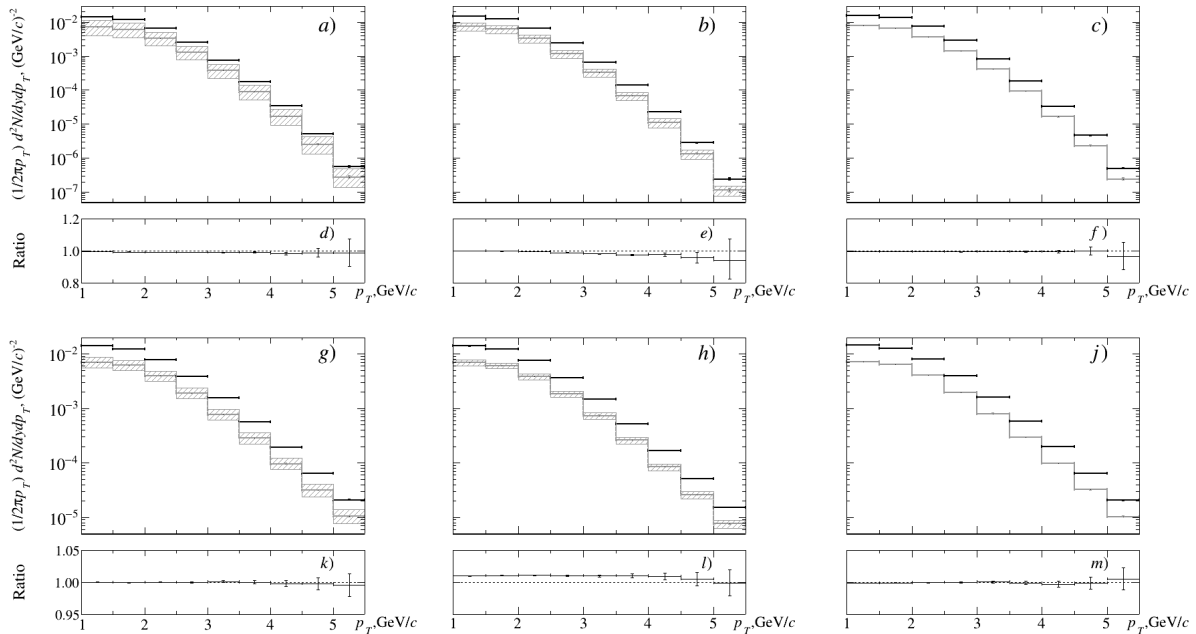


Рис. 1. Инвариантные спектры прямых фотонов (см. ф-лу (1)) в  $(d + d)$ -столкновениях при  $\sqrt{s_{NN}} = 13,5$  ( $a - f$ ) и  $27,0$  ( $g - m$ ) ГэВ/нуклон, в области быстрот  $|y| < 3$ , для различных функций партонного распределения:

$a, g$  – функции FIV, FI;  $b, h$  – FV, FII;  $c, j$  – FVI, FIII (нумерацию см. в тексте); гистограммы серого цвета относятся к FIV – FVI, черного – к FI – FIII;  $d-f, k-m$  – отношения спектров серых гистограмм к черным (вертикальными отрезками показаны статистические погрешности). Систематические неопределенности показаны заштрихованными областями

Как следует из рис. 1, инвариантные спектры, полученные с использованием партонных функций распределения свободных протонов (PDF) и с использованием ядерно-модифицированных партонных функций распределения (nPDF), совпадают в пределах неопределенностей на всем диапазоне поперечного импульса, что указывает на незначительное влияние ядерной модификации функций распределения партонов на результаты предсказания инвариантных спектров прямых фотонов.

На рис. 2 представлены факторы ядерной модификации прямых фотонов в зависимости от поперечного импульса при энергиях 13,5 и 27,0 ГэВ/нуклон, соответственно, для различных функций партонного распределения FI – FVI.

Факторы ядерной модификации с использованием всех функций распределения партонов FI – FVI оказываются меньше единицы, что объясняется зависимостью сечения рождения прямых фотонов (в соответствии с процессами (2) и (3)) от квадрата электрического заряда кварков, входящих в состав взаимодействующих нуклонов.

Анализ данных, представленных на рис. 2, приводит к заключению, что результаты расчетов факторов ядерной модификации прямых фотонов в дейтрон-дейтронных столкновениях практически совпадают с таковыми, полученными на основе партонных функций распределения, взятых как для свободных протонов (PDF), так и ядерно-модифицированных функций партонного распределения (nPDF).

Сравнение полученных данных на рис. 2 показывает практически одинаковую зависимость (по величине и форме) факторов ядерной модификации от поперечного импульса.

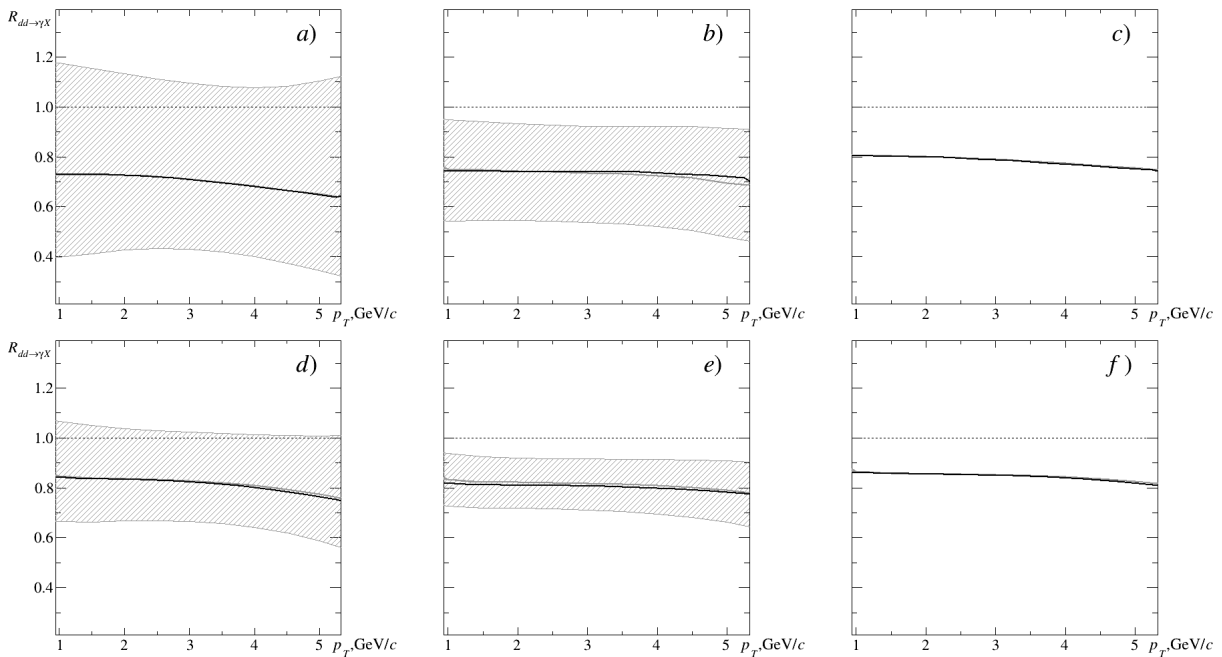


Рис. 2. Зависимости факторов ядерной модификации прямых фотонов от поперечного импульса (см. ф-лу (5)) в  $(d + d)$ -столкновениях при  $\sqrt{s_{NN}} = 13,5$  ( $a - c$ ) и  $27,0$  ( $d - f$ ) ГэВ/нуклон. Представлены графики для той же области быстрот ( $|y| < 3$ ) и тех же функций партонного распределения (FI – FVI), что на рис. 1; серый и черный цвета кривых соответствуют цветам гистограмм на рис. 1,  $a - c$  и  $1, g - j$ , однако здесь результаты расчетов практически совпадают. Систематические неопределенности также показаны заштрихованными областями

### Заключение

В настоящей работе рассчитаны инвариантные спектры и факторы ядерной модификации прямых фотонов в  $(d + d)$ -столкновениях при энергиях  $\sqrt{s_{NN}} = 13,5$  и  $\sqrt{s_{NN}} = 27,0$  ГэВ/нуклон в зависимости от поперечного импульса в области быстрот  $|y| < 3$  с использованием ядерно-модифицированных PDF и с использованием PDF, полученных для свободных протонов.

Применение весового коэффициента (см. формулу (4)) в расчетах спектров прямых фотонов позволило ускорить процесс в два раза.

Показано, что инвариантные спектры и факторы ядерной модификации прямых фотонов практически не зависят от влияния ядра на партонные функции распределения в дейтроне.

Полученные результаты могут быть полезны для проверки в эксперименте SPD на коллайдере NICA.

### Благодарности

Авторы выражают благодарности кандидату физико-математических наук Котову Д. О. (доцент Высшей школы фундаментальных физических исследований СПбПУ), Ларионовой Д. М. (ассистент той же школы), Лобанову А. А. (студент Физико-механического института СПбПУ), кандидату физико-математических наук Митранкову Ю. М. (ассистент Высшей школы фундаментальных физических исследований СПбПУ), за полезное обсуждение работы.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ladygin V. P.** Spin physics detector at NICA // JPS Conference Proceedings. Proc. 24th International Spin Symposium (SPIN2021) 2022. Vol. 37. P. 011012.
2. **Trubnikov G., Butenko A., Golovatyuk V., Guskov A., Kapishin M., Kekelidze V., Lednicky R., Meshkov I., Sorin A.** NICA heavy-ion collider at JINR (Dubna). Status of accelerator complex and first physics at NICA // Journal of Physics: Conference Series. 2023. Vol. 2586. No. 1. P. 012013.
3. **Savin I., Efremov A., Peshekhonov D., Kovalenko A., Teryaev O., Shevchenko O., Nagajcev A., Guskov A., Kukhtin V., Toplilin N.** Spin physics experiments at NICA-SPD with polarized proton and deuteron beams // EPJ Web of Conferences. 2015. Vol. 85. 23 January. P. 02039.
4. **Adler S. S., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration). Measurement of direct photon production in  $p + p$  collisions at  $\sqrt{s} = 200$  GeV // Physical Review Letters. 2007. Vol. 98. No. 1. P. 012002.
5. **Ethier J. J., Nocera E. R.** Parton distributions in nucleons and nuclei // Annual Review of Nuclear and Particle Science. 2020. Vol. 70. No. 1. Pp. 43–76.
6. **Eskola K. J.** Global analysis of nuclear PDFs – latest developments // Nuclear Physics A. 2013. Vol. 910–911. August. Pp. 163–170.
7. **Bierlich C., Chakraborty S., Desai N., et al.** A comprehensive guide to the physics and usage of PYTHIA 8.3 // SciPost Physics. 2022. Advance online publication. <https://inspirehep.net/literature/2056998>.
8. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration). Nuclear modification factors of  $\phi$  mesons in  $d + Au$ ,  $Cu + Cu$  and  $Au + Au$  collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 200$  GeV // Physical Review C. 2011. Vol. 83. No. 2. P. 024909.
9. **Салеев В. А., Шипилова А. В.** Двойные продольные спиновые асимметрии в прямом рождении фотонов на коллайдере NICA // Письма в журнал «Физика элементарных частиц и атомного ядра». 2023. Т. 20. № 3(248). С. 417–421.
10. **Murthy P. V. R., Ayre C. A., Gustafson H. R., Jones L. W., Longo M. J.** Neutron total cross sections on nuclei at Fermilab energies // Nuclear Physics B. 1975. Vol. 92. No. 3. Pp. 269–308.
11. **Khalek R. A., Gauld R., Giani T., Nocera E. R., Rabemananjara T. R., Rojo J.** nNNPDF3.0: evidence for a modified partonic structure in heavy nuclei // European Physics Journal C. 2022. Vol. 82. No. 6. P. 507.
12. **Helenius I., Walt M., Vogelsang W.** NNLO nuclear parton distribution functions with electroweak-boson production data from the LHC // Physical Review D. 2022. Vol. 105. No. 9. P. 094031.
13. **Segarra E. P., Ježo T., Accardi A., et al.** Extending nuclear PDF analyses into the high- $x$ , low- $Q^2$  region // Physical Review D. 2021. Vol. 103. No. 11. P. 114015.
14. **Buckley A., Ferrando J., Lloyd S., Nordström K., Page B., Rüfenacht M., Schönherr M., Watt G.** LHAPDF6: parton density access in the LHC precision era // European Physics Journal C. 2015. Vol. 75. No. 3. P. 132.
15. **Afanasiev S., Aidala C., Ajitanand N. N., et al.** (PHENIX Collaboration). Measurement of direct photons in  $Au + Au$  collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 200$  GeV // Physical Review Letters. 2012. Vol. 109. No. 15. P. 152302.
16. **Rezaeian A. H., Schaefer A.** Hadrons and direct photon production in  $pp$  and  $pA$  collisions at the LHC and saturation effects // Physical Review D. 2010. Vol. 81. No. 11. P. 114032.
17. **Arleo F.** Hard pion and prompt photon at RHIC, from single to double inclusive production // Journal of High Energy Physics. 2006. Vol. 2006. No. 09. P. 015.
18. **Gao J., Nadolsky P.** A meta-analysis of parton distribution functions // Journal of High Energy Physics. 2014. Vol. 2014. No. 7. P. 35.

## REFERENCES

1. **Ladygin V. P.**, Spin physics detector at NICA, JPS Conf. Proc. Proc. 24th Int. Spin Symp. (SPIN2021). 37 (2022) 011012.
2. **Trubnikov G., Butenko A., Golovatyuk V., et al.**, NICA heavy-ion collider at JINR (Dubna). Status of accelerator complex and first physics at NICA, J. Phys. Conf. Ser. 2586 (1) (2023) 012013.
3. **Savin I., Efremov A., Peshekhonov D., et al.**, Spin physics experiments at NICA-SPD with polarized proton and deuteron beams, EPJ Web of Conf. 85 (23 Jan) 02039.





4. Adler S. S., Afanasiev S., Aidala C., et al. (PHENIX Collaboration), Measurement of direct photon production in  $p + p$  collisions at  $\sqrt{s} = 200$  GeV, Phys. Rev. Lett. 98 (1) (2007) 012002.
5. Ethier J. J., Nocera E. R., Parton distributions in nucleons and nuclei, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. 70 (1) (2020) 43–76.
6. Eskola K. J., Global analysis of nuclear PDFs – latest developments, Nucl. Phys. A. 910–911 (Aug) (2013) 163–170.
7. Bierlich C., Chakraborty S., Desai N., et al., A comprehensive guide to the physics and usage of PYTHIA 8.3, SciPost Phys. 2022. Adv. online publ. <https://inspirehep.net/literature/2056998>.
8. Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al. (PHENIX Collaboration), Nuclear modification factors of  $\phi$  mesons in  $d + Au$ ,  $Cu + Cu$  and  $Au + Au$  collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 200$  GeV, Phys. Rev. C. 83 (2) (2011) 024909.
9. Saleev V. A., Shipilova A. V., Double longitudinal-spin asymmetries in direct photon production at NICA, Phys. Part. Nuclei. Lett. 20 (3) (2023) 400–403.
10. Murthy P. V. R., Ayre C. A., Gustafson H. R., et al., Neutron total cross sections on nuclei at Fermilab energies, Nucl. Phys. B. 92 (3) (1975) 269–308.
11. Khalek R. A., Gauld R., Giani T., et al., nNNPDF3.0: evidence for a modified partonic structure in heavy nuclei, Eur. Phys. J. C. 82 (6) (2022) 507.
12. Helenius I., Walt M., Vogelsang W., NNLO nuclear parton distribution functions with electroweak-boson production data from the LHC, Phys. Rev. D. 105 (9) (2022) 094031.
13. Segarra E. P., Ježo T., Accardi A., et al., Extending nuclear PDF analyses into the high- $x$ , low- $Q^2$  region, Phys. Rev. D. 103 (11) (2021) 114015.
14. Buckley A., Ferrando J., Lloyd S., et al., LHAPDF6: parton density access in the LHC precision era, Eur. Phys. J. C. 75 (3) (2015) 132.
15. Afanasiev S., Aidala C., Ajitanand N. N., et al., (PHENIX Collaboration), Measurement of direct photons in  $Au + Au$  collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 200$  GeV, Phys. Rev. Lett. 109 (15) (2012) 152302.
16. Rezaeian A. H., Schaefer A., Hadrons and direct photon production in  $pp$  and  $pA$  collisions at the LHC and saturation effects, Phys. Rev. D. 81 (11) (2010) 114032.
17. Arleo F., Hard pion and prompt photon at RHIC, from single to double inclusive production, J. High Energ. Phys. 2006 (09) (2006) 015.
18. Gao J., Nadolsky P., A meta-analysis of parton distribution functions, J. High Energ. Phys. 2014 (7) (2014) 35.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ШАПАЕВ Дмитрий Сергеевич** – студент Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

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

[dima.shapaev@yandex.ru](mailto:dima.shapaev@yandex.ru)

ORCID: 0009-0006-8542-4401

**БЕРДНИКОВ Ярослав Александрович** – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

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

[berdnikov@spbstu.ru](mailto:berdnikov@spbstu.ru)

ORCID: 0000-0003-0309-5917

## THE AUTHORS

**SHAPAEV Dmitry S.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
dima.shapaev@yandex.ru  
ORCID: 0009-0006-8542-4401

**BERDNIKOV Yaroslav A.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
berdnikov@spbstu.ru  
ORCID: 0000-0003-0309-5917

*Статья поступила в редакцию 25.07.2024. Одобрена после рецензирования 07.08.2024.  
Принята 07.08.2024.*

*Received 25.07.2024. Approved after reviewing 07.08.2024. Accepted 07.08.2024.*

Научная статья

УДК 539.3,539.42

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17414>

**ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ КРИТЕРИЙ РАЗРУШЕНИЯ  
НА ОСНОВЕ ДИССИПАТИВНОГО НЕРАВЕНСТВА**  
**М. М. Фролов**<sup>1</sup> □, **А. В. Савиковский**<sup>1, 2</sup>, **А. С. Семенов**<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup> АО «Силовые машины – ЗТЛ, ЛМЗ, Электросила, Энергомашэкспорт»,  
Санкт-Петербург, Россия

□ [frolov.mm@bk.ru](mailto:frolov.mm@bk.ru)

**Аннотация.** Предложен новый подход к получению энергетического критерия разрушения термоупругого тела с трещиной, основанный на совместном рассмотрении первого и второго законов термодинамики. Анализ ограничен процессами хрупкого квазистатического разрушения в слабонеоднородном поле температур. Использована концепция поверхностной энергии Гриффитса, дополненная зависимостью указанной энергии от температуры. Показано, что в слабонеоднородном поле температур не возникает дополнительных термодинамических потоков, кроме скорости роста трещины, что позволяет распространить критерий Гриффитса на неизотермический случай. Установлено, что векторный  $J$ -интеграл, представляющий собой вектор потока энергии в вершине трещины, является единственным параметром разрушения для термоупругих сред с трещиной. Рассматриваются различные формы представления вектора потока энергии для случаев линейной и нелинейной термоупругости.

**Ключевые слова:** хрупкое разрушение, термомеханическое нагружение, диссипативное неравенство, энергетический критерий разрушения

**Для цитирования:** Фролов М. М., Савиковский А. В., Семенов А. С. Энергетический критерий разрушения на основе диссипативного неравенства // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 147–160. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17414>

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.17414>

**AN ENERGY FRACTURE CRITERION  
BASED ON DISSIPATIVE INEQUALITY**

**M. M. Frolov**<sup>1</sup> □, **A. V. Savikovskii**<sup>1, 2</sup>, **A. S. Semenov**<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup> Joint Stock Company "Power machines – ZTL, LMZ, Electrosila,  
Energomachexport" (JSC "Power machines"), St. Petersburg, Russia

□ [frolov.mm@bk.ru](mailto:frolov.mm@bk.ru)

**Abstract.** A new approach to obtaining the energy criterion for the fracture of a thermoelastic body with a growing crack has been put forward. The criterion is based directly on the first and second laws of thermodynamics. An analysis was restricted by brittle quasi-static fracture processes in the weakly nonuniform temperature field (WNUTF). The Griffith conception

of surface energy supplemented by the temperature dependence of this energy was used. No thermodynamic fluxes were shown to arise in the WNUTF, except for the rate of a growing crack. This result made it possible to extend the Griffith criterion to the nonisothermal case. The vectorial  $J$ -integral representing the energy flux vector at the crack tip was established to be the only fracture parameter for thermoelastic media with cracks. Different energy flux vector representation forms for cases of linear and nonlinear thermoelasticity were considered and discussed.

**Keywords:** brittle fracture, thermomechanical loading, dissipative inequality, energy fracture criterion

**For citation:** Frolov M. M., Savikovskii A. V., Semenov A. S., An energy fracture criterion based on dissipative inequality, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 147–160. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17414>

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

### Введение

Основные положения энергетического подхода в механике хрупкого разрушения были сформулированы А. Гриффитсом в работе [1]. Концепция Гриффитса заключалась в том, что при разрушении образуется новая поверхность трещины, затраты на образование которой компенсируются уменьшением энергии в объеме. Для демонстрации своей концепции А. Гриффитс использовал прямое вычисление энергии деформации по известному решению задачи о растяжении плоскости с эллиптическим отверстием [2, 3].

В дальнейшем для вычисления поглощения энергии при квазистатическом хрупком разрушении был применен аппарат инвариантных интегралов, введен  $J$ -интеграл [4, 5]. Г. П. Черепанов [6, 7] получил аналогичный контурный интеграл из баланса энергии. Существует также способ получения  $J$ -интеграла на основе уравнений движения [8, 9]. Строго формализовать и указать условия сходимости  $J$ -интеграла удалось М. Гёртину в работе [10].

В линейной механике разрушения скорость высвобождения энергии можно вычислять через коэффициенты интенсивности напряжений (КИН) [11, 12]. Для чистой моды нормального отрыва связь  $J$ -интеграла и КИН получена в работе [4]. Для смешанной моды разрушения введен векторный  $J$ -интеграл, компоненты  $J_k$  которого имеют однозначную связь с КИН [13 – 15].

В нелинейной механике разрушения для упругопластического материала со степенным упрочнением Дж. Хатчинсон, Дж. Райс и Г. Розенгрин показали [16, 17], что  $J$ -интеграл определяет коэффициент при сингулярном члене в асимптотическом разложении напряжений в окрестности вершины трещины.

Дальнейшее развитие концепции  $J$ -интеграла происходило путем обобщения на случай термомеханических задач. Для прямолинейной трещины нормального отрыва это проделано в работе [18] и обобщено на смешанную моду [8, 19 – 21]. Обобщение на случай влияния электрических полей рассматривалось в работах [22 – 26].

Все вышеупомянутые работы так или иначе опираются на баланс энергии, при этом сам критерий разрушения формулируется как постулат. Следующий шаг в обобщении теории хрупкого разрушения – получение критерия разрушения из второго начала термодинамики. В работах М. Гёртина [27, 28] получен критерий разрушения для изотермического процесса на основе концепции конфигурационных сил [29] из второго начала термодинамики. В последующих работах, использующих второе начало термодинамики [30 – 32], также рассматривается изотермический процесс.

В данной работе предлагается процедура получения энергетического критерия хрупкого разрушения на основе совместного использования двух законов термодинамики: баланса энергии и диссипативного неравенства в неизотермической постановке.

### Законы термодинамики для тела с трещиной

А. Гриффитс ввел в рассмотрение концепцию поверхностной энергии трещины [1] и критерий разрушения, основанный на балансе энергии:

*Трещина начинает распространяться, если скорость высвобождения энергии деформации  $G$  превосходит скорость приращения поверхностной энергии трещины  $\Sigma$  ( $\delta\Sigma = \psi\delta l$ ), где  $\delta l$  – приращение длины трещины;  $\psi$  – удельная поверхностная энергия разрушения, которая, согласно Гриффитсу, есть константа материала.*

Чтобы получить данный критерий, поверхностную энергию необходимо учитывать в законах термодинамики.

Сформулируем первое и второе начала термодинамики деформируемого твердого тела с учетом поверхностной энергии трещины для элемента двумерного континуума  $V$  (рис. 1), содержащего вершину трещины.

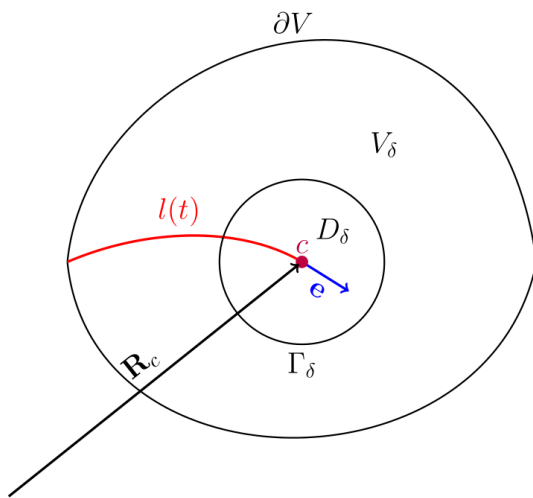


Рис. 1. Элемент объема  $\partial V$  твердого тела с трещиной  $l(t)$  (выделена красной линией):  $\mathbf{R}_c$  – вектор положения вершины трещины,  $\mathbf{e}$  – вектор направления распространения трещины,  $D_\delta$  – круг радиуса  $\delta$  с подвижной границей  $\Gamma_\delta$ ,  $V_\delta$  – внешняя область этого круга

$q$  – плотность источников объемного тепловыделения,  $\mathbf{h}_0$  – тепловой поток через поверхность.

Здесь и далее все объемные плотности рассчитаны на единицу объема в отсчетной конфигурации, поверхностные плотности – на единицу поверхности тоже в отсчетной конфигурации.

Поверхностная энергия аддитивна и допускает представление в виде интеграла

$$\Sigma = \int_l \psi dl. \quad (3)$$

Допустим также, что плотность поверхностной энергии разрушения  $\psi$  есть функция температуры  $T$ . Изменение поверхностной энергии (3) следует выражению

$$\dot{\Sigma} = \psi \dot{l}(t) + \int_{l(t)} \dot{\psi}(T) dl = \psi \dot{l}(t) + \int_{l(t)} \frac{d\psi}{dT} \dot{T} dl. \quad (4)$$

Введем вектор положения вершины  $\mathbf{R}_c$  в отсчетной конфигурации (см. рис. 1). Тогда скорость распространения трещины вычисляется следующим образом:

**Первое начало термодинамики.** Уравнение баланса энергии может быть представлено в следующем виде:

$$\dot{U} + \dot{K} + \dot{\Sigma} = N + Q, \quad (1)$$

где  $U, K$  – внутренняя и кинетическая энергия соответственно,  $N$  – мощность внешних воздействий,  $Q$  – скорость подвода тепла.

Введенные величины определяются равенствами:

$$\begin{aligned} U &= \int_V \rho_0 u dV, \\ K &= \int_V \rho_0 k dV, \quad N = \int_{\partial V} \mathbf{N} \cdot \mathbf{S}^T \cdot \mathbf{v} dS, \\ Q &= \int_V \rho_0 q dV - \int_{\partial V} \mathbf{h}_0 \cdot \mathbf{N} dS, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\rho_0$  – плотность в отсчетной конфигурации,  $u$  – плотность внутренней энергии,  $k$  – плотность кинетической энергии,  $\mathbf{v}$  – скорость точек тела,  $\mathbf{S}$  – тензор напряжений Пиолы – Кирхгофа первого рода,  $\mathbf{N}$  – вектор внешней нормали к поверхности,

$$\mathbf{v}_c = \frac{d\mathbf{R}_c}{dt} = \dot{l}(t)\mathbf{e}, \quad (5)$$

где  $\mathbf{e}$  – касательная к траектории трещины.

Первый член выражения (4) допускает представление в виде скалярного произведения скорости распространения трещины (5) на вектор поверхностной энергии  $\boldsymbol{\Psi}$  такой, что  $\boldsymbol{\Psi} \cdot \mathbf{e} = \psi$ . Физический смысл этого вектора состоит в том, что он показывает количество энергии  $\psi$ , которое необходимо затратить для распространения трещины в направлении  $\mathbf{e}$ . В квазистатическом процессе изменение температуры есть малая величина, поэтому вторым слагаемым в выражении (4) можно пренебречь, по сравнению с первым:

$$\dot{\Sigma} = \boldsymbol{\Psi} \cdot \mathbf{v}_c. \quad (6)$$

**Второе начало термодинамики.** В линейной неравновесной термодинамике показано, что локальное производство  $p$  энтропии  $S$  есть билинейная форма [33]:

$$p = \sum_k J_k X_k, \quad (7)$$

где  $X_k$  – термодинамическая сила;  $J_k$  – поток, порождаемый этой силой.

В силу второго начала термодинамики, справедливо выражение

$$P(S) = \int_V \rho_0 p dV = \dot{S} - \Psi(S) \geq 0, \quad (8)$$

где  $P$  – производство энтропии в системе,  $\Psi$  – подвод энтропии из окружения.

В термодинамике деформируемого твердого тела наиболее распространена форма записи выражения (8) как диссипативное неравенство Клаузиуса – Дюгема [34]:

$$\int_V \rho_0 p dV = \frac{d}{dt} \int_V \rho_0 s dV - \int_V \frac{\rho_0 q}{T} dV + \int_{\partial V} \frac{1}{T} \mathbf{h}_0 \cdot \mathbf{N} dS \geq 0, \quad (9)$$

где  $s$  – плотность энтропии.

Рассмотрим слабонеоднородное поле температуры и разделим объем  $V$  на систему достаточно малых объемов  $V_k$ . Будем считать, что в пределах каждого объема  $V_k$  флуктуации температуры достаточно малы. В силу данного предположения вводится следующее равенство:

$$\int_{V_k} \Phi(T) dV = \int_{V_k} [\Phi(T_k) + o(\Delta T)] dV \approx \int_{V_k} \Phi(T_k) dV, \quad (10)$$

где  $T_k = \text{const}$  – средняя температура в объеме  $V_k$ .

В каждом объеме  $V_k$  справедливо неравенство Клаузиуса – Дюгема вида

$$\int_{V_k} \rho_0 p dV = \int_{V_k} \rho_0 \dot{s} dV - \int_{V_k} \frac{\rho_0 q}{T_k} dV + \int_{\partial V_k} \frac{1}{T_k} \mathbf{h}_0 \cdot \mathbf{N} dS \geq 0. \quad (11)$$

Для каждого объема  $T_k = \text{const}$ , следовательно, можно вынести величину температуры из-под знака интеграла и умножить неравенство на эту величину:

$$\int_{V_k} \rho_0 T_k p dV = \int_{V_k} \rho_0 T_k \dot{s} dV - \int_{V_k} \rho_0 q dV + \int_{\partial V_k} \mathbf{h}_0 \cdot \mathbf{N} dS \geq 0. \quad (12)$$

Знак неравенства при умножении не изменится, так как предполагается, что рассматривается абсолютная температура  $T_k$  (она измеряется в градусах Кельвина). Суммирование по всем  $k$  дает

$$\int_V \rho_0 T p dV = \int_V \rho_0 T \dot{s} dV - \int_V \rho_0 q dV + \int_{\partial V} \mathbf{h}_0 \cdot \mathbf{N} dS \geq 0. \quad (13)$$

Второе и третье слагаемые в неравенстве (13) совпадают с величиной подвода тепла  $Q$  (см. формулу в равенствах (2)), и тогда

$$\int_V \rho_0 T p dV = \int_V \rho_0 T \dot{s} dV - Q \geq 0. \quad (14)$$



**Общая форма энергетического критерия.** Подставим скорость подвода тепла  $Q$  из уравнения баланса энергии (1) в энтропийное неравенство (14):

$$\int_V \rho_0 T p dV = \int_V \rho_0 T \dot{s} dV - \dot{U} - \dot{K} - \dot{\Sigma} + N \geq 0. \quad (15)$$

Заменим плотность внутренней энергии  $u$  на плотность свободной энергии Гельмгольца  $f$  согласно соотношению  $u = f + Ts$ :

$$\dot{U} = \frac{d}{dt} \int_V \rho_0 f dV + \frac{d}{dt} \int_V \rho_0 T s dV = \dot{F} + \int_V \rho_0 (\dot{T}s + T\dot{s}) dV. \quad (16)$$

Теперь рассмотрим квазистатический процесс деформирования и при этом пренебрежем кинетической энергией в неравенстве (15). С учетом такого допущения, подстановка (16) в (15) дает следующее неравенство:

$$-\int_V \rho_0 T p dV = \dot{F} - N + \int_V \rho_0 \dot{T} s dV + \dot{\Sigma} \leq 0. \quad (17)$$

В изотермической постановке задачи, из полученного неравенства следует известный критерий Гриффитса:

$$\dot{\Pi} + \dot{\Sigma} \leq 0 \Rightarrow i \frac{\partial}{\partial l} (\Pi + \Sigma) \leq 0, \quad (18)$$

где  $\dot{\Pi} = \dot{F} - N$  – скорость изменения потенциальной энергии тела.

В силу формулы (7), неравенство (17) должно иметь структуру, пропорциональную произведению термодинамических сил на величины потоков. Требуется знать, сколько потоков есть в рассматриваемой системе и каким процессам они отвечают. В изотермической нелинейно-упругой постановке единственный поток – это скорость распространения трещины [27].

В рамках данной работы необходимо установить, появляются ли дополнительные термодинамические силы и потоки в неизотермическом случае. Чтобы это выяснить, необходимо прямым вычислением привести неравенство (17) к виду (7).

### Энергетический критерий при хрупком разрушении

Рассмотрим распространение трещины в однородной изотропной нелинейной термоупругой среде. Плотность свободной энергии такой среды имеет вид

$$f = f(\mathbf{F}, T), \quad (19)$$

где  $\mathbf{F} = \mathbf{r} \overset{\circ}{\nabla}$  – градиент деформации ( $\overset{\circ}{\nabla} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}$  – набла-оператор в отсчетной конфигурации).

В вершине трещины свободная энергия имеет сингулярность, поэтому интеграл по объему от данной величины понимается в смысле главного значения: объем  $V$  разделяется на две области: круг  $D_\delta$  радиуса  $\delta$  с центром в вершине трещины и внешность круга  $V_\delta = V \setminus D_\delta$  (см. рис. 1). Далее вычисляется интеграл в области  $V_\delta$  и его предел при  $\delta$ , стремящемся к нулю.

При росте трещины объем  $V_\delta$  имеет подвижную границу  $\Gamma_\delta$ , поэтому производные по времени от интегралов по данному объему вычисляются с помощью транспортной теоремы Рейнольдса [35]:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_\delta} A dV = \int_{V_\delta} \dot{A} dV - \int_{\Gamma_\delta} A V_\Gamma d\Gamma, \quad (20)$$

где  $V_\Gamma = \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{N}$  – скорость движения контура  $\Gamma_\delta$  по нормали относительно точек тела.

Скорость изменения свободной энергии, в соответствии с уравнением (20), определяется равенством

$$\dot{F} = \int_{V_\delta} \rho_0 \dot{f} dV - \int_{\Gamma_\delta} \rho_0 f V_\Gamma d\Gamma. \quad (21)$$

Вычислим производную от плотности свободной энергии:

$$\rho_0 \dot{f}(\mathbf{F}, T) = \rho_0 \frac{\partial f}{\partial \mathbf{F}} : \dot{\mathbf{F}} + \rho_0 \frac{\partial f}{\partial T} \dot{T} = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{F}} - \rho_0 s \dot{T} \quad (22)$$

и подставим ее в равенство (21):

$$\dot{F} = \int_{V_\delta} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{F}} dV - \int_{V_\delta} \rho_0 s \dot{T} dV - \int_{\Gamma_\delta} \rho_0 f \mathcal{V}_\Gamma d\Gamma. \quad (23)$$

Далее принимаются два дополнительных допущения относительно условий нагружения тела с трещиной:

- берега трещины свободны от нагрузок;
- объемными силами можно пренебречь.

С учетом этих допущений и формулы Гаусса – Остроградского, первый интеграл в равенстве (23) преобразуется следующим образом:

$$\int_{V_\delta} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{F}} dV = \int_{V_\delta} \overset{\circ}{\nabla} \cdot (\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{v}) dV = \int_{\partial V} \mathbf{N} \cdot \mathbf{S}^T \cdot \mathbf{v} dS - \int_{\Gamma_\delta} \mathbf{N} \cdot \mathbf{S}^T \cdot \mathbf{v} d\Gamma. \quad (24)$$

Энтропия  $s$  имеет сингулярность в вершине, так как  $s = -\frac{\partial f}{\partial T}$ , поэтому интегральное слагаемое в неравенстве (17) также понимается в смысле главного значения.

Подстановка формул (6), (23) и (24) в неравенство (17) дает другое неравенство:

$$-\int_{\Gamma_\delta} \rho_0 f \mathcal{V}_\Gamma d\Gamma - \int_{\Gamma_\delta} \mathbf{N} \cdot \mathbf{S}^T \cdot \mathbf{v} d\Gamma + \boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{v}_c \leq 0. \quad (25)$$

Введем вектор относительного отсчетного положения вершины трещины  $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{R} - \mathbf{R}_c$  и относительное актуальное положение точек в виде  $\mathbf{r}'(\boldsymbol{\rho}, t) = \mathbf{r}(\mathbf{R}_c + \boldsymbol{\rho}, t) = \mathbf{r}(\mathbf{R}, t)$ . Тогда скорость точек тела можно выразить следующим образом:

$$\mathbf{v}(\mathbf{R}, t) = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{r}'}{\partial t} - \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_c. \quad (26)$$

С учетом данного соотношения уравнение (25) принимает вид

$$\int_{\Gamma_\delta} \rho_0 f \mathcal{V}_\Gamma d\Gamma + \int_{\Gamma_\delta} \mathbf{N} \cdot \mathbf{S}^T \cdot \frac{\partial \mathbf{r}'}{\partial t} d\Gamma - \mathbf{v}_c \cdot \int_{\Gamma_\delta} \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{N} d\Gamma - \boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{v}_c \geq 0. \quad (27)$$

Вычислим предел соотношения (27) при  $\delta \rightarrow 0$ :

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\Gamma_\delta} \rho_0 f \mathcal{V}_\Gamma d\Gamma = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\Gamma_\delta} \rho_0 f \mathcal{V}_\Gamma \cdot \mathbf{N} d\Gamma = \mathbf{v}_c \cdot \int_c \rho_0 f \mathbf{N}, \quad (28)$$

где введено обозначение  $\int_c f = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\Gamma_\delta} f d\Gamma$ .

Предполагается, что данный предел существует и конечен, так как для упругого тела энергия имеет особенность вида  $1/r$  [7]. Остальные слагаемые из соотношения (27) вычисляются в соответствии с равенствами

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\Gamma_\delta} \mathbf{N} \cdot \mathbf{S}^T \cdot \frac{\partial \mathbf{r}'}{\partial t} d\Gamma = 0. \quad (29)$$

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \mathbf{v}_c \cdot \int_{\Gamma_\delta} \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{N} d\Gamma = \mathbf{v}_c \cdot \int_{\bar{n}} \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{N}. \quad (30)$$

Данный предел существует и конечен, так как  $\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{S}$  имеет тот же вид особенности, что и энергия, а именно  $1/r$ . Доказательство предельного перехода (29) можно найти в статье [10].





После совершения указанных предельных переходов, неравенство (27) преобразуется к виду

$$\mathbf{v}_c \cdot \mathbf{f} \geq 0, \quad (31)$$

где введены вспомогательные обозначения:

$$\mathbf{f} = \mathbf{J} - \boldsymbol{\psi}, \quad (32)$$

$$\mathbf{J} = \int_c (\rho_0 f \mathbf{E} - \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{S}) \cdot \mathbf{N}, \quad (33)$$

где  $\mathbf{E}$  – единичный тензор второго ранга.

Заметим, что подинтегральное выражение в формуле (33), стоящее в круглых скобках, представляет собой тензор энергии-импульса Эшелби.

### Интерпретация результатов

Отметим некоторые особенности полученного энергетического критерия разрушения, представленного формулой (31).

**Вектор потока энергии.**  $\mathbf{J}$ -интеграл<sup>1</sup> (33) есть векторная форма интеграла Черепанова – Райса [4]. Данный интеграл был впервые получен Дж. Эшелби [36] в следующей форме:

$$\mathbf{J}(\Omega) = \int_{\Gamma} (\rho_0 f \mathbf{E} - \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{S}) \cdot \mathbf{N} d\Gamma, \quad (34)$$

где  $\Omega$  – некоторая конечная область материала,  $\Gamma$  – граница области  $\Omega$ .

Позднее этот интеграл появился в работах по механике разрушения в виде компонент вектора  $\mathbf{J}$ , которые обычно обозначают как интегралы  $J_1$  и  $J_2$  [13, 14];  $J_1$  – проекция потока энергии на направление распространения трещины  $\mathbf{e}$ ,  $J_2$  – проекция на направление, ортогональное к вектору  $\mathbf{e}$ .

**Утверждение.** Важным свойством вектора потока энергии  $\mathbf{J}(\Omega)$  является его инвариантность: в условиях статического равновесия в однородном поле температуры поток энергии равен нулю на любом замкнутом контуре, проходящем в области однородного материала.

**Доказательство.** Рассмотрим конечную область  $\Omega$  однородного материала, ограниченную контуром  $\Gamma = \Gamma_f \cup \Gamma_c^+ \cup \Gamma_\varepsilon \cup \Gamma_c^-$  (рис. 2) и вычислим поток энергии в этой области:

$$\mathbf{J}(\Gamma) = \int_{\Gamma} (\rho_0 f \mathbf{E} - \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{S}) \cdot \mathbf{N} d\Gamma = \mathbf{J}(\Omega) = \int_{\Omega} \overset{\circ}{\nabla}(\rho_0 f) dV - \int_{\Omega} \overset{\circ}{\nabla} \cdot (\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{F}) dV. \quad (35)$$

Преобразуем первый интеграл в выражении (35) следующим образом:

$$\int_{\Omega} \overset{\circ}{\nabla}(\rho_0 f) dV = \int_{\Omega} \left( \rho_0 \frac{\partial f}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{F} \overset{\circ}{\nabla} + \rho_0 \frac{\partial f}{\partial T} \overset{\circ}{\nabla} T \right) dV. \quad (36)$$

Аналогично преобразуем второй интеграл в том же выражении:

$$-\int_{\Omega} \overset{\circ}{\nabla} \cdot (\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{F}) dV = -\int_{\Omega} \left( \left( \overset{\circ}{\nabla} \cdot \mathbf{S}^T \right) \cdot \mathbf{F} + \mathbf{S} : \mathbf{F} \overset{\circ}{\nabla} \right) dV = -\int_{\Omega} \mathbf{S} : \mathbf{F} \overset{\circ}{\nabla} dV. \quad (37)$$

Складывая оба интеграла, получаем:

$$\mathbf{J}(\Omega) = -\int_{\Omega} \rho_0 s \overset{\circ}{\nabla} T dV. \quad (38)$$

В однородном температурном поле интеграл (38) тождественно равен нулю. Следовательно, равен нулю и исходный интеграл по контуру  $\Gamma$ :

$$\mathbf{J}(\Gamma) = \mathbf{J}(\Gamma_f) + \mathbf{J}(\Gamma_c^+) + \mathbf{J}(\Gamma_c^-) - \mathbf{J}(\Gamma_\varepsilon) = 0; \quad (39)$$

на контуре  $\Gamma_\varepsilon$  принято направление нормали, совпадающее с контуром  $\Gamma_f$ .

<sup>1</sup> Г. П. Черепанов в своей книге [7] использовал для обозначения данной величины термин «вектор потока энергии», поэтому далее нами используется именно он для обозначения  $\mathbf{J}$ -интеграла.

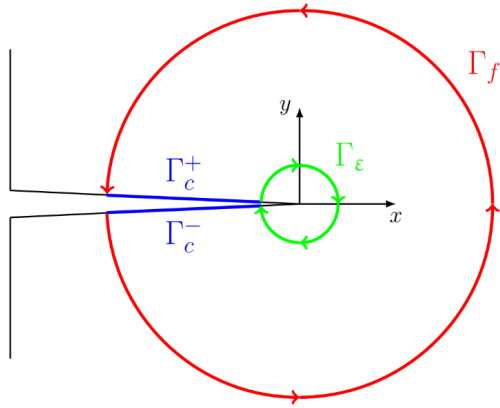


Рис. 2. Контур интегрирования  $\Gamma = \Gamma_f \cup \Gamma_c^+ \cup \Gamma_\varepsilon \cup \Gamma_c^-$ , ограничивающий область, не содержащую вершины трещины

На берегах  $\Gamma_c^+$ ,  $\Gamma_c^-$  прямолинейной трещины, компонента  $J_1$  потока энергии равна нулю, следовательно

$$J_1(\Gamma_f) = J_1(\Gamma_\varepsilon).$$

Полученное равенство доказывает инвариантность интеграла  $J_1$  в силу произвольности выбора контура  $\Gamma_f$ .

Инвариантность  $J_2$  обеспечивается только в случае учета при его вычислении берегов трещины

$$J_2 = J_2(\Gamma_f) + J_2(\Gamma_c^+) + J_2(\Gamma_c^-).$$

Утверждение доказано.

Различным аспектам задачи вычисления  $J_2$  с учетом берегов трещины посвящены работы [15, 37 – 39] и многие другие.

Вектор потока энергии в линейной термоупругости. Рассмотрим следующее определение свободной энергии однородного, линейно термоупругого тела:

$$\rho_0 f(\boldsymbol{\varepsilon}, T) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : {}^4\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} - (T - T_0) \boldsymbol{\alpha} : {}^4\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{2} (T - T_0) \boldsymbol{\alpha} : {}^4\mathbf{C} : \boldsymbol{\alpha} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^e : {}^4\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^e, \quad (40)$$

где  $\boldsymbol{\varepsilon}^e = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\alpha}(T - T_0)$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}^T = \boldsymbol{\alpha}(T - T_0)$  – тензоры упругой и термической деформации, соответственно;  ${}^4\mathbf{C} = \text{const}$  – тензор упругих модулей;  $\boldsymbol{\alpha} = \text{const}$  – тензор коэффициентов линейного теплового расширения.

В таком представлении энтропия следует выражению

$$\rho_0 s = -\rho_0 \frac{\partial f}{\partial T} = \boldsymbol{\alpha} : {}^4\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} - (T - T_0) \boldsymbol{\alpha} : {}^4\mathbf{C} : \boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\alpha}. \quad (41)$$

Тогда выражение (38) примет вид

$$\mathbf{J} = \int_{\Gamma} \left( \rho_0 f \mathbf{E} - \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \cdot \mathbf{N} d\Gamma = - \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\alpha} \left( \overset{\circ}{\nabla} T \right) dV, \quad (42)$$

где  $\boldsymbol{\sigma}$  – тензор напряжений Коши,  $\mathbf{u}$  – вектор перемещений.

На основе уравнения (42) выразим интеграл по малому контуру  $\Gamma_\varepsilon$ :

$$\mathbf{J}(\Gamma_\varepsilon) = \mathbf{J}(\Gamma_c) + \int_{\Gamma_f} \left( \rho_0 f \mathbf{E} - \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \cdot \mathbf{N} d\Gamma + \int_{\Omega} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\alpha}) \overset{\circ}{\nabla} T dV, \quad (43)$$

где  $\Gamma_c = \Gamma_c^+ \cup \Gamma_c^-$ .

В изотропной линейно-упругой среде, где  $\boldsymbol{\alpha} = \alpha \mathbf{E}$ , выражение для  $\mathbf{J}(\Gamma_\varepsilon)$  (43) можно преобразовать к виду

$$\mathbf{J}(\Gamma_\varepsilon) = \mathbf{J}(\Gamma_c) + \int_{\Gamma_f} \left( \rho_0 f \mathbf{E} - \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \cdot \mathbf{N} d\Gamma + \alpha \int_{\Omega} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \overset{\circ}{\nabla} T dV. \quad (44)$$

Покомпонентное представление вектора  $\mathbf{J}(\Gamma_\varepsilon)$  имеет следующий вид:

$$J_1 = \int_{\Gamma_f} \left( \rho_0 f N_1 - \mathbf{N} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \right) + \alpha \int_{\Omega} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \frac{\partial T}{\partial x} dV, \quad (45)$$

$$J_2 = \int_{\Gamma_f} \left( \rho_0 f N_2 - \mathbf{N} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \right) d\Gamma + \int_{\Gamma_c} [\rho_0 f] d\Gamma + \alpha \int_{\Omega} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \frac{\partial T}{\partial y} dV, \quad (46)$$



где  $[[A]] = A_+ - A_-$  – скачок величины  $A$  на берегах трещины.

Подобный результат приведен в работах [18, 8].

**О трещинодвижущей силе и диссипации.** Как было отмечено ранее, неравенство (17) и, как следствие, неравенство (31) имеют структуру, пропорциональную произведению термодинамических сил на потоки. В силу данного факта можно заключить, что скорость распространения трещины есть поток, а вектор  $\mathbf{f}$  (32) есть трещинодвижущая сила. С использованием определения скорости распространения трещины (5) неравенство (31) можно переписать в скалярном виде:

$$\dot{i}(J - \psi) \geq 0, \quad (47)$$

где  $J = \mathbf{e} \cdot \mathbf{J} = J_1$ ,  $\psi = \mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\psi}$ .

Эта форма неравенства тождественна энергетическому критерию Гриффитса: трещина начинает распространяться в том случае, если выделение энергии  $J$  в теле превышает некоторое критическое значение  $\psi$ , т. е.

$$\dot{i} > 0 \Rightarrow J \geq \psi. \quad (48)$$

Отметим тот факт, что скорость распространения трещины  $\mathbf{v}_c$  является единственным термодинамическим потоком в данной модели, а трещинодвижущая сила  $\mathbf{f}$  – единственной термодинамической силой в термомеханическом процессе. Таким образом, с точки зрения термодинамики процесс разрушения полностью определяется трещинодвижущей силой (32). В силу данного факта можно считать  $\mathbf{J}$ -интеграл единственным параметром разрушения. При этом слабонеоднородное температурное поле не создает дополнительных термодинамических потоков, и, что более важно, дополнительных трещинодвижущих сил. Этот факт позволяет с одинаковым успехом пользоваться  $\mathbf{J}$ -интегралом как в изотермической, так и в неизотермической постановках задачи механики разрушения.

**Кинетическое уравнение распространения трещины.** Для описания процесса разрушения недостаточно знать напряженно-деформированное состояние среды в данный момент времени, поскольку это состояние зависит от геометрических параметров трещины. Ввиду этого необходимо сформулировать дополнительное определяющее соотношение, связывающее геометрические характеристики трещины с известными функциями напряженно-деформированного состояния. Одной из возможных формулировок определяющего соотношения является кинетическое уравнение вида

$$\mathbf{v}_c = \mathbf{v}_c(\mathbf{f}), \quad (49)$$

так как трещинодвижущая сила  $\mathbf{f}$ , по своему определению (33) и (32), является функцией напряженно-деформированного состояния среды.

Также допустимо кинетическое уравнение вида

$$\mathbf{v}_c = \mathbf{v}_c(\mathbf{J}), \quad (50)$$

так как из неравенства (31) следует более слабое:  $\mathbf{v}_c \cdot \mathbf{J} \geq 0$ .

Неравенство (31) может служить ограничением на параметры данного определяющего соотношения. Простейшие формы определяющих соотношений (49) – линейные (см. статью [27]).

### Заключение

В данной работе авторами предложен метод получения критерия разрушения, базирующийся непосредственно на законах термодинамики. Данный подход применим при условиях хрупкого квазистатического разрушения в слабонеоднородном температурном поле. Для введения в законы термодинамики параметров разрушения использована концепция поверхностной энергии Гриффитса, дополненная зависимостью указанной энергии от температуры.

Получен энергетический критерий разрушения для оговоренных выше условий, который по форме совпадает с критерием Гриффитса. Показано, что в слабонеоднородном температурном поле не возникает каких-либо дополнительных термодинамических потоков, кроме скорости роста трещины; это позволяет распространить критерий Гриффитса на неизотермический случай.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Griffith A. A.** The phenomena of rupture and flow in solids // *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*. 1921. Vol. 221. No. 582–593. Pp. 163–198.
2. **Колосов Г. В.** Об одном приложении теории функций комплексного переменного к плоской задаче математической теории упругости. Юрьев: Типогр. Маттисена, 1909. 187 с.
3. **Inglis C. E.** Stresses in a plate due to the presence of cracks and sharp corners // *Transactions of the Institution of Naval Architects*. 1913. Vol. 55. Pp. 219–241.
4. **Rice J. R.** A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks // *Journal of Applied Mechanics*. 1968. Vol. 35. No. 2. Pp. 379–386.
5. **Atkinson C., Eshelby J. D.** The flow of energy into the tip of a moving crack // *International Journal of Fracture Mechanics*. 1968. Vol. 4. No. 1. Pp. 3–18.
6. **Черепанов Г. П.** О распространении трещин в сплошной среде // *Прикладная математика и механика*. 1967. Т. 31. № 3. С. 476–488.
7. **Черепанов Г. П.** Механика хрупкого разрушения. М.: Наука, 1974. 640 с.
8. **Kishimoto K., Aoki S., Sakata M.** On the path independent integral- $\hat{J}$  // *Engineering Fracture Mechanics*. 1980. Vol. 13. No. 4. Pp. 841–850.
9. **Khan D., Biswas K.** Circular arc crack under dynamic load: a generalized approach for energy release rate // *International Journal of Fracture*. 2006. Vol. 141. No. 1–2. Pp. 27–35.
10. **Gurtin M. E.** On the energy release rate in quasi-static elastic crack propagation // *Journal of Elasticity*. 1979. Vol. 9. No. 2. Pp. 187–195.
11. **Irwin G. R.** Analysis of stresses and strains near the end of crack traversing a plate // *Journal of Applied Mechanics*. 1957. Vol. 24. No. 3. Pp. 361–364.
12. **Erdogan F.** Stress intensity factors // *Journal of Applied Mechanics*. 1983. Vol. 50. No. 4b. Pp. 992–1002.
13. **Knowles J. K., Sternberg E.** On a class of conservation laws on linearized and finite elastostatics // *Archive for Rational Mechanics and Analysis*. 1972. Vol. 44. No. 3. Pp. 187–211.
14. **Budiansky B., Rice J. R.** Conservation laws and energy-release rates // *Journal of Applied Mechanics*. 1973. Vol. 40. No. 1. Pp. 201–203.
15. **Eishen J. W.** An improved method for computing the  $J_2$  integral // *Engineering Fracture Mechanics*. 1987. Vol. 26. No. 5. Pp. 691–700.
16. **Hutchinson J. W.** Singular behaviour at the end of a tensile crack in a hardening material // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1968. Vol. 16. No. 1. Pp. 13–31.
17. **Rice J. R., Rosengren G. F.** Plane strain deformation near a crack tip in a power-law hardening material // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1968. Vol. 16. No. 1. Pp. 1–12.
18. **Wilson W. K., Yu J.-W.** The use of  $J$ -integral in thermal stress crack problems // *International Journal of Fracture*. 1979. Vol. 15. No. 4. Pp. 377–387.
19. **Chen W.-H., Chen K.-T.** On the study of mixed mode thermal fracture using modified  $J_k$  integrals // *International Journal of Fracture*. 1981. Vol. 17. No. 5. Pp. R99–R103.
20. **Bui H. D.** A path-independent integral for mixed modes of fracture in linear thermoelasticity // В. А. Bilby et al. (Eds.). *Proceedings of “Fundamentals of Deformation and Fracture. Eshelby Memorial” Symposium*. Sheffield, 2–5 April 1984. Cambridge: Cambridge University Press, 1985. Pp. 597–604.
21. **Li X.**  $J$ -integral and  $J^*$ -integral in thermal stress conditions // *Engineering Fracture Mechanics*. 1993. Vol. 45. No. 5. Pp. 713–715.
22. **Партон В. З., Кудрявцев Б. А.** Электромагнитоупругость пьезоэлектрических и электропроводных тел. М.: Наука, 1988. 470 с.
23. **Dascalu C., Maugin G. A.** Energy-release rates and path-independent integrals in electroelastic crack propagation // *International Journal of Engineering Science*. 1994. Vol. 32. No. 5. Pp. 755–765.



24. **Benkaci N., Maugin G.** *J*-integral computation for piezo-ceramics // *Revue Européenne des Éléments Finis*. 2001. Vol. 10. No. 1. Pp. 99–128.
25. **Gao C. F., Zhao M., Tong P., Zhang T. Y.** The energy release rate and the *J*-integral of an electrically insulated crack in a piezoelectric material // *International Journal of Engineering Science*. 2004. Vol. 42. No. 19–20. Pp. 2175–2192.
26. **Ricoeur A., Enderlein M., Kuna M.** Calculation of the *J*-integral for limited permeable cracks in piezoelectrics // *Archive of Applied Mechanics*. 2005. Vol. 74. No. 8. Pp. 536–549.
27. **Gurtin M. E., Podio-Guidugli P.** Configurational forces and the basic laws for crack propagation // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1996. Vol. 44. No. 6. Pp. 905–927.
28. **Gurtin M. E., Podio-Guidugli P.** Configurational forces and a constitutive theory for crack propagation that allows for kinking and curving // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1998. Vol. 46. No. 8. Pp. 1343–1378.
29. **Maugin G.** Configurational forces. Thermomechanics, Physics, Mathematics, and Numerics. Boca Raton: CRC Press, 2016. 562 p.
30. **Simha N. K., Fischer F. D., Kolednik O., Chen C. R.** Inhomogeneity effects on the crack driving force in elastic and elastic–plastic materials // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2003. Vol. 51. No. 1. Pp. 209–240.
31. **Gürses E., Meihe C.** A computational framework of three-dimensional configurational-force-driven brittle crack propagation // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2009. Vol. 198. No. 15–16. Pp. 1413–1428.
32. **Kaczmarczyk Ł., Ullah Z., Pearce C. J.** Energy consistent framework for continuously evolving 3D crack propagation // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2017. 1 September. Vol. 324. Pp. 54–73.
33. **Гленсдорф П., Пригожин И.** Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. Пер. с англ. под ред. Ю. А. Чизмаджаева. М.: Мир, 1973. 280 с.
34. **Пальмов В. А.** Нелинейная механика деформируемых тел. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2014. 793 с.
35. **Collado F. J.** Reynolds transport theorem for a two-phase flow // *Applied Physics Letters*. 2007. Vol. 90. No. 2. P. 024101.
36. **Eshelby J. D.** The force on an elastic singularity // *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*. 1951. Vol. 244. No. 877. Pp. 87–112.
37. **Tafreshi A.** Efficient evaluation of the  $J_2$ -integral using the boundary element crack shape sensitivities // *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 2015. Vol. 76. April. Pp. 9–16.
38. **Фролов М. М., Савиковский А. В., Семенов А. С.** Влияние формы контура на значения интегралов  $J_1$  и  $J_2$  при смешанной моде разрушения // Неделя науки ФизМех. СПбПУ Петра Великого. Сборник материалов Всероссийской научной конференции, 3–7 апреля 2023. СПб.: Политех-Пресс, СПбПУ, 2023. С. 322–324.
39. **Савиковский А. В., Фролов М. М., Семенов А. С.** Вычисление коэффициентов интенсивности напряжений на основе контурных интегралов  $J_1$  и  $J_2$  с учетом берегов трещины при смешанной моде разрушения // Неделя науки ФизМех СПбПУ Петра Великого. Сборник материалов Всероссийской научной конференции, 2023. СПб.: Политех-Пресс, СПбПУ, 2023. С. 294–297.

## REFERENCES

1. **Griffith A. A.**, The phenomena of rupture and flow in solids, *Phil. Trans. R. Soc. A*. 221 (582–593) (1921) 163–198.
2. **Kolosov G. V.**, Ob odnom prilozhenii teorii funktsiy kompleksnogo peremennogo k ploskoy zadache matematicheskoy teorii uprugosti [On an application of the theory of functions of a complex variable to a plane problem of the mathematical theory of elasticity], Mattisen’s Printing House, Yuriev, 1909 (in Russian).
3. **Inglis C. E.**, Stresses in a plate due to the presence of cracks and sharp corners, *Trans. Institut. Naval Architect.* (London). 55 (1913) 219–241.
4. **Rice J. R.**, A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks, *J. Appl. Mech.* 35 (2) (1968) 379–386.

5. Atkinson C., Eshelby J. D., The flow of energy into the tip of a moving crack, *Int. J. Fract. Mech.* 4 (1) (1968) 3–18.
6. Cherepanov G. P., Crack propagation in continuous media, *J. Appl. Math & Mech.* 31 (3) (1967) 476–488.
7. Cherepanov G. P., *Mechanics of brittle fracture*, McGraw-Hill, New York, 1979.
8. Kishimoto K., Aoki S., Sakata M., On the path independent integral- $\hat{J}$ , *Eng. Fract. Mech.* 13 (4) (1980) 841–850.
9. Khan D., Biswas K., Circular arc crack under dynamic load: a generalized approach for energy release rate, *Int. J. Fract.* 141 (1–2) (2006) 27–35.
10. Gurtin M. E., On the energy release rate in quasi-static elastic crack propagation, *J. Elasticity.* 9 (2) (1979) 187–195.
11. Irwin G. R., Analysis of stresses and strains near the end of crack traversing a plate, *J. Appl. Mech.* 24 (3) (1957) 361–364.
12. Erdogan F., Stress intensity factors, *J. Appl. Mech.* 50 (4b) (1983) 992–1002.
13. Knowles J. K., Sternberg E., On a class of conservation laws on linearized and finite elastostatics, *Arch. Ration. Mech. Anal.* 44 (3) (1972) 187–211.
14. Budiansky B., Rice J. R., Conservation laws and energy-release rates, *J. Appl. Mech.* 40 (1) (1973) 201–203.
15. Eishen J. W., An improved method for computing the  $J_2$  integral, *Eng. Fract. Mech.* 26 (5) (1987) 691–700.
16. Hutchinson J. W., Singular behaviour at the end of a tensile crack in a hardening material, *J. Mech. Phys. Solids.* 16 (1) (1968) 13–31.
17. Rice J. R., Rosengren G. F., Plane strain deformation near a crack tip in a power-law hardening material, *J. Mech. Phys. Solids.* 16 (1) (1968) 1–12.
18. Wilson W. K., Yu J.-W., The use of  $J$ -integral in thermal stress crack problems, *Int. J. Fract.* 15 (4) (1979) 377–387.
19. Chen W.-H., Chen K.-T., On the study of mixed mode thermal fracture using modified  $J_k$  integrals, *Int. J. Fract.* 17 (5) (1981) R99–R103.
20. Bui H. D., A path-independent integral for mixed modes of fracture in linear thermoelasticity, In book: B. A. Bilby et al. (Eds.), *Proc. “Fundamentals of Deformation and Fracture. Eshelby Memorial” Symp.*, Sheffield, 2–5 April 1984, Cambridge University Press, Cambridge (1985) 597–604.
21. Li X.,  $J$ -integral and  $J^*$ -integral in thermal stress conditions, *Eng. Fract. Mech.* 45 (5) (1993) 713–715.
22. Parton V. Z., Kudryavtsev B. A., *Electromagnetoelasticity: Piezo-electrics and electrically conductive solids*, Gordon and Breach Science Publishers Ltd., New York, 1988.
23. Dascalu C., Maugin G. A., Energy-release rates and path-independent integrals in electroelastic crack propagation, *Int. J. Eng. Sci.* 32 (5) (1994) 755–765.
24. Benkaci N., Maugin G.,  $J$ -integral computation for piezo-ceramics, *Rev. Europ. Éléments Finis.* 10 (1) (2001) 99–128.
25. Gao C. F., Zhao M., Tong P., Zhang T. Y., The energy release rate and the  $J$ -integral of an electrically insulated crack in a piezoelectric material, *Int. J. Eng. Sci.* 42 (19–20) (2004) 2175–2192.
26. Ricoeur A., Enderlein M., Kuna M., Calculation of the  $J$ -integral for limited permeable cracks in piezoelectrics, *Arch. Appl. Mech.* 74 (8) (2005) 536–549.
27. Gurtin M. E., Podio-Guidugli P., Configurational forces and the basic laws for crack propagation, *J. Mech. Phys. Sol.* 44 (6) (1996) 905–927.
28. Gurtin M. E., Podio-Guidugli P., Configurational forces and a constitutive theory for crack propagation that allows for kinking and curving, *J. Mech. Phys. Sol.* 46 (8) (1998) 1343–1378.
29. Maugin G., *Configurational forces. Thermomechanics, Physics, Mathematics, and Numerics*, CRC Press, Boca Raton, 2016.
30. Simha N. K., Fischer F. D., Kolednik O., Chen C. R., Inhomogeneity effects on the crack driving force in elastic and elastic–plastic materials, *J. Mech. Phys. Sol.* 51 (1) (2003) 209–240.
31. Gürses E., Meihe C., A computational framework of three-dimensional configurational-force-driven brittle crack propagation, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 198 (15–16) (2009) 1413–1428.
32. Kaczmarczyk Ł., Ullah Z., Pearce C. J., Energy consistent framework for continuously evolving 3D crack propagation, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 324 (1 Sept) (2017) 54–73.



33. **Glansdorff P., Prigogine I.**, Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuation, Wiley-Interscience, Hoboken, USA, 1971.
34. **Palmov V. A.**, Nelineynaya mekhanika deformiruyemykh tel [Nonlinear mechanics of deformable bodies], Polytechnical University Publ., St. Petersburg, 2014 (in Russian).
35. **Collado F. J.**, Reynolds transport theorem for a two-phase flow, Appl. Phys. Lett. 90 (2) (2007) 024101.
36. **Eshelby J. D.**, The force on an elastic singularity, Phil. Trans. R. Soc. London. 244 (877) (1951) 87–112.
37. **Tafreshi A.**, Efficient evaluation of the  $J_2$ -integral using the boundary element crack shape sensitives, Theor. Appl. Fract. Mech. 76 (April) (2015) 9–16.
38. **Frolov M. M., Savikovskiy A. V., Semenov A. S.**, Vliyaniye formy kontura na znacheniya integralov  $J_1$  i  $J_2$  pri smeshannoy mode razrusheniya [The contour shape influence on the values of  $J_1$  and  $J_2$  integrals in a mixed mode fracture], The Science Week at FizMekh, The Information Package of The All-Russian Scientific Conference, 03–07 April, 2023, SPbPU, St. Petersburg (2023) 322–324 (in Russian).
39. **Savikovskiy A. V., Frolov M. M., Semenov A. S.**, Vychisleniye koeffitsiyentov intensivnosti napryazheniy na osnove konturnykh integralov  $J_1$  i  $J_2$  s uchetom beregov treshchiny pri smeshannoy mode razrusheniya [Calculation of stress intensity factors based on  $J_1$  and  $J_2$  contour integrals with consideration of crack banks in the mixed mode fracture], The Science Week at FizMekh, The Information Package of The All-Russian Scientific Conference, 03–07 April, 2023, SPbPU, St. Petersburg (2023) 294–297 (in Russian).

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ФРОЛОВ Максим Максимович** – инженер отдела энергетического машиностроения Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
frolov.mm@bk.ru  
ORCID: 0009-0005-2924-9795

**САВИКОВСКИЙ Артем Викторович** – инженер лаборатории «Механика материалов» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого; инженер-конструктор АО «Силловые машины – ЗТЛ, ЛМЗ, Электросила, Энергомашэкспорт», Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
savikovskii.artem@yandex.ru  
ORCID: 0000-0003-1710-1943

**СЕМЕНОВ Артем Семенович** – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы механики и процессов управления, старший научный сотрудник Научно-образовательного центра «Цифровой инжиниринг в атомной и термоядерной энергетике» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
semenov.artem@googlemail.com  
ORCID: 0000-0002-8225-3487

#### THE AUTHORS

**FROLOV Maxim M.**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
frolov.mm@bk.ru  
ORCID: 0009-0005-2924-9795

**SAVIKOVSKII Artem V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
Joint Stock Company “Power machines – ZTL, LMZ, Electrosila,  
Energomachexport” (JSC “Power machines”)  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
savikovskii.artem@yandex.ru  
ORCID: 0000-0003-1710-1943*

**SEMENOV Artem S.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
semenov.artem@googlemail.com  
ORCID: 0000-0002-8225-3487*

*Статья поступила в редакцию 04.06.2024. Одобрена после рецензирования 12.07.2024.  
Принята 12.07.2024.  
Received 04.06.2024. Approved after reviewing 12.07.2024. Accepted 12.07.2024.*



## Прикладная и вычислительная математика

Научная статья

УДК 519.63

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17415>

### **СРАВНЕНИЕ АДАПТИВНЫХ АЛГОРИТМОВ РЕШЕНИЯ ПЛОСКИХ ЗАДАЧ ЛИНЕЙНОЙ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ НА ОСНОВЕ ЭЛЕМЕНТОВ РАВЬЯРА – ТОМА НУЛЕВОГО И ПЕРВОГО ПОРЯДКОВ**

**Д. А. Петухов <sup>□</sup>, М. Е. Фролов**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

<sup>□</sup> [d\\_a\\_petukhov@mail.ru](mailto:d_a_petukhov@mail.ru)

**Аннотация.** Функциональные апостериорные оценки погрешности известны для многих задач теории упругости. Однако, как следует из работы С. И. Репина и А. В. Музалевского, применение классических аппроксимаций метода конечных элементов при их реализации может вести к растущей переоценке абсолютного значения ошибки. Позднее, в работе М. Е. Фролова показано, что применение аппроксимаций, характерных для смешанных методов конечных элементов, позволяет избежать возрастания переоценки абсолютной величины ошибки с измельчением сеток. Дальнейшие исследования в этом направлении проводились М. Е. Фроловым и М. А. Чуриловой с использованием простейших аппроксимаций Равьяра – Тома и Арнольда – Боффи – Фалка. В данной работе проведен сравнительный анализ конечных элементов Равьяра – Тома нулевого и первого порядков. На примере плоских задач линейной теории упругости показано, что применение аппроксимации Равьяра – Тома первого порядка существенно снижает переоценку абсолютной величины ошибки.

**Ключевые слова:** метод конечных элементов, надежные апостериорные оценки погрешности, элементы Равьяра – Тома

**Для цитирования:** Петухов Д. А., Фролов М. Е. Сравнение адаптивных алгоритмов решения плоских задач линейной теории упругости на основе элементов Равьяра – Тома нулевого и первого порядков // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 161–174. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17415>

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.17415>

### **A COMPARISON OF ADAPTIVE ALGORITHMS FOR SOLVING PLANE PROBLEMS IN THE LINEAR ELASTICITY THEORY USING THE ZERO- AND FIRST-ORDER RAVIART – THOMAS ELEMENTS**

**D. A. Petukhov <sup>□</sup>, M. E. Frolov**

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

<sup>□</sup> [d\\_a\\_petukhov@mail.ru](mailto:d_a_petukhov@mail.ru)

**Abstract.** Functional-type a posteriori error estimates are known for many problems of the elasticity theory. However, as followed from the work of S. I. Repin and A. V. Muzalevsky, the use of classical Finite Element Method (FEM) approximations for their implementation

may lead to a growing overestimation of the absolute value of an error. Later, in the work of M. E. Frolov, it was shown that the use of approximations for mixed FEMs avoids a growing overestimation of the absolute error with mesh refinements. Further research in this direction was carried out by M. E. Frolov and M. A. Churilova using the simplest Raviart – Thomas and Arnold – Boffi – Falk approximations. In this paper, a comparative analysis is performed for zero-order and first-order Raviart – Thomas finite elements. It is shown for plane problems of linear elasticity that the use of the first-order Raviart – Thomas approximation significantly reduces an overestimation of the absolute error value.

**Keywords:** finite element method, reliable a posteriori error estimates, Raviart – Thomas elements

**For citation:** Petukhov D. A., Frolov M. E., A comparison of adaptive algorithms for solving plane problems in the linear elasticity theory using the zero- and first-order Raviart – Thomas elements, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 161–174. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17415>

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

### Введение

Решение подавляющего большинства прикладных инженерных задач не может быть получено аналитическим путем, ввиду наличия геометрической и физической нелинейности, а также нетривиальности расчетных областей, что приводит даже в линейном случае к отсутствию классического решения краевой задачи. Тогда решения строятся в обобщенном смысле, в связи с чем целесообразно использовать численные методы решения в рамках строгого математического или имитационного моделирования. В процессе моделирования возникает несколько источников ошибок:

ошибка модели, которая включает разницу между реальным объектом или процессом и точным решением соответствующей краевой задачи;

ошибка дискретизации, которая включает разницу между непрерывным решением и его дискретным аналогом;

вычислительная ошибка, которая может накапливаться в ходе решения, ввиду особенностей приближенных вычислений.

В итоге все три компонента оказывают влияние на конечный результат расчетов. При этом важно отделять погрешность модели от остальных, которые для этого необходимо оценивать. В связи с этим актуальны исследования методов оценки и контроля ошибки, содержащейся в приближенном решении.

Как правило, для оценки погрешности полученного решения используют апостериорные оценки точности. В отличие от априорных оценок, они позволяют получать локальное распределение погрешности, а также количественно оценивать полученное численное решение.

Принципиальный вид апостериорной оценки следующий:

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\| \leq M(\mathbf{u}_h, D), \quad (1)$$

где  $\mathbf{u}$  – точное решение в рамках рассматриваемой математической постановки,  $\mathbf{u}_h$  – приближенное решение,  $D$  – исходные данные задачи (коэффициенты уравнений, геометрия области, правая часть, граничные условия и т. п.),  $M(\mathbf{u}_h, D)$  – мажоранта.

В левой части выражения (1) для оценки отклонения численного решения от точного часто используется энергетическая норма. Важно отметить, что правая часть (1), в отличие от априорных оценок, содержит известное приближенное решение и данные задачи, т. е. может быть вычислена явно.

Исследования в данной области получили активное развитие, начиная с 1980-х гг. На данный момент существует ряд устоявшихся подходов к построению апостериорных оценок. Часть из них основана на явном или неявном методе невязок. Первыми работами данной группы методов считаются статьи [1, 2]. Существенную роль в их обосновании



играет оператор интерполирования Клемана, описанный в работе [3], и подобные ему операторы. Дальнейшее развитие данные методы получили в стохастическом методе Галёркина [4], в погруженном методе конечных элементов (*англ.* immersed finite element method) [5], в методе виртуальных элементов (*англ.* virtual element method) [6] и других.

Широкое распространение получили методы, теоретическое обоснование которых связано с эффектом суперсходимости (см., например, монографию [7] и цитируемую там литературу). Впервые этот эффект исследовали отечественные ученые Л. А. Оганесян и Л. А. Руховец [8]. Указанные методы также используются не только для метода конечных элементов, но и для SUPG-метода (метод Петрова – Галёркина) [9]. Также метод сглаживания градиента рассмотрен в изогеометрическом анализе (IGA) [10] и для задач нелинейной теории упругости [11]. Также применяются иерархические методы контроля точности решения (см., например, статью [12]).

Важно отметить, что апостериорные оценки, построенные методом невязок или сглаживанием градиента, справедливы только для галёркинских аппроксимаций, т. е. точного решения соответствующей конечномерной задачи. Свойство галёркинской ортогональности широко используется при их теоретическом обосновании. Кроме того, в апостериорных оценках, построенных на основе явного метода невязок, присутствуют константы, вычисление которых весьма нетривиально, поскольку они зависят от локальной структуры сетки.

В данном контексте актуально использовать апостериорные оценки, основанные на функциональном подходе, так как они применимы к широкому спектру аппроксимаций и при их вычислении не возникает констант, зависящих от сетки.

Основной вклад в развитие данного подхода внесен в работах С. И. Репина, его коллег и учеников (см., например, работы [20 – 34, 13 – 17] и цитируемую там литературу).

Одним из важных индикаторов работы апостериорной оценки служит индекс эффективности, который определяет, как сильно мажоранта переоценивает истинную величину ошибки и возможна ли недооценка.

Индекс эффективности определяется следующим образом:

$$I_{eff} = \frac{M(\mathbf{u}_h, D)}{\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|}.$$

Из этого определения следует, что оптимальное значение индекса равно единице, а значение, меньшее единицы, говорит о ненадежности метода.

Одной из серьезных проблем при вычислении апостериорных оценок является рост индекса эффективности (см., например, статьи [13, 14]). Исследования показывают, что для функциональных оценок в определенных случаях целесообразно применять смешанные аппроксимации метода конечных элементов (см., например, работы [14 – 17]).

Далее рассматриваются задачи линейной теории упругости. Применение апостериорных оценок функционального типа для них рассмотрено, в частности, в работах [13, 17, 14] и цитируемой там литературе. В статье [14] в качестве смешанных аппроксимаций использовались аппроксимации Арнольда – Бoffи – Фалка [18] и Равьяра – Тома нулевого порядка [19] на четырехугольных элементах.

Настоящая работа продолжает эти исследования; проведено сравнение аппроксимаций Равьяра – Тома нулевого и первого порядков на триангуляциях.

### Постановка задачи

В рамках данной работы рассмотрена задача плоской деформации:

$$\text{Div} \sigma + \mathbf{f} = 0,$$

$$\sigma = L\varepsilon, \tag{2}$$

$$\varepsilon(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T),$$

где  $\mathbf{f} \in \mathbb{L}_2(\Omega, R^2)$  – плотность объемных сил, причем  $\Omega$  – расчетная область в  $R^2$ ,  $\mathbb{L}_2$  – единое обозначение для пространств скалярных и векторных функций, суммируемых с

квадратом на указанном множестве в смысле интеграла Лебега;  $L$  – тензор упругих модулей;  $\sigma$  – тензор напряжений;  $\varepsilon$  – тензор малых деформаций.

Система (2) дополняется следующими граничными условиями:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_d \text{ на } \Gamma_d, \quad (3)$$

$$\sigma \mathbf{n} = \mathbf{F} \text{ на } \Gamma_s,$$

где  $\Gamma_d, \Gamma_s$  – две непересекающиеся части границы области  $\Omega$ , далее обозначаемой  $\Gamma$ , причем  $\Gamma_d \cup \Gamma_s = \Gamma$ ;  $\mathbf{u}_d$  – заданные перемещения (например, нулевые при жестком закреплении);  $\mathbf{F} \in \mathbb{L}_2(\Gamma_s, R^2)$  – заданные поверхностные силы, действующие на границе (например, нулевые при свободной границе);  $\mathbf{n}$  – внешняя нормаль к границе.

Предполагается, что существуют две положительные константы  $l_1$  и  $l_2$  такие, что почти всюду в области  $\Omega$  справедливо двустороннее неравенство вида

$$l_1^2 |\varepsilon|^2 \leq L\varepsilon : \varepsilon \leq l_2^2 |\varepsilon|^2, \quad \forall \varepsilon \in M_{sym}, \quad (4)$$

где  $M_{sym}$  – пространство симметричных тензоров второго ранга размерности 2.

В рамках данного исследования тензор упругих свойств предполагается симметричным, т. е.

$$L_{ijkm} = L_{jikm} = L_{kmij}, \quad L_{ijkm} \in \mathbb{L}_\infty(\Omega) \quad i, j, k, m = \overline{1:2}, \quad (5)$$

где  $\mathbb{L}_\infty(\Omega)$  – пространство измеримых функций, ограниченных почти всюду в  $\Omega$ .

Для простоты реализации (хотя это и не принципиально) материал предполагается однородным и изотропным.

Обобщенная формулировка задачи (2), (3) выглядит следующим образом:

Найти функцию  $\mathbf{u} \in V = \mathbf{V} + V_0$ , которая удовлетворяет тождеству

$$\int_{\Omega} L\varepsilon(\mathbf{u}) : \varepsilon(\mathbf{w}) d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{w} d\Omega + \int_{\Gamma_s} \mathbf{F} \cdot \mathbf{w} ds, \quad \forall \mathbf{w} \in V_0, \quad (6)$$

где  $V_0 = \{ \mathbf{w} \in \mathbb{W}_2^1(\Omega, R^2) \mid w = 0 \text{ на } \Gamma_d \}$ ,

(здесь  $\mathbb{W}_2^1(\Omega, R^2)$  – стандартное обозначение для соответствующего пространства Соболева).

Функционал энергии для данной задачи имеет следующий вид:

$$\mathcal{J}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} L\varepsilon(\mathbf{u}) : \varepsilon(\mathbf{u}) d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} d\Omega - \int_{\Gamma_s} \mathbf{F} \cdot \mathbf{u} ds. \quad (7)$$

В случае произвольного решения  $\mathbf{v} \in V$ , для энергетической нормы справедлива оценка снизу:

$$\| \mathbf{u} - \mathbf{v} \|^2 \geq 2(\mathcal{J}(\mathbf{v}) - \mathcal{J}(\mathbf{u}_{ref})), \quad (8)$$

где  $\mathbf{u}_{ref}$  – приближенное решение, полученное на мелкой сетке (англ. reference solution).

При этом энергетическая норма определяется формулой

$$\| \mathbf{v} \| = \left( \int_{\Omega} L\varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(\mathbf{v}) d\Omega \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Мажоранта для задачи (2), (3) впервые была получена в работе [13] по аналогии с работой [20] и имеет следующий вид:

$$\| \mathbf{u} - \mathbf{v} \|^2 \leq M_{LE}^2(\mathbf{v}, \tau, \beta) := (1 + \beta) \| \tau - L\varepsilon(\mathbf{v}) \|^2 + \left( 1 + \frac{1}{\beta} \right) C^2 \left( \| \text{Div} \tau + \mathbf{f} \|^2 + \| \mathbf{F} - \tau \mathbf{n} \|^2 \right), \quad (9)$$

где  $\tau \in \mathbb{L}_2(\Omega, M_{sym})$  – симметричный тензор;  $\beta$  – произвольный положительный параметр; норма  $\| \dots \|$  здесь и далее – стандартная норма в пространствах  $\mathbb{L}_2(\dots)$ .

Норма  $\|\tau - L\varepsilon(\mathbf{v})\|_*$  в мажоранте (9) определяется следующим образом:

$$\|\tau\|_* = \left( \int_{\Omega} L^{-1} \tau : \tau d\Omega \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (10)$$

Условие симметричности автоматически выполняется при применении стандартных аппроксимаций метода конечных элементов, однако, как следует из статей [13, 14], индекс эффективности при этом может возрастать.

В работах [14 – 17, 22, 23] и ряде других было показано, что использование нестандартных конечных элементов, например элементов Равьяра – Тома или Арнольда – Боффи – Фалка, приводит к тому, что индекс эффективности перестает возрастать с увеличением количества элементов.

Для использования таких конечных элементов необходимо преобразовать мажоранту (9) так, чтобы снять условие симметричности тензора  $\tau$ .

Тогда, согласно монографии [21], мажоранта примет вид

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|^2 \leq \hat{M}_{LE}^2(\mathbf{v}, \tau, \beta_1, \beta_2) := & (1 + \beta_1) \|\tau_{sym} - L\varepsilon(\mathbf{v})\|_*^2 + \\ & + \left(1 + \frac{1}{\beta_1}\right) (1 + \beta_2) C^2 \left( \|\text{Div } \tau + \mathbf{f}\|^2 + \|\mathbf{F} - \tau \mathbf{n}\|^2 \right) + \left(1 + \frac{1}{\beta_1}\right) \left(1 + \frac{1}{\beta_2}\right) \left( \frac{C_{\Omega\Gamma_d}}{l_1} \right)^2 \|\tau_{sk}\|^2, \end{aligned} \quad (11)$$

где  $\tau_{sym}, \tau_{sk}$  – симметричная и кососимметричная части тензора  $\tau$ , соответственно;  $C_{\Omega\Gamma_d}$  – константа из неравенства Корна (при  $\Gamma_d = \Gamma$   $C_{\Omega\Gamma_d} = \sqrt{2}$ );  $\beta_1, \beta_2$  – положительные параметры.

Оптимальные значения параметров  $\beta_1$  и  $\beta_2$  при заданном  $\tau$  определяются по следующим формулам:

$$\beta_1 = \frac{C \sqrt{\|\text{Div } \tau + \mathbf{f}\|^2 + \|\mathbf{F} - \tau \mathbf{n}\|^2} + C_{\Omega\Gamma_d} \|\tau_{sk}\| / l_1}{\|\tau_{sym} - L\varepsilon(\mathbf{v})\|_*}, \quad \beta_2 = \frac{C_{\Omega\Gamma_d} \|\tau_{sk}\| / l_1}{C \sqrt{\|\text{Div } \tau + \mathbf{f}\|^2 + \|\mathbf{F} - \tau \mathbf{n}\|^2}}. \quad (12)$$

Отметим, что выражения для мажорант (9) и (11) справедливы не только для плоского случая, но и для пространственного.

### Элементы Равьяра – Тома

Как было описано ранее, выбор конечных элементов для аппроксимации свободного тензора  $\tau$  оказывает существенное влияние на поведение индекса эффективности функциональной апостериорной оценки.

Чтобы использовать упомянутые выше аппроксимации специального вида, свободный тензор  $\tau$  рассматривается как совокупность двух векторных полей:

$$\tau = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} \end{pmatrix} = [\boldsymbol{\tau}_x \quad \boldsymbol{\tau}_y], \quad (13)$$

где  $\boldsymbol{\tau}_x = (\tau_{xx}, \tau_{yx})^T$ ,  $\boldsymbol{\tau}_y = (\tau_{xy}, \tau_{yy})^T$ .

В данном исследовании применялись элементы Равьяра – Тома, которые как раз аппроксимируют векторное поле. При этом элементы нулевого порядка имеют три степени свободы – нормальные составляющие потока в серединах сторон. Элементы Равьяра – Тома первого порядка содержат уже восемь степеней свободы: 6 нормальных составляющих на трех гранях и значение векторного поля в центре элемента. Элементы Равьяра –Тома нулевого (RT0) и первого (RT1) порядков схематично представлены на рис. 1.

На каждом элементе векторные поля  $\boldsymbol{\tau}_x$  и  $\boldsymbol{\tau}_y$  для RT1 представляют собой линейную комбинацию следующего вида (для RT0 – аналогично, но с тремя функциями):

$$\boldsymbol{\tau}_x = \sum_{i=1}^8 \tau_{xi} \Psi_i, \quad \boldsymbol{\tau}_y = \sum_{i=1}^8 \tau_{yi} \Psi_i, \quad (14)$$

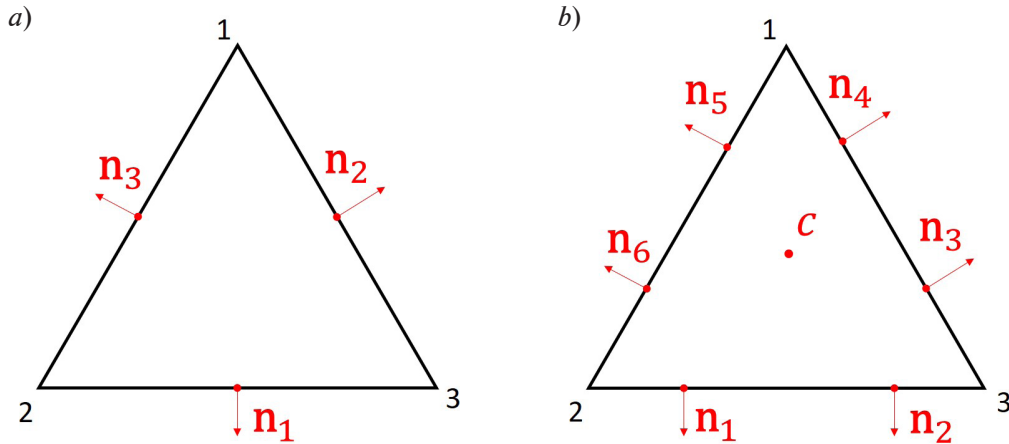


Рис. 1. Элементы Равьяра – Тома нулевого (RT0) (a) и первого (RT1) (b) порядков;  $\mathbf{n}_i$  – нормали к граням треугольника в точках, к которым привязаны степени свободы; локальная нумерация точек;  $C$  – центр треугольника

где векторные функции формы  $\Psi_i$  для элемента RT1 определяются как

$$\Psi_i = \begin{pmatrix} a_{i0} + a_{i1}x + a_{i2}y \\ b_{i0} + b_{i1}x + b_{i2}y \end{pmatrix} + (c_{i0} + c_{i1}x + c_{i2}y) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{i0} + a_{i1}x + a_{i2}y + c_{i0}x + c_{i1}x^2 + c_{i2}xy \\ b_{i0} + b_{i1}x + b_{i2}y + c_{i0}y + c_{i1}xy + c_{i2}y^2 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

После приведения подобных членов, на каждом элементе необходимо определить неизвестные коэффициенты

$$a_{i0}, a_{i1} + c_{i0}, a_{i2}, b_{i0}, b_{i1}, b_{i2} + c_{i0}, c_{i1}, c_{i2}$$

из следующих 64 соотношений:

$$\Psi_i \cdot \mathbf{n}_j = \delta_{ij}, \quad i, j = \overline{1:6}, \quad \Psi_7 \cdot \mathbf{n}_j = 0, \quad \Psi_8 \cdot \mathbf{n}_j = 0, \\ \Psi_{i=\overline{1:6}}|_c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_7|_c = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_8|_c = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (16)$$

где  $\mathbf{n}_{j=\overline{1:6}}$  – нормали к ребрам (см. рис. 1);  $C$  – барицентр элемента;  $\delta_{ij}$  – дельта Кронекера. Коэффициенты  $\tau_{xi}$  и  $\tau_{yi}$  находятся из решения системы уравнений вида

$$\frac{\partial \hat{M}_{LE}^2(\mathbf{v}, \tau, \beta_1, \beta_2)}{\partial \tau_{xi}} = 0, \quad i = \overline{1:N_d}, \\ \frac{\partial \hat{M}_{LE}^2(\mathbf{v}, \tau, \beta_1, \beta_2)}{\partial \tau_{yi}} = 0, \quad i = \overline{1:N_d}, \quad (17)$$

где  $N_d$  – общее число степеней свободы на гранях и в центре элементов.

В результате получается система линейных алгебраических уравнений с  $2N_d$  неизвестными. Система (17) решается при фиксированных значениях  $\beta_1$  и  $\beta_2$ , которые впоследствии пересчитываются итерационно.

Примеры сравнения смешанных аппроксимаций Равьяра – Тома нулевого и первого порядков для плоских задач линейной теории упругости представлены в следующем разделе. Они развивают работы [14, 16, 17, 22, 23].

### Численные результаты

**Пример 1.** Проведем сравнение элементов RT0 и RT1 на примере области, представленной в работе [14]. На всей границе задано условие закрепления, т. е.  $\Gamma_d = \Gamma$ ;

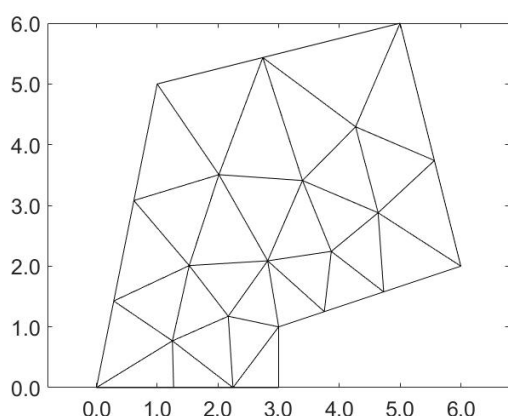


Рис. 2. Геометрия и начальная сетка метода конечных элементов для Примера 1

модуль Юнга  $E = 200$  ГПа; коэффициент Пуассона  $\nu = 0,3$ ; плотность материала  $\rho = 7850$  кг/м<sup>3</sup>; объемная сила  $\mathbf{f}$  задается через ускорение  $(-5 \ 3)^T$  м/с<sup>2</sup>. Геометрия и начальная сетка метода конечных элементов представлены на рис. 2.

В табл. 1 приведены результаты расчетов для Примера 1, полученные с помощью программного кода, реализованного в среде Matlab. Из анализа результатов, представленных в табл. 1, следует, что индекс эффективности не возрастает с увеличением размерности задачи. Также для элементов Равьяра – Тома первого порядка он убывает от 1,20 до 1,13, что существенно лучше, чем для элементов нулевого порядка, для которого индекс эффективности убывает от 1,89 до 1,50. Финальные сетки, полученные после адаптации, приведены на рис. 3. Процесс адаптации сетки заканчивается при достижении величины относительной ошибки менее 5 %.

Таблица 1

Сравнение расчетных результатов для элементов Равьяра – Тома нулевого (RT0) и первого (RT1) порядков (Пример 1)

RT0				RT1			
Кол-во узлов	Кол-во элементов	Ошибка, %	$I_{eff}$	Кол-во узлов	Кол-во элементов	Ошибка, %	$I_{eff}$
23	30	37,97	1,89	23	30	37,97	1,20
67	104	22,58	1,59	70	108	22,38	1,17
130	219	16,12	1,58	134	224	15,98	1,15
238	416	12,44	1,55	259	457	12,13	1,14
445	808	8,80	1,55	461	840	9,05	1,14
810	1502	6,75	1,54	870	1635	6,69	1,14
1507	2859	4,93	1,51	1522	2887	5,06	1,13
2760	5304	3,71	1,50	2707	5218	3,76	1,13

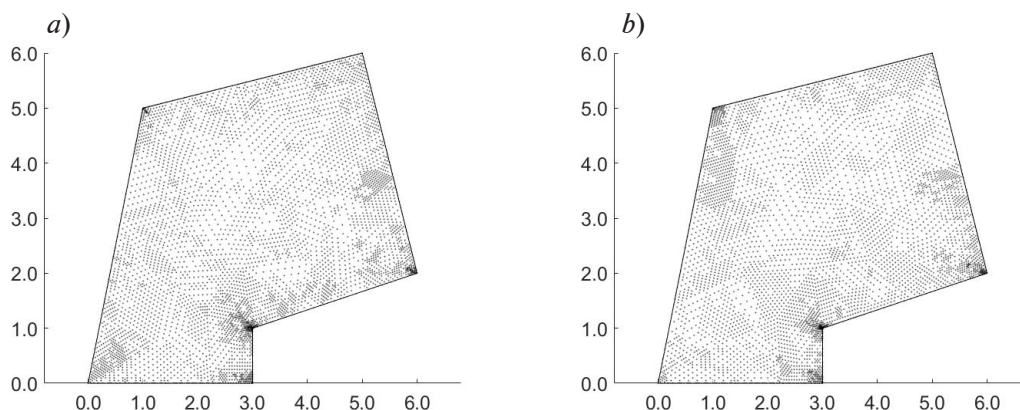


Рис. 3. Результат адаптации для элементов RT0 (a) и RT1 (b) в Примере 1

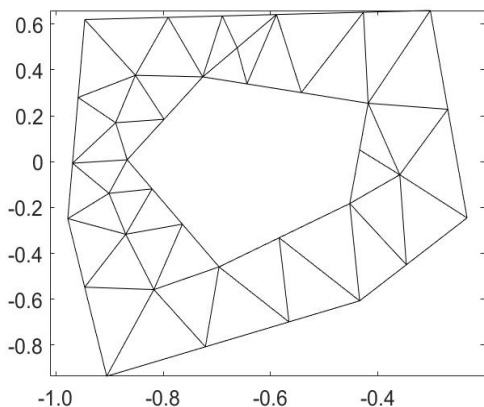


Рис. 4. Геометрия и начальная сетка метода конечных элементов для Примера 2

**Пример 2.** В этом примере область представляет собой многогранник с вырезом внутри. Область жестко закреплена по всей границе т. е.  $\Gamma_d \equiv \Gamma$ ; модуль Юнга  $E = 190$  ГПа; коэффициент Пуассона  $\nu = 0,23$ ; плотность материала  $\rho = 7850$  кг/м<sup>3</sup>; объемная сила  $\mathbf{f}$  задается через ускорение  $(6 \ 17)^T$  м/с<sup>2</sup>. Геометрия и начальная сетка метода конечных элементов представлены на рис. 4. Процесс адаптации сетки заканчивается при достижении величины относительной ошибки менее 7%.

В табл. 2 приведены результаты расчетов для Примера 2. Из них следует, что индекс эффективности не возрастает с увеличением размерности задачи, при этом индекс эффективности для элементов Равьяра – Тома первого порядка убывает от 1,15 до 1,08, что существенно лучше, чем для элементов Равьяра – Тома нулевого порядка (от 2,12 до 1,30, соответственно). Финальные сетки, полученные после адаптации, приведены на рис. 5.

Таблица 2

**Сравнение расчетных результатов для элементов Равьяра – Тома нулевого (RT0) и первого (RT1) порядков (Пример 2)**

RT0				RT1			
Кол-во узлов	Кол-во элементов	Ошибка, %	$I_{eff}$	Кол-во узлов	Кол-во элементов	Ошибка, %	$I_{eff}$
36	43	77,87	2,12	36	43	77,87	1,15
70	105	56,14	1,88	56	77	57,34	1,15
131	210	40,56	1,59	97	147	43,52	1,15
240	410	29,35	1,40	165	289	33,64	1,13
459	815	21,57	1,34	285	485	25,21	1,12
893	1627	15,46	1,32	527	932	19,46	1,10
1701	3180	11,52	1,30	908	1652	14,75	1,10
3188	6053	8,44	1,30	1614	3001	11,24	1,09
5854	11275	6,27	1,30	2864	5425	8,48	1,09
–	–	–	–	5071	9719	6,44	1,08

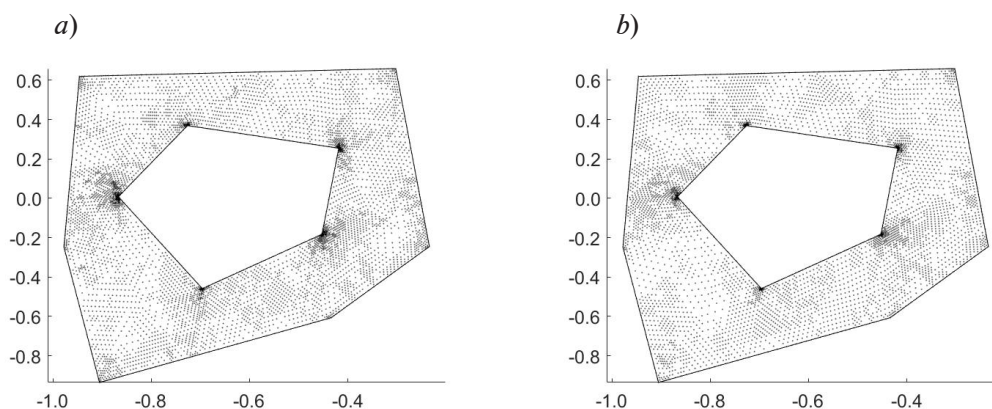


Рис. 5. Результат адаптации для элементов RT0 (a) и RT1 (b) в Примере 2



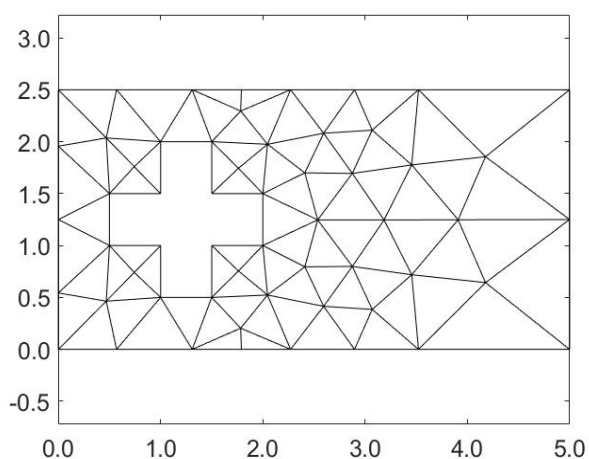


Рис. 6. Геометрия и начальная сетка метода конечных элементов для Примера 3

**Пример 3.** В этом примере область представляет собой прямоугольник  $5,0 \times 2,5$  м с крестообразным вырезом внутри. Область жестко закреплена по правой границе и внутри крестообразного выреза; остальная часть границы свободна; модуль Юнга  $E = 200$  ГПа; коэффициент Пуассона  $\nu = 0,3$ ; плотность материала  $\rho = 7850$  кг/м<sup>3</sup>; на верхнюю границу действует давление в 1 МПа, определяющее поверхностные силы  $\mathbf{F}$ , действующие на границе. Геометрия и сетка конечных элементов представлены на рис. 6. Процесс адаптации сетки заканчивается при достижении величины ошибки менее 5 %.

Отметим, что близкая задача, но с двумя материалами, была рассмотрена для RT0 в работе [16].

Таблица 3

**Сравнение расчетных результатов для элементов Равьяра – Тома нулевого (RT0) и первого (RT1) порядков (Пример 3)**

RT0				RT1			
Кол-во узлов	Кол-во элементов	Ошибка, %	$I_{eff}$	Кол-во узлов	Кол-во элементов	Ошибка, %	$I_{eff}$
57	82	38,97	1,85	57	82	38,97	1,29
90	138	30,70	1,57	80	121	30,91	1,26
169	280	22,73	1,50	135	216	24,56	1,24
313	549	16,97	1,46	253	429	18,49	1,21
604	1097	12,68	1,41	461	814	14,36	1,18
1131	2103	9,46	1,39	815	1485	10,73	1,16
2081	3939	6,95	1,38	1463	2725	8,18	1,15
3925	7530	5,07	1,38	2590	4905	6,16	1,14
7510	14571	3,71	1,38	4590	8810	4,66	1,14

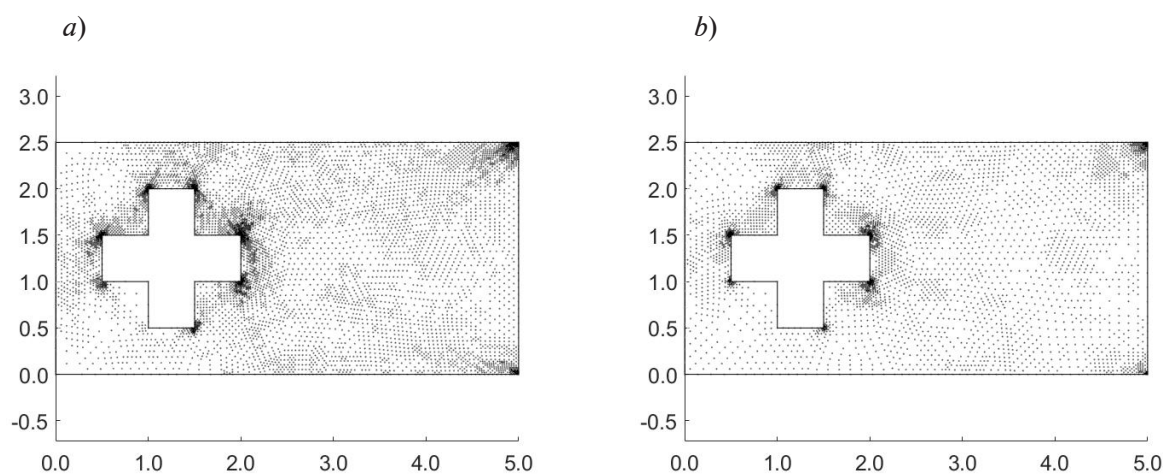


Рис. 7. Результат адаптации для элементов RT0 (a) и RT1 (b) в Примере 3

В табл. 3 приведены результаты расчетов для Примера 3. Согласно полученным данным, индекс эффективности для  $RT_0$  убывает от 1,85 до 1,38. При этом индекс эффективности для элементов  $RT_1$  меняется от 1,29 до 1,14, т. е. оказывается значительно ближе к оптимальному значению. Финальные сетки, полученные после адаптации, приведены на рис. 7.

### Заключение

В данной работе представлен сравнительный анализ реализации мажоранты для задач линейной теории упругости в рамках плоского деформированного состояния. При этом использованы элементы Равьяра – Тома нулевого и первого порядков.

Из анализа результатов расчетов следует, что использование элементов первого порядка приводит к значительному снижению переоценки истинной величины погрешности, которая надежно (без недооценки) контролируется с помощью функциональных апостериорных методов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Babuška I., Rheinboldt W. C.** A-posteriori error estimates for the finite element method // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 1978. Vol. 12. No. 10. Pp. 1597–1615.
2. **Babuška I., Rheinboldt W. C.** Error estimates for adaptive finite element computations // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. 1978. Vol. 15. No. 4. Pp. 736–754.
3. **Clément P.** Approximation by finite element functions using local regularization // *Revue Française d'Automatique, Informatique, Recherche Opérationnelle*. 1975. Vol. 9. No. 2. Pp. 77–84.
4. **Crowder A. J., Powell C. E., Bespalov A.** Efficient adaptive multilevel stochastic Galerkin approximation using implicit a posteriori error estimation // *SIAM Journal on Scientific Computing*. 2019. Vol. 41. No. 3. Pp. A1681–A1705.
5. **Cuiyu H., Zhang X.** Residual-based a posteriori error estimation for immersed finite element methods // *Journal of Scientific Computing*. 2019. Vol. 81. No. 3. Pp. 2051–2079.
6. **Mora D., Rivera G.** A priori and a posteriori error estimates for a virtual element spectral analysis for the elasticity equations // *IMA Journal of Numerical Analysis*. 2020. Vol. 40. No. 1. Pp. 322–357.
7. **Wahlbin L. B.** Superconvergence in Galerkin finite element methods. Berlin: Springer Verlag, 1995. 166 p.
8. **Оганесян Л. А., Руховец Л. А.** Исследование скорости сходимости вариационно-разностных схем для эллиптических уравнений второго порядка в двумерной области с гладкой границей // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1969. Т. 9. № 5. С. 1102–1120.
9. **Du S., Lin R., Zhang Z.** Robust recovery-type a posteriori error estimators for streamline upwind/Petrov Galerkin discretizations for singularly perturbed problems // *Applied Numerical Mathematics*. 2021. Vol. 168. October. Pp. 23–40.
10. **Kumar M., Kvamsdal T., Johannessen K.** Superconvergent patch recovery and a posteriori error estimation technique in adaptive isogeometric analysis // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2017. Vol. 316. 1 April. Pp. 1086–1156.
11. **Botti M., Riedlbeck R.** Equilibrated stress tensor reconstruction and a posteriori error estimation for nonlinear elasticity // *Computational Methods in Applied Mathematics*. 2020. Vol. 20. No. 1. Pp. 39–59.
12. **Hain S., Ohlberger M., Radic M., Urban K.** A hierarchical a posteriori error estimator for the reduced basis method // *Advances in Computational Mathematics*. 2019. Vol. 45. No. 5–6. Pp. 2191–2214.
13. **Muzalevsky A. V., Repin S. I.** On two-sided error estimates for approximate solutions of problems in the linear theory of elasticity // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. 2003. Vol. 18. No. 1. Pp. 65–85.
14. **Фролов М. Е.** Применение функциональных оценок погрешности со смешанными аппроксимациями к плоским задачам линейной теории упругости // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2013. Т. 53. № 7. С. 1178–1191.
15. **Фролов М. Е., Чурилова М. А.** Адаптация сеток на основе функциональных апостериорных оценок с аппроксимацией Равьяра – Тома // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2012. Т. 52. № 7. С. 1277–1288.

16. **Чурилова М. А., Фролов М. Е.** Функциональные апостериорные оценки для задач линейной упругости: вычислительные свойства и адаптивные алгоритмы // Университетский научный журнал. 2014. № 10. С. 23–36.
17. **Чурилова М. А.** Влияние выбора критерия маркировки на работу адаптивного алгоритма с апостериорным контролем точности // Научно-технические ведомости СПбГПУ: Физико-математические науки. 2015. № 4 (230). С. 139–149.
18. **Arnold D. N., Boffi D., Falk R. S.** Quadrilateral  $H(\text{div})$  finite elements // SIAM Journal of Numerical Analysis. 2005. Vol. 42. No. 6. Pp. 2429–2451.
19. **Raviart P. A., Thomas J. M.** A mixed finite element for second order elliptic problems (Chapter) // Galligani I., Magenes E. (Eds.) Mathematical Aspects of Finite Element Methods (Conference Proceedings); Book Series “Lecture Notes in Mathematics”, Vol. 606. Berlin-Heidelberg: Springer Verlag, 1977. Pp. 292–315.
20. **Repin S. I., Xanthis L. S.** A posteriori error estimation for elastoplastic problems based on duality theory // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1996. Vol. 138. No. 1–4. Pp. 317–339.
21. **Repin S. I.** A posteriori estimates for partial differential equations. Berlin, New York: Walter de Gruyter, 2008. 316 p.
22. **Churilova M. A., Frolov M. E.** Comparison of adaptive algorithms for solving plane problem of classical and Cosserat elasticity // Materials Physics and Mechanics. 2017. Vol. 32. No. 3. Pp. 370–382.
23. **Churilova M. A., Frolov M. E.** A posteriori error estimates for linear problems in Cosserat elasticity // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1158. No. 2. P. 022032.
24. **Репин С. И.** Апостериорные тождества для мер отклонения от точных решений нелинейных краевых задач // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2023. Т. 63. № 6. С. 896–919.
25. **Репин С. И.** Контроль точности приближенных решений одного класса сингулярно возмущенных краевых задач // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2022. Т. 62. № 11. С. 1822–1839.
26. **Репин С. И.** Апостериорные тождества для отклонений от точных решений задач реакции–конвекции–диффузии // Записки научных семинаров ПОМИ. 2022. Т. 519. С. 205–228.
27. **Репин С. И.** Оценки отклонения от точных решений краевых задач в мерах более сильных, чем энергетическая норма // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2020. Т. 60. № 5. С. 749–765.
28. **Апушкинская Д. Е., Репин С. И.** Бигармоническая задача с препятствием: гарантированные и вычисляемые оценки ошибок для приближенных решений // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2020. Т. 60. № 11. С. 1881–1897.
29. **Вальдман Я., Фролов М. Е.** Функциональные апостериорные оценки точности решений задач механики деформируемого твердого тела // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2020. Т. 13. № 4. С. 203–215.
30. **Mali O., Neittaanmäki P., Repin S.** Accuracy verification methods: Theory and algorithms. Dordrecht: Springer, 2014. 355 p.
31. **Repin S. I., Sauter S. A.** Accuracy of mathematical models. Berlin: European Mathematical Society, 2020. 317 p.
32. **Muzalevskiy A., Neittaanmäki P., Repin S.** Generation of error indicators for partial differential equations by machine learning methods // T. T. Tuovinen, J. Periaux, P. Neittaanmäki (Eds.). Computational sciences and artificial intelligence in industry: New digital technologies for solving future societal and economical challenges. Springer-Verlag. 2022. Pp. 63–96.
33. **Frolov M. E.** Reliable a posteriori error estimation for Cosserat elasticity in 3D // Lobachevskii Journal of Mathematics. 2021. Vol. 42. No. 1. Pp. 96–103.
34. **Репин С. И.** Оценка расстояния до точного решения эволюционной задачи полученной линеаризацией уравнения Навье–Стокса // Записки научных семинаров ПОМИ. 2020. Т. 489. С. 68–80.

## REFERENCES

1. **Babuška I., Rheinboldt W. C.**, A-posteriori error estimates for the finite element method, *Int. J. Numer. Methods Eng.* 12 (10) (1978) 1597–1615.
2. **Babuška I., Rheinboldt W. C.**, Error estimates for adaptive finite element computations, *SIAM J. Numer. Anal.* 15 (4) (1978) 736–754.
3. **Clément P.**, Approximation by finite element functions using local regularization, *Rev. Franç. Automat. Inform. Rech. Opérat.* 9 (2) (1975) 77–84.
4. **Crowder A. J., Powell C. E., Bessalov A.**, Efficient adaptive multilevel stochastic Galerkin approximation using implicit a posteriori error estimation, *SIAM J. Sci. Comput.* 41 (3) (2019) A1681–A1705.
5. **Cuiyu H., Zhang X.**, Residual-based a posteriori error estimation for immersed finite element methods, *J. Sci. Comput.* 81 (3) (2019) 2051–2079.
6. **Mora D., Rivera G.**, A priori and a posteriori error estimates for a virtual element spectral analysis for the elasticity equations, *IMA J. Numer. Anal.* 40 (1) (2020) 322–357.
7. **Wahlbin L. B.**, Superconvergence in Galerkin finite element methods, Springer-Verlag, Berlin, 1995.
8. **Oganesyan L. A., Rukhovets L. A.**, Study of the rate of convergence of variational difference schemes for second-order elliptic equations in a two-dimensional field with a smooth boundary, *Comp. Math. and Math. Phys.* 9 (5) (1969) 158–183.
9. **Du S., Lin R., Zhang Z.**, Robust recovery-type a posteriori error estimators for streamline upwind/Petrov Galerkin discretizations for singularly perturbed problems, *Appl. Numer. Math.* 168 (Oct) (2021) 23–40.
10. **Kumar M., Kvamsdal T., Johannessen K.**, Superconvergent patch recovery and a posteriori error estimation technique in adaptive isogeometric analysis, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 316 (1 Apr) (2017) 1086–1156.
11. **Botti M., Riedlbeck R.**, Equilibrated stress tensor reconstruction and a posteriori error estimation for nonlinear elasticity, *Comput. Methods Appl. Math.* 20 (1) (2020) 39–59.
12. **Hain S., Ohlberger M., Radic M., Urban K.**, A hierarchical a posteriori error estimator for the reduced basis method, *Adv. Comput. Math.* 45 (5–6) (2019) 2191–2214.
13. **Muzalevsky A. V., Repin S. I.**, On two-sided error estimates for approximate solutions of problems in the linear theory of elasticity, *Russ. J. Numer. Anal.* 18 (1) (2003) 65–85.
14. **Frolov M. E.**, Application of functional error estimates with mixed approximations to plane problems of linear elasticity, *Comp. Math. and Math. Phys.* 53 (7) (2013) 1000–1012.
15. **Frolov M. E., Churilova M. A.**, Mesh adaptation based on functional a posteriori estimates with Raviart – Thomas approximation, *Comp. Math. and Math. Phys.* 52 (7) (2012) 1044 –1054.
16. **Churilova M. A., Frolov M. E.**, Functional a posteriori error estimates for linear elasticity: computational properties and adaptive algorithms, *Humanities and Science University Journal* 10 (2014) 23–36.
17. **Churilova M. A.**, The sensitivity of the adaptive algorithm with a posteriori error control to marking criteria, *St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics.* 4 (230) (2015) 139–149 (in Russian).
18. **Arnold D. N., Boffi D., Falk R. S.**, Quadrilateral H(div) finite elements, *SIAM J. Numer. Anal.* 42 (6) (2005) 2429–2451.
19. **Raviart P. A., Thomas J. M.**, A mixed finite element for second order elliptic problems (Chapter), In book: Galligani I., Magenes E. (Eds.) *Mathematical aspects of finite element methods (Conf. Proc.)*; Book Ser. “Lecture Notes in Mathematics”, Vol. 606. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg (1977) 292–315.
20. **Repin S. I., Xanthis L. S.**, A posteriori error estimation for elastoplastic problems based on duality theory, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 138 (1–4) (1996) 317–339.
21. **Repin S. I.**, A posteriori estimates for partial differential equations, Walter de Gruyter, Berlin, New York, 2008.
22. **Churilova M. A., Frolov M. E.**, Comparison of adaptive algorithms for solving plane problem of classical and Cosserat elasticity, *Mater. Phys. Mech.* 32 (3) (2017) 370–382.
23. **Churilova M. A., Frolov M. E.**, A posteriori error estimates for linear problems in Cosserat elasticity, *J. Phys.: Conf. Ser.* 1158 (2) (2019) 022032.

24. **Repin S. I.**, A posteriori identities for measures of deviation from exact solutions of nonlinear boundary value problems, *Comp. Math. and Math. Phys.* 63 (6) (2023) 934–956.
25. **Repin S. I.**, Error control for approximate solutions of a class of singularly perturbed boundary value problems, *Comp. Math. and Math. Phys.* 62 (11) (2022) 1799–1816.
26. **Repin S. I.**, A posteriori error identities for parabolic convection–diffusion problems, *Zapiski Nauchnykh Seminarov POMI [Notes from Scientific Seminars at St. Petersburg Department of Steklov Mathematical Institute of Russian Academy of Sciences]*. 519 (2022) 205–228.
27. **Repin S. I.**, Estimates of the deviation from exact solutions of boundary value problems in measures stronger than the energy norm, *Comp. Math. and Math. Phys.* 60 (5) (2020) 749–765.
28. **Apushkinskaya D. E., Repin S. I.**, Biharmonic obstacle problem: guaranteed and computable error bounds for approximate solutions, *Comp. Math. and Math. Phys.* 60 (11) (2020) 1823–1838.
29. **Valdman J., Frolov M. E.**, Functional-type a posteriori error estimates for solutions of problems in deformable solid mechanics, *St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics*. 13 (4) (2020) 148–155.
30. **Mali O., Neittaanmäki P., Repin S.**, Accuracy verification methods: Theory and algorithms. Springer, Dordrecht, 2014.
31. **Repin S. I., Sauter S. A.**, Accuracy of mathematical models. Berlin: European Mathematical Society, 2020.
32. **Muzalevskiy A., Neittaanmäki P., Repin S.**, Generation of error indicators for partial differential equations by machine learning methods, In book: T. T. Tuovinen, J. Periaux, P. Neittaanmäki (Eds.) *Computational sciences and artificial intelligence in industry: New digital technologies for solving future societal and economical challenges*, Springer-Verlag (2022) 63–96.
33. **Frolov M. E.**, Reliable a posteriori error estimation for Cosserat elasticity in 3D, *Lobachevskii J. Math.* 42 (1) (2021) 96–103.
34. **Repin S. I.**, Estimates of the distance to the solution of an evolutionary problem obtained by linearization of the Navier–Stokes equation, *Zapiski Nauchnykh Seminarov POMI [Notes from Scientific Seminars at St. Petersburg Department of Steklov Mathematical Institute of Russian Academy of Sciences]*. 489 (2020) 67–80.

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ПЕТУХОВ Дмитрий Александрович** – аспирант Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
d\_a\_petukhov@mail.ru

**ФРОЛОВ Максим Евгеньевич** – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
frolov\_me@spbstu.ru  
ORCID: 0000-0002-1022-0221

## THE AUTHORS

**PETUKHOV Dmitrii A.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
d\_a\_petukhov@mail.ru

**FROLOV Maksim E.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
frolov\_me@spbstu.ru  
ORCID: 0000-0002-1022-0221

*Статья поступила в редакцию 20.06.2024. Одобрена после рецензирования 09.07.2024.  
Принята 09.07.2024.*

*Received 20.06.2024. Approved after reviewing 09.07.2024. Accepted 09.07.2024.*

Научное издание

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

**«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.  
PHYSICS AND MATHEMATICS»  
ТОМ 17, № 4, 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](mailto:physics@spbstu.ru)

Компьютерная верстка *Н. А. Бушмановой*

---

Подписано в печать 31.12.2024. 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](mailto:physics@spbstu.ru),

**Тел. редакции** 8 (812) 552-62-16.

**Сайт журнала:** <https://physmath.spbstu.ru/>