

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

**ТОМ 19, №1,
2026**

Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого
2026

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.

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.

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 19, No.1,
2026**

Peter the Great St. Petersburg
Polytechnic University
2026

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;

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 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>

Содержание

Физика конденсированного состояния

- Шугуров К. Ю., Можаров А. М., Кавеев А. К., Федоров В. В.** *Эффект резистивного переключения в гетероструктурах n-GaN/p-Si* 9
- Фомин Д. В., Шолыгин И. О., Поляков А. В., Галкин Н. Г., Галкин К. Н., Чернев И. М.** *Фотоэлектрические свойства диодов на основе полупроводникового силицида магния* 19
- Атабоев О. К., Утамурадова Ш. Б., Теруков Е. И., Баранов А. И., Иниятова К. Х.** *Влияние температуры на световые вольтамперные характеристики гетероструктурных солнечных элементов, изготовленных на подложках кремния, легированного галлием (статья на английском языке)* 30
- Киселевич В. В.** *Применение теории катастроф для описания температурных зависимостей пробивной напряженности полимерных диэлектриков* 43
- Кулемина С. М., Темнов Д. Э.** *Термостимулированная релаксация поверхностного потенциала в композитных пленках на основе полилактида* 62

Математическое моделирование физических процессов

- Агеев Д. Э., Засимова М. А.** *Течение и теплообмен при свободной конвекции воздуха вблизи одиночной горизонтальной ребренной трубы* 70
- Новикова К. Н., Фунтикова А. С., Можаров А. М., Мухин И. С.** *Численное исследование эффективности экстракции света из нитевидных нанокристаллов фосфида галлия, интегрированных с золотой наночастицей* 83

Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

- Халаф Р. Х., Джаббар М. Л.** *Адсорбция и электронная модуляция наноструктур пирена, детектирующих токсичные газы: исследование зависимостей этих характеристик от размера кластеров пирена методом функционала плотности (статья на английском языке)* 91
- Валуева С. В., Морозова П. Ю., Вылегжанина М. Э., Чернова Л. М., Боровикова Л. Н.** *Сравнительное исследование фотодеградационных растворов свободного и связанного радахлорина* 106

Приборы и техника физического эксперимента

- Анисимов А. А., Белов А. А., Козлов А. С., Котов О. И., Кринский П. А., Медведев А. В., Петров А. В., Розов С. В., Ушаков Н. А.** *Измерение временного джиттера низкошумящего детектора одиночных фотонов* 121

Физическое материаловедение

- Кувандиков О. К., Шодиев З. М., Ахтамов Ж. Ш.** *Электронные и магнитные свойства гаусманнита (статья на английском языке)* 133

Ядерная физика

Банников Е. В., Бердников Я. А., Котов Д. О., Ларионова Д. М. Сравнение эллиптических потоков π^0 -мезонов в столкновениях релятивистских ядер меди и золота при энергии 200 ГэВ и ядер урана при 193 ГэВ 144

Теоретическая физика

Ипатов А. Н., Куприянов Г. А. Зависимость оптических спектров объемно-легированных полупроводниковых нанокристаллов сульфида кадмия от их геометрических размеров и числа носителей заряда 158

Механика

Лукин А. В., Попов И. А., Пискун Н. Д., Антуфьев Д. В. Нелинейные модели пониженного порядка для континуальных упругих элементов конструкций 170

Contents

Condensed matter physics

- Shugurov K. Yu., Mozharov A. M., Kaveev A. K., Fedorov V. V.** *The resistive switching effect in the n-GaN/p-Si heterostructures* 9
- Fomin D. V., Sholygin I. O., Polyakov A. V., Galkin N. G., Galkin K. N., Chernev I. M.** *Photoelectric properties of diodes based on magnesium silicide semiconductor* 19
- Ataboev O. K., Utamuradova Sh. B., Terukov E. I., Baranov A. I., Iniyatova K. Kh.** *Temperature effects on the light current-voltage characteristics of the heterojunction solar cells fabricated on gallium-doped silicon substrates* 30
- Kiselevich V. V.** *Application of the catastrophe theory to describe temperature dependencies of the breakdown field strength in polymer dielectrics* 43
- Kulemina S. M., Temnov D. E.** *Thermally stimulated relaxation of surface potential in polylactide-based composite films* 62

Simulation of physical processes

- Ageev D. E., Zasimova M. A.** *A natural convection airflow and its heat transfer around a single horizontal finned tube* 70
- Novikova K. N., Funtikova A. S., Mozharov A. M., Mukhin I. S.** *Numerical study of the light extraction efficiency from gallium phosphide nanowires integrated with a gold nanoparticle* 83

Atom physics and physics of clusters and nanostructures

- Khalaf R. H., Jabbar M. L.** *Size-dependent adsorption and electronic modulation of pyrene nanostructures toward toxic gas detection: a DFT study* 91
- Valueva S. V., Morozova P. Yu., Vylegzhanina M. E., Chernova L. M., Borovikova L. N.** *The photodegradation of the free and bound Radachlorin solutions: A comparative study* 106

Experimental technique and devices

- Anisimov A. A., Belov A. A., Kozlov A. S., Kotov O. I., Krinskiy P. A., Medvedev A. V., Petrov A. V., Rozov S. V., Ushakov N. A.** *Measurement of the timing jitter of a low-noise single photon detector* 121

Physical materials technology

- Kuvandikov O. K., Shodiev Z. M., Akhtamov J. Sh.** *Electronic and magnetic properties of hausmannite* 133

Nuclear physics

- Bannikov E. V., Berdnikov Ya. A., Kotov D. O., Larionova D. M.** *Comparison of elliptic flows of π^0 mesons in Cu + Au collisions at 200 GeV and U + U collisions at 193 GeV* 144

Theoretical physics

Ipatov A. N., Kupriianov G. A. *Dependence of optical spectra of bulk-doped cadmium sulfide semiconductor nanocrystals on their geometrical dimensions and number of charge carriers* 158

Mechanics

Lukin A. V., Popov I. A., Piskun N. D., Antufiev D. V. *Nonlinear reduced order models for elastic structures* 170


Физика конденсированного состояния

Научная статья

УДК 537.9

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19101>


ЭФФЕКТ РЕЗИСТИВНОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ *n*-GaN/*p*-Si

К. Ю. Шугуров¹ , А. М. Можаров¹,
А. К. Кавеев², В. В. Федоров^{3, 1}

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

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия;

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

 shugurov17@mail.ru

Аннотация. В работе представлены результаты исследования мемристорных гетероструктур на основе нитевидных нанокристаллов (ННК) *n*-GaN на кремниевой подложке *p*-Si, синтезированных методом молекулярно-пучковой эпитаксии с разными интерфейсными слоями: нитридов кремния и алюминия (SiN и AlN). Установлено, что в зависимости от способа подготовки интерфейса меняется полярность записывающего напряжения. Кроме того, по данным емкостных измерений обнаружено, что после операции записи логического состояния емкость структуры при использовании слоя SiN снижается, тогда как для слоя AlN емкость повышается (с отличием в поведении ее релаксации).

Ключевые слова: нитрид галлия, нитевидные нанокристаллы, мемристорный эффект, резистивное переключение, кремний, водородная пассивация

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-79-01279, <https://rscf.ru/project/23-79-01279/>).


Для цитирования: Шугуров К. Ю., Можаров А. М., Кавеев А. К., Федоров В. В. Эффект резистивного переключения в гетероструктурах *n*-GaN/*p*-Si // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 9–18. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19101>

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.19101>

THE RESISTIVE SWITCHING EFFECT IN THE *n*-GaN/*p*-Si HETEROSTRUCTURES

K. Yu. Shugurov¹ , A. M. Mozharov¹,
A. K. Kaveev², V. V. Fedorov^{3, 1}

¹ Alferov University of RAS, St. Petersburg, Russia;

² Ioffe Institute of RAS, St. Petersburg, Russia;

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

 shugurov17@mail.ru

Abstract. In the paper, the findings of study the memristor based on *n*-GaN nanowires synthesized on silicon by the molecular beam epitaxy with SiN and AlN interface layers have

been presented. The polarity inversion of writing voltage was found to depend on the interface preparation method. In addition, it was discovered by the capacitive measurements that after the logical state write operation, the structure capacitance decreased when using the SiN layer while it increased when using the AlN one. In this case, a difference was observed in the behavior of the subsequent relaxation of the capacitance.

Keywords: gallium nitride, nanowire, memristor effect, resistive switching, silicon, hydrogen passivation

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

For citation: Shugurov K. Yu., Mozharov A. M., Kaveev A. K., Fedorov V. V., The resistive switching effect in the *n*-GaN/*p*-Si heterostructures, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (1) (2026) 9–18. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19101>

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

Введение

Развитие и совершенствование полупроводниковых приборов сопровождается их постепенной миниатюризацией. Это позволяет создавать более производительные и быстродействующие устройства как в интегральном исполнении, так и в виде дискретных элементов. Физические ограничения, накладываемые на существующие коммерческие полупроводниковые архитектуры, можно преодолевать внедрением новых подходов, в частности применением систем с пониженной размерностью. Так, например, использование 2D-материалов позволяет уже в обозримом будущем расширить границы микроэлектронных технологий [1]. Наряду с двумерными материалами большой практический интерес представляют и квазиодномерные структуры, к которым относятся нитевидные нанокристаллы (ННК). Комбинация геометрических особенностей ННК и материальных свойств перспективных полупроводников, таких как нитрид галлия GaN, делает возможным создание электронных компонентов с более совершенными приборными характеристиками [2 – 4]. С другой стороны, поскольку кремний Si остается основообразующим материалом полупроводниковой промышленности, интеграция с ним ННК GaN также открывает широкие возможности для приборных решений [5 – 8].

В то же время среди электронных компонентов отдельного внимания заслуживают мемристоры, на основе которых сегодня реализуются элементы быстродействующей памяти нового поколения (*англ.* Resistive Rapid-Access Memory – RRAM) [9] и нейроморфные процессоры [10], позволяющие существенно повысить производительность вычислений. При этом одним из распространенных физических явлений, имеющих место в некоторых видах мемристоров, выступает туннельный эффект [11 – 13]. В нашей недавней работе [14] было впервые продемонстрировано резистивное переключение биполярного типа в туннельных гетероструктурах GaN ННК/Si, что позволяет создавать мемристорные ячейки на такой системе материалов.

Представленные в данной статье результаты направлены на дальнейшее развитие этой тематики и отражают исследования электрофизических характеристик соответствующих гетероструктур.

Синтез и подготовка структур

Массивы вертикально ориентированных ННК GaN были синтезированы на кремнии по самоиндуцированному механизму в установке молекулярно-пучковой эпитаксии Veeco GEN III с плазменным азотным источником. В отличие от механизма пар-жидкость-кристалл, данный подход позволяет избежать встраивания в кристаллическую решетку ННК посторонних атомов от капель-затравок, которые могут негативно сказываться на характеристиках электронных устройств [15]. Всего было получено две группы структур (I и II), которые различаются способом подготовки интерфейсного слоя.

Кремниевые подложки проходили предварительную обработку, описанную в статье [16], с дальнейшим термическим удалением оксидного слоя с поверхности в ростовой камере при температуре 850°C в течение 30 мин. Далее для I группы структур поверхность подвергали процессу нитрирования потоком атомарного азота от источника мощностью 500 Вт; после этого сразу же инициировался рост ННК. Для II группы после сгона оксида, на поверхность наносился атомарный слой алюминия с последующей подачей атомарного азота. Использование затравки из нитрида алюминия AlN, с одной стороны, предотвращает реакцию металлического галлия с кремнием, а с другой – позволяет улучшить однородность нуклеации и ориентацию ННК нитрида галлия на поверхности подложки [17]. В обоих случаях рост ННК GaN проводился при температуре 850°C; при этом на протяжении всего процесса дополнительным потоком кремния обеспечивалось легирование для получения ННК *n*-типа проводимости.

Изображения синтезированных структур, полученные методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), представлены на рис. 1, *a*, *b*. Далее выполнялась постростовая подготовка образцов по аналогии с проведенной процедурой в работе [14] для формирования контактных мез. В результате были получены структуры, схематичное изображение которых приведено на рис. 1, *c*. В качестве электрической изоляции верхнего Au/Al-контакта от подложки использовался эпоксидный фотоотверждаемый полимер SU-8, наносимый посредством центрифугирования.

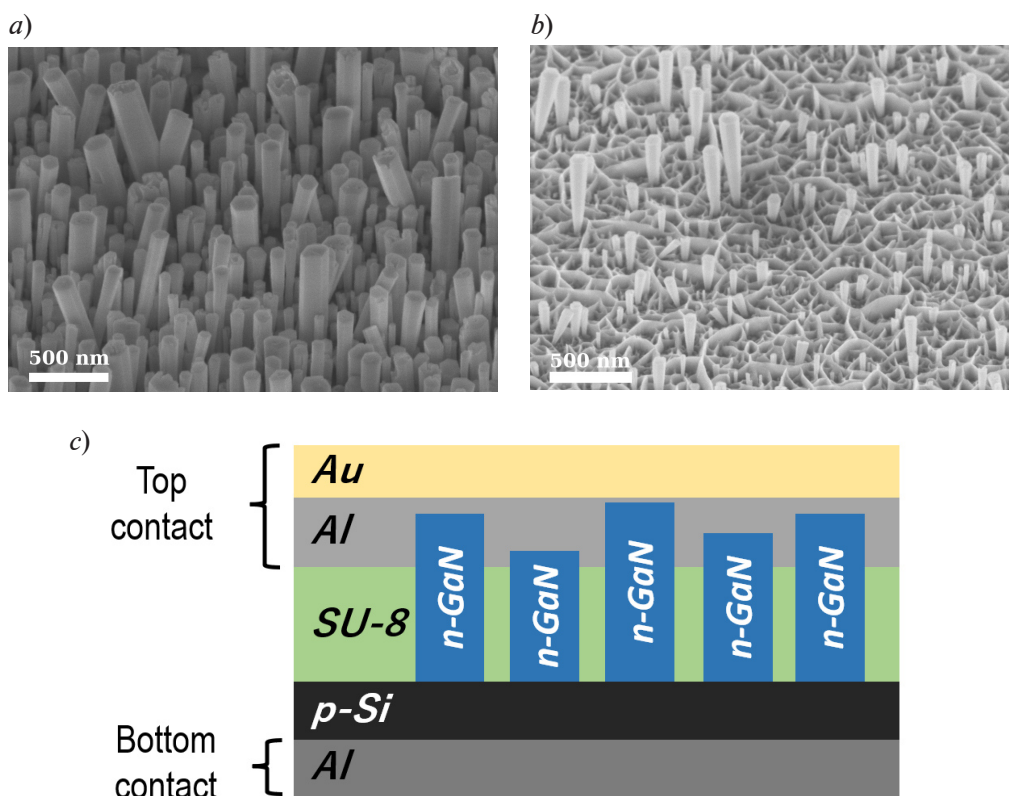


Рис. 1. СЭМ-изображения синтезированных структур *n*-GaN ННК/*p*-Si, полученных с помощью SiN (*a*) и AlN (*b*) затравок (изображения сняты под углом 45°); *c* – схематический вид изготовленных структур после постростовой обработки (указаны верхний (Top) и нижний (Bottom) контакты)

Результаты и их обсуждение

В предыдущей работе [14] мы выдвинули предположение, что резистивное переключение в исследуемых структурах возникает благодаря наличию в области перехода p -Si/ n -GaN зарядовых центров, которые, вероятно, расположены в широкозонном тонком интерфейсном слое нитрида алюминия и могут локализовывать на себе носители после цикла подачи на структуру определенного напряжения. Чтобы досконально проанализировать причины возникновения наблюдаемого эффекта, мы провели эксперимент, в ходе которого структуры с AlN-затравкой подвергали обработке в водородной плазме перед нанесением слоя SU-8. Как было показано нами ранее [18], такая обработка обеспечивает снижение концентрации энергетических ловушек вблизи интерфейса, что влияет на процесс рекомбинации через него носителей заряда. Таким образом, были основания полагать, что и в этом случае обработка приведет к снижению и перераспределению плотности энергетических состояний (зарядовых центров) на соответствующем гетероинтерфейсе. Процесс осуществляли в установке плазмохимического осаждения Oxford PlasmaLab System 100 при температуре 250°C и мощности 20 Вт в течение 5 мин.

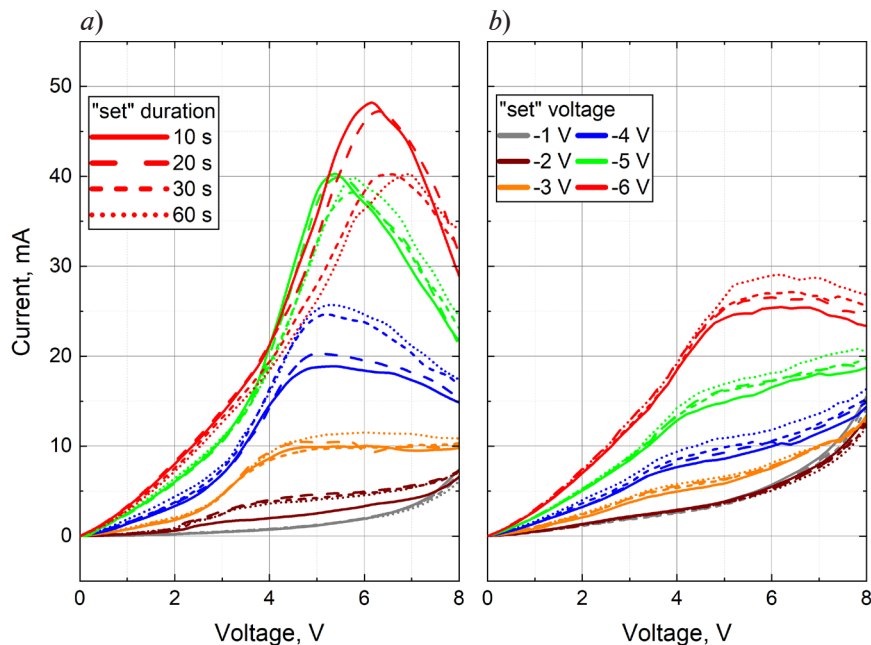


Рис. 2. Последовательные серии вольтамперных характеристик структур n -GaN ННК/ p -Si с AlN-затравкой при разных временах и напряжениях записи до (a) и после (b) обработки структур в водородной плазме

На рис. 2 представлены вольтамперные характеристики (ВАХ), полученные сразу после операции записи в структурную мезу (ячейку) состояния логической единицы. Положительное напряжение от источника питания прикладывалось к кремниевой подложке. Запись же состояния проводилась подачей напряжения V_s от -1 до -6 В в течение 10 – 60 с. Измерения проводили последовательными циклами: $0 \text{ В} \rightarrow +8 \text{ В} \rightarrow 0 \text{ В}$; первое измерение соответствовало режиму записи $\{-1 \text{ В}, 10 \text{ с}\}$, второе – $\{-1 \text{ В}, 20 \text{ с}\}$ и т.д. Ветви ВАХ, снятые в обратном направлении, не приведены на графиках рис. 2 из соображений читаемости остальной информации. Их типичное поведение представлено на рис. 3 (шаг 4 для AlN-интерфейса).

Как видно на рис. 2, для значения $V_s = -1$ В в обоих случаях (рис. 2, a и b) не наблюдается каких-либо значимых относительных изменений, зависящих от длительности записи, причем эта особенность сохраняется для обработанной структуры и при $V_s = -2$ В. При последующем повышении записывающего напряжения, амплитуды токов постепенно нарастают, и в диапазоне от 0 до 3 В (а для V_s , изменяющегося от -6 до $+4$ В) поведение образцов практически идентично. При этом для образца, обработанного в плазме, в целом уровни токов оказываются ниже и без выраженной «пиковой» формы, характерной

для необработанных структур при относительно высоких напряжениях записи (-5 В и менее). Для этих же напряжений можно также отметить, что длительность записи по-разному влияет на динамику ВАХ. Если в случае обработанного образца увеличение времени записи (для рассмотренных напряжений записи) приводит к постепенному смещению уровней токов в сторону больших значений, то для структуры без обработки в какой-то момент эта тенденция нарушается.

Полученные данные указывают на влияние процедуры обработки структуры в водородной плазме в сторону ослабления эффекта записи в ячейку. Следовательно, операции записи/стирания связаны с процессами зарядки/перезарядки состояний на интерфейсе GaN/Si и можно предположить, что проявление мемристорных свойств системы будет зависеть от способа подготовки интерфейса к синтезу ННК нитрида галлия.

Ранее нами было проведено исследование диодных свойств гетероструктур слабо легированных ННК нитрида галлия на кремниевых подложках при использовании различных способов подготовки интерфейса [19]. Согласно полученным результатам, наибольшее различие вида ВАХ и уровней тока наблюдалось между образцами с интерфейсом нитрида алюминия и интерфейсами, полученными при различных способах нитридации поверхности кремния. По этой причине именно данный вид интерфейса был выбран для дальнейшего исследования мемристорных свойств и проведения сравнения между структурами. По указанной в работе методике подготовки образцов были синтезированы массивы ННК (см. рис. 1, а), которые, как и в случае структуры I, подвергались дополнительному высокому легированию потоком кремния на всем протяжении процесса синтеза.

На рис. 3 изображены типичные ВАХ, полученные для образцов с различным способом подготовки интерфейса. Измерения проводились в циклическом режиме с началом и окончанием приложенного напряжения, равного 0 В.

Представленные зависимости наглядно демонстрируют появление гистерезиса также и для структур с подслоем SiN. Это, в свою очередь, согласуется с предположением, что наблюдаемый эффект резистивного переключения вызван наличием в области гетерограницы глубоких зарядовых центров (с большим временем жизни) ввиду наличия тонкой широкозонной прослойки. Сравнение же показывает, что для SiN-интерфейса форма ВАХ оказывается менее динамичной, в частности, на кривой ВАХ не наблюдается характерного пика, как в случае AlN-затравки. Кроме того, рассматриваемые структуры

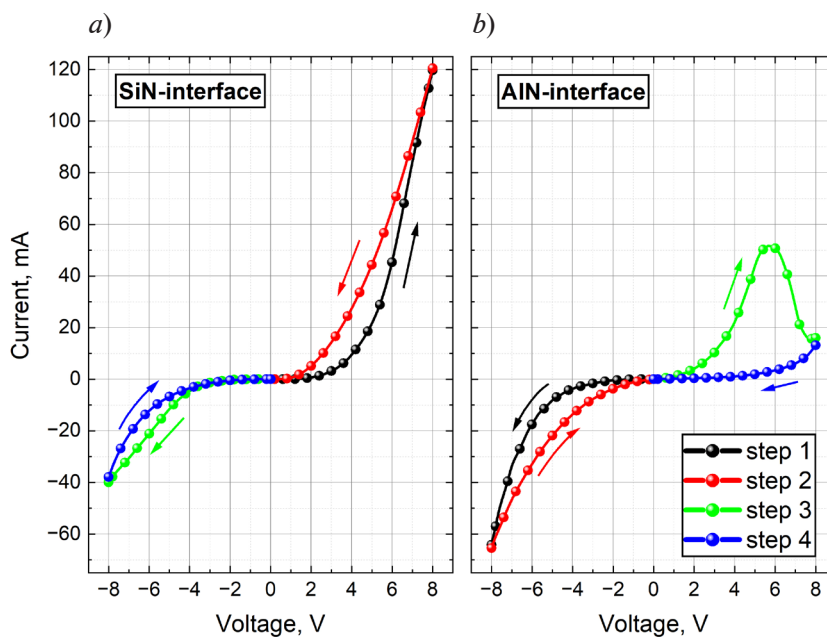


Рис. 3. Типичные ВАХ, полученные для рассматриваемых гетероструктур n -GaN ННК/ p -Si двумя способами подготовки интерфейсного слоя: SiN (а) и AlN (b)

различаются режимами записи в ячейку логического состояния: для AlN-интерфейса запись (см. шаг 1 и/или 2 на рис. 3) проводится обратным смещением, тогда как для SiN — прямым. Этот факт может говорить о различном изначальном распределении заряда в области $p-n$ -перехода ввиду различия типов интерфейсов.

На следующем этапе исследований была проведена серия емкостных измерений. При помощи прецизионного RLC-метра Keysight E4980, в четырехзондовом режиме на структуры подавался импульс записывающего напряжения длительностью 60 с и амплитудой 6 В, после которого в режиме реального времени регистрировалась емкостная релаксация. Измерения выполнялись на частоте 1 МГц, с амплитудой тестового сигнала 50 мВ.

Полученные результаты представлены на рис. 4. Видно, что для обоих типов структур подача импульса напряжения приводит к изменению их емкости относительно

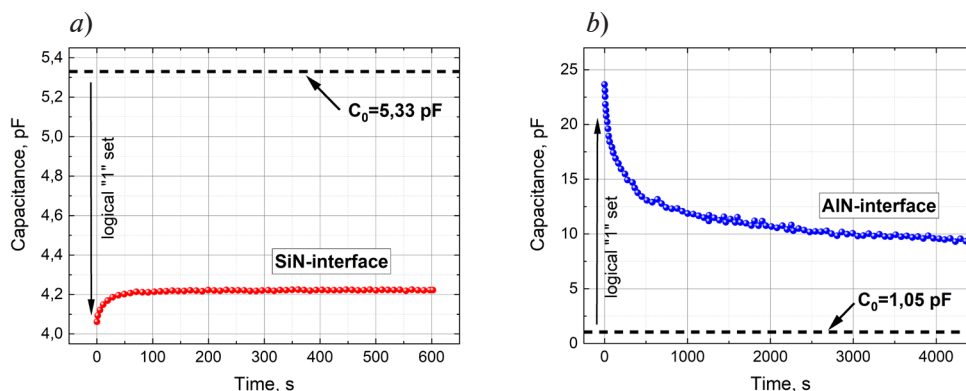


Рис. 4. Временные зависимости релаксации емкости структур после подачи записывающего импульса для интерфейсов SiN (a) и AlN (b).

Пунктирные линии показывают емкости структур до записи

первоначального значения C_0 до процедуры записи. Изменение емкости после снятия внешнего напряжения свидетельствует о некотором изменении конфигурации заряда в структурах, в области $p-n$ -перехода. Учитывая различие образцов по способу подготовки интерфейса GaN ННК/Si (при прочих равных параметрах синтеза и постростовой обработки), резонно предположить, что именно интерфейсный слой является причиной резистивного переключения в исследуемых структурах. Отметим, что подача записывающего импульса (6 В, 60 с) в случае интерфейса SiN вызывает снижение емкости в 1,3 раза, в то время как для интерфейса AlN емкость, напротив, возрастает более чем в 20 раз относительно C_0 . Отметим также различную динамику кривых. Для структур со слоем SiN емкость релаксирует до постоянного значения (оно отличается от C_0) за время около 1 мин, а в варианте с AlN-затравкой постепенный спад емкости наблюдается даже по прошествии 1,5 ч. Тем не менее, обе гетероструктуры демонстрируют мемристорный эффект.

Если провести сравнение с другими типами мемристоров, то можно выделить особенность, характерную только для исследуемых образцов. Как правило, считывание состояния ячейки проводится путем измерения ее сопротивления ненулевым постоянным напряжением. В данном случае, помимо этого метода, можно определять это состояние путем считывания емкости, подавая при этом переменный сигнал амплитудой всего в несколько десятков милливольт при нулевом постоянном смещении.

Заключение

В данной работе исследованы две группы гетероструктур n -GaN ННК/ p -Si, которые различались способом подготовки интерфейсного слоя. Полученные ВАХ в диапазоне от -8 до $+8$ В продемонстрировали наличие эффекта резистивного переключения биполярного типа как для интерфейса нитрида кремния SiN, так и для интерфейса нитрида алюминия AlN; при этом было обнаружено, что записывающие напряжения у рассматриваемых структур имеют противоположные знаки. Обработка в плазме водорода образцов со слоем нитрида алюминия привела в целом к относительному снижению проводимости



при подаче импульса напряжения в диапазоне от 3 до 8 В. Емкостные исследования обеих групп структур выявили разнонаправленное изменение емкости ячеек после подачи на них импульса записывающего напряжения, причем для вариации с SiN-интерфейсом наблюдалась релаксация емкости до постоянного значения, отличного от первоначального, которая наступает за временной интервал около 1 мин. Совокупность полученных данных позволяет сделать вывод о том, что мемристорный эффект, наблюдаемый в структурах, обусловлен наличием глубоких зарядовых центров в области широкозонного интерфейсного слоя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Liu A., Zhang X., Liu Z., et al. The roadmap of 2D materials and devices toward chips // *Nano-Micro Letters*. 2024. Vol. 16. No. 1. P. 119.
2. Yildirim M. A., Teker K. Transport characteristics of gallium nitride nanowire field-effect transistor (GaN-NWFET) for high temperature electronics // *Nano*. 2020. Vol. 16. December 02. P. 2150021.
3. Li W., Brubaker M. D., Spann B. T., Bertness K. A., Fay P. GaN nanowire MOSFET with near-ideal subthreshold slope // *IEEE Electron Device Letters*. 2018. Vol. 39. No. 2. Pp. 184–187.
4. Shugurov K. Y., Mozharov A. M., Fedorov V. V., Blokhin S. A., Neplokh V. V., Mukhin I. S. Extremely high frequency Schottky diodes based on single GaN nanowires // *Nanotechnology*. 2023. Vol. 34. No. 24. P. 245204.
5. Zhou B., Li J., Dong X., Yao L. GaN nanowires/Si photocathodes for CO₂ reduction towards solar fuels and chemicals: advances, challenges, and prospects // *Science China Chemistry*. 2023. Vol. 66. No. 3. Pp. 739–754.
6. Anbarasan N., Sadhasivam S., Jeganathan K. Ultrasensitive self-powered heterojunction ultraviolet photodetector of *p*-GaN nanowires on Si by halide chemical vapour deposition // *Nanotechnology*. 2023. Vol. 34. No. 13. P. 135201.
7. Dvoretckaia L., Gridchin V., Mozharov A., Maksimova A., Dragunova A., Melnichenko I., Mitin D., Vinogradov A., Mukhin I., Cirilin G. Light-emitting diodes based on InGaN/GaN nanowires on microsphere-lithography-patterned Si substrates // *Nanomaterials*. 2022. Vol. 12. No. 12. P. 1993.
8. You S., Geens K., Borga M., et al. Vertical GaN devices: Process and reliability // *Microelectronics Reliability*. 2021. Vol. 126. November. P. 114218.
9. Wang C., Shi G., Qiao F., Lin R., Wu S., Hu Z. Research progress in architecture and application of RRAM with computing-in-memory // *Nanoscale Advances*. 2023. Vol. 5. No. 6. Pp. 1559–1573.
10. Duan X., Cao Z., Gao K., Yan W., Sun S., Zhou G., Wu Z., Ren F., Sun B. Memristor-based neuromorphic chips // *Advanced Materials*. 2024. Vol. 36. No. 14. P. 2310704.
11. Zou T., Heo S., Byeon G., Yoo S., Kim M., Reo Y., Kim S., Liu A., Noh Y.-Y. Two-dimensional tunneling memristor with thin-film heterostructure for low-power logic-in-memory complementary metal-oxide semiconductor // *ACS Nano*. 2024. Vol. 18. No. 21. Pp. 13849–13857.
12. Thomas A., Niehörster S., Fabretti S., Shephard N., Kuschel O., Küpper K., Wollschläger J., Krzysteczko P., Chicca E. Tunnel junction based memristors as artificial synapses // *Frontiers in Neuroscience*. 2015. Vol. 9. 07 July. P. 00241.
13. Kim D. J., Lu H., Ryu S., Bark C.-W., Eom C.-B., Tsybmal E. Y., Gruverman A. Ferroelectric tunnel memristor // *Nano Letters*. 2012. Vol. 12. No. 11. Pp. 5697–5702.
14. Шугуров К. Ю., Можаров А. М., Кавеев А. К., Фёдоров В. В. Мемристорный эффект в гетероструктурах на основе нитевидных нанокристаллов нитрида галлия на кремнии // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2025. Т. 18. № 4. С. 9–20.
15. Hemesath E. R., Schreiber D. K., Gulsoy E. B., Kisielowski C. F., Petford-Long A. K., Voorhees P. W., Lauhon L. J. Catalyst incorporation at defects during nanowire growth // *Nano Letters*. 2012. Vol. 12. No. 1. Pp. 167–171.
16. Kern W. The evolution of silicon wafer cleaning technology // *Journal of The Electrochemical Society*. 1990. Vol. 137. No. 6. Pp. 1887–1892.
17. Songmuang R., Landré O., Daudin B. From nucleation to growth of catalyst-free GaN nanowires on thin AlN buffer layer // *Applied Physics Letters*. 2007. Vol. 91. No. 25. P. 251902.
18. Shugurov K. Y., Mozharov A. M., Bolshakov A. D., et al. Hydrogen passivation of the *n*-GaN nanowire/*p*-Si heterointerface // *Nanotechnology*. 2020. Vol. 31. No. 24. P. 244003.

19. **Bolshakov A. D., Fedorov V. V., Shugurov K. Y., Mozharov A. M., Sapunov G. A., Shtrom I. V., Mukhin M. S., Uvarov A. V., Cirlin G. E., Mukhin I. S.** Effects of the surface preparation and buffer layer on the morphology, electronic and optical properties of the GaN nanowires on Si // *Nanotechnology*. 2019. Vol. 30. No. 39. P. 395602.

REFERENCES

1. **Liu A., Zhang X., Liu Z., et al.**, The roadmap of 2D materials and devices toward chips, *Nano-Micro Lett.* 16 (1) (2024) 119.
2. **Yildirim M. A., Teker K.**, Transport characteristics of gallium nitride nanowire field-effect transistor (GaN-NWFET) for high temperature electronics, *Nano*. 16 (Dec. 02) (2020) 2150021.
3. **Li W., Brubaker M. D., Spann B. T., et al.**, GaN nanowire MOSFET with near-ideal subthreshold slope, *IEEE Electron Device Lett.* 39 (2) (2018) 184–187.
4. **Shugurov K. Y., Mozharov A. M., Fedorov V. V., et al.**, Extremely high frequency Schottky diodes based on single GaN nanowires, *Nanotechnol.* 34 (24) (2023) 245204.
5. **Zhou B., Li J., Dong X., Yao L.**, GaN nanowires/Si photocathodes for CO₂ reduction towards solar fuels and chemicals: Advances, challenges, and prospects, *Sci. China Chem.* 66 (3) (2023) 739–754.
6. **Anbarasan N., Sadhasivam S., Jeganathan K.**, Ultrasensitive self-powered heterojunction ultraviolet photodetector of *p*-GaN nanowires on Si by halide chemical vapour deposition, *Nanotechnol.* 34 (13) (2023) 135201.
7. **Dvoretckaja L., Gridchin V., Mozharov A., et al.**, Light-emitting diodes based on InGaN/GaN nanowires on microsphere-lithography-patterned Si substrates, *Nanomater.* 12 (12) (2022) 1993.
8. **You S., Geens K., Borga M., et al.**, Vertical GaN devices: Process and reliability, *Microelectron. Reliab.* 126 (Nov) (2021) 114218.
9. **Wang C., Shi G., Qiao F., et al.**, Research progress in architecture and application of RRAM with computing-in-memory, *Nanoscale Adv.* 5 (6) (2023) 1559–1573.
10. **Duan X., Cao Z., Gao K., et al.**, Memristor-based neuromorphic chips, *Adv. Mater.* 36 (14) (2024) 2310704.
11. **Zou T., Heo S., Byeon G., et al.**, Two-dimensional tunneling memtransistor with thin-film heterostructure for low-power logic-in-memory complementary metal-oxide semiconductor, *ACS Nano*. 18(21) (2024) 13849–13857.
12. **Thomas A., Niehörster S., Fabretti S., et al.**, Tunnel junction based memristors as artificial synapses, *Frontiers in Neuroscience*. 9 (07 July) (2015) 00241.
13. **Kim D. J., Lu H., Ryu S., et al.**, Ferroelectric tunnel memristor, *Nano Lett.* 12 (11) (2012) 5697–5702.
14. **Shugurov K. Yu., Mozharov A. M., Kaveyev A. K., Fedorov V. V.**, Memristor effect in heterostructures based on nanowires of gallium nitride on silicon, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 18 (4) (2025) 9–20 (in Russian).
15. **Hemesath E. R., Schreiber D. K., Gulsoy E. B., et al.**, Catalyst incorporation at defects during nanowire growth, *Nano Lett.* 12 (1) (2012) 167–171.
16. **Kern W.**, The evolution of silicon wafer cleaning technology, *J. Electrochem. Soc.* 137 (6) (1990) 1887–1892.
17. **Songmuang R., Landré O., Daudin B.**, From nucleation to growth of catalyst-free GaN nanowires on thin AlN buffer layer, *Appl. Phys. Lett.* 91 (25) (2007) 251902.
18. **Shugurov K. Y., Mozharov A. M., Bolshakov A. D., et al.**, Hydrogen passivation of the *n*-GaN nanowire/*p*-Si heterointerface, *Nanotechnol.* 31 (24) (2020) 244003.
19. **Bolshakov A. D., Fedorov V. V., Shugurov K. Y., et al.**, Effects of the surface preparation and buffer layer on the morphology, electronic and optical properties of the GaN nanowires on Si, *Nanotechnol.* 30 (39) (2019) 395602.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

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

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

shugurov17@mail.ru

ORCID: 0000-0001-8973-3187

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

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

mozharov@spbau.ru

ORCID: 0000-0002-8661-4083

КАВЕЕВ Андрей Камильевич – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории мощных полупроводниковых приборов Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе 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, заведующий научно-исследовательской лабораторией Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, старший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета имени Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

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

fedorov_vv@spbstu.ru

ORCID: 0000-0001-5547-9387

THE AUTHORS

SHUGUROV Konstantin Yu.

Alferov University, RAS

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

shugurov17@mail.ru

ORCID: 0000-0001-8973-3187

MOZHAROV Alexey M.

Alferov University, RAS

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

mozharov@spbau.ru

ORCID: 0000-0002-8661-4083

KAVEEV Andrey K.

Ioffe Institute, RAS;

Alferov University, RAS

26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia

kaveev@mail.ioffe.ru

FEDOROV Vladimir V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University;

Alferov University, RAS

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

fedorov_vv@spbstu.ru

ORCID: 0000-0001-5547-9387

*Статья поступила в редакцию 11.05.2025. Одобрена после рецензирования 05.09.2025.
Принята 05.09.2025.*

Received 11.05.2025. Approved after reviewing 05.09.2025. Accepted 05.09.2025.

Научная статья

УДК.621.315.592+621.383.522

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19102>

ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИОДОВ НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО СИЛИЦИДА МАГНИЯ

Д. В. Фомин¹, И. О. Шолыгин¹, А. В. Поляков¹ □,
Н. Г. Галкин², К. Н. Галкин², И. М. Чернев²

¹ Амурский государственный университет, г. Благовещенск, Россия;

² Институт автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения РАН,
г. Владивосток, Россия

□ polyakov_a_1999@mail.ru

Аннотация. В работе синтезирован и изучен непрямозонный полупроводник Mg_2Si , сформированный в виде поликристаллической пленки толщиной 682 нм. Силицидообразование установлено методами комбинационного рассеяния света и ИК-Фурье спектроскопии. С помощью рентгенофазового анализа определено преобладание в образце кристаллографического направления Mg_2Si (220). На основе измерений эффекта Холла был доказан электронный тип проводимости пленки. Из пленки были изготовлены фотодиодные структуры с $p-n$ -переходами $Al/Mg_2Si/Si-n/Au-Sb$ и $Au/Mg_2Si/Si-n/Au-Sb$. Измерены и проанализированы их вольтамперные характеристики. Установлены зависимости фотоотклика структур от длины волны излучения, знака и величины приложенного потенциала; выявлены их особенности. Анализ полученных экспериментальных данных показал, что при высокотемпературном отжиге кремния в нем формируется двойной $p-n$ -переход с запирающим слоем, который вместе с гетеропереходом $Mg_2Si/Si-p$ определяет уникальные фотоспектральные характеристики.

Ключевые слова: силицид магния, фотодиодная гетероструктура, $p-n$ -переход, локальный фотоотклик, фотоспектральная характеристика

Финансирование: Работы по формированию пленок Mg_2Si на кремнии выполнены при финансовой поддержке внутреннего гранта Амурского государственного университета (г. Благовещенск) на 2024 – 2025 гг. Исследования оптических, фоновых и диодных характеристик гетероструктур проведены в рамках Государственного задания Института автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения РАН, г. Владивосток (госбюджетная тема FWW-2026-0007).

Для цитирования: Фомин Д. В., Шолыгин И. О., Поляков А. В., Галкин Н. Г., Галкин К. Н., Чернев И. М. Фотоэлектрические свойства диодов на основе полупроводникового силицида магния // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 19–29. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19102>

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.19102>

PHOTOELECTRIC PROPERTIES OF DIODES BASED ON MAGNESIUM SILICIDE SEMICONDUCTOR

D. V. Fomin ¹, I. O. Sholygin ¹, A. V. Polyakov ¹ ,
N. G. Galkin ², K. N. Galkin ², I. M. Chernev ²

¹Amur State University, Blagoveshchensk, Russia;

²Institute of Automation and Control Processes, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences, Vladivostok, Russia

 polyakov_a_1999@mail.ru

Abstract. In this work, an indirect-gap semiconductor Mg_2Si has been synthesized and studied. Mg_2Si was formed as a 682 nm thick polycrystalline film (the formation was established using Raman scattering and Fourier-transform IR spectroscopies). X-ray phase analysis revealed that the Mg_2Si (220) crystallographic direction in the sample was predominant. Based on the Hall effect measurements, the electronic type of the film conductivity was proven. Photodiode structures with Al/ Mg_2Si /Si-*n*/Au-Sb and Au/ Mg_2Si /Si-*n*/Au-Sb *p-n* junctions were made from the film. Their current-voltage characteristics were measured and analyzed. The dependences of the structure photoresponse on the radiation wavelength, the sign and magnitude of the applied potential were established, and their features were identified. An analysis of the obtained experimental data showed that a double *p-n* junction with a barrier layer was forming in the high-temperature annealing of silicon. This junction, together with the Mg_2Si /Si-*p* heterojunction, determined the unique photospectral characteristics of the system.

Keywords: magnesium silicide, photodiode heterostructure, *p-n* junction, local photo-response, photospectral characteristic

Funding: The work on forming Mg_2Si films on silicon was carried out with the financial support of an internal grant of Amur State University (Blagoveshchensk) for 2024–2025. Studies of optical, phonon and diode characteristics of heterostructures were carried out within the framework of a State Assignment for the Institute of Automation and Control Processes, FEB RAS, Vladivostok (state budget topic FFWF-2026-0007).

For citation: Fomin D. V., Sholygin I. O., Polyakov A. V., Galkin N. G., Galkin K. N., Chernev I. M., Photoelectric properties of diodes based on magnesium silicide semiconductor, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics, 19 (1) (2026) 19–29. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19102>

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

Введение

Силициды с полупроводниковыми свойствами вызывают все возрастающий интерес у научного сообщества как многообещающие материалы для микро- и наноэлектроники [1, 2]. К ним относится, в частности, непрямозонный полупроводник Mg_2Si с шириной запрещенной зоны 0,77 эВ [3, 4]. Этот силицид имеет более высокую фоточувствительность в инфракрасной области, по сравнению с монокристаллическим кремнием [3 – 6]. Оптические и электронные свойства силицида магния позволяют рассматривать его как перспективный материал для оптоэлектронных и термоэлектрических приборов. Однако, несмотря на распространенность исходных материалов, создание приборных структур на основе соединений магния с кремнием пока ограничивается лабораторными прототипами. Это связано со сложностью эпитаксиального роста пленок силицида на подложках кремния и высоким коэффициентом десорбции атомов магния с поверхности подложек [5, 6]. Скорость десорбции этих атомов растет с повышением температуры прогрева подложки сверх 250°C, а также при скоростях осаждения магния до 10 нм/мин, что приводит к отсутствию силицидообразования [7, 8].

Большая часть пленок Mg_2Si , выращенных на монокристаллических подложках кремния и описанных в литературе, состоит, как правило, из разориентированных зерен и имеет поликристаллическую структуру [9, 10]. Множественные границы раздела между зернами приводят к рассеянию фотосгенерированных носителей заряда и ухудшению электрических свойств пленки [8]. В настоящее время идет поиск эффективного метода, который позволял бы получать на подложках кремния пленки Mg_2Si высокого кристаллического качества, важные для изготовления приборных структур.

В данной работе рассматриваются свойства и характеристики фотодиодов на основе структур $Au/Mg_2Si/Si/Au-Sb$ и $Al/Mg_2Si/Si/Au-Sb$, сформированных из пленки силицида магния Mg_2Si (толщина 682 нм).

Экспериментальная часть

Условия формирования пленки силицида магния. Формирование пленки указанного состава проводилось методом реактивной эпитаксии в сверхвысоковакуумной камере Varian прибора РНИ-590 с базовым давлением 10^{-7} Па. Подложка была вырезана из полупроводниковой пластины кремния Si (111) типа КЭФ, с удельным сопротивлением 2 – 15 Ом·см. После высокотемпературного отжига подложки при $1150^\circ C$ на нее был осажден слой аморфного кремния толщиной 60 нм (при комнатной температуре). Далее на атомарно-чистую поверхность полученного слоя поочередно трижды осаждались парно слои магния и кремния. Соотношение толщины слоев Mg/Si было выбрано 3:1. Такой выбор был обусловлен высокой степенью десорбции магния с поверхности подложки при скорости осаждения менее 10 нм/мин и температуре прогрева подложки свыше $200^\circ C$ [7, 8].

Выращивание пленки выполняли при следующих условиях:

скорость осаждения магния 9,4 нм/мин,
 скорость осаждения кремния 1,1 нм/мин,
 температура кремниевой подложки $250^\circ C$ (во время формирования слоев).

В результате была получена пленка толщиной 682 нм.

Оптические свойства пленки. Для подтверждения силицидообразования в пленке, ее исследовали методами комбинационного рассеяния света (КРС) и инфракрасной-Фурье-спектроскопии (ИКФС) на спектрометре NTEGRA SPECTRA II (NT-MDT) и Фурье-спектрофотометре Vertex 80v (Bruker). Спектры КРС и ИКФС пропускания приведены на рис. 1. Видно, что на спектре КРС наблюдаются пики при значениях 259 и 349 cm^{-1} . Эти фоновые моды F_{2g} и LO, согласно данным статей [11, 12], соответствуют силициду магния Mg_2Si .

Спектральные позиции фоновых мод на рис. 1, а отличаются от таковых, известных для монокристаллического Mg_2Si [13] и для пленки, выращенной методом сверхбыстрой эпитаксии [8] (табл. 1).

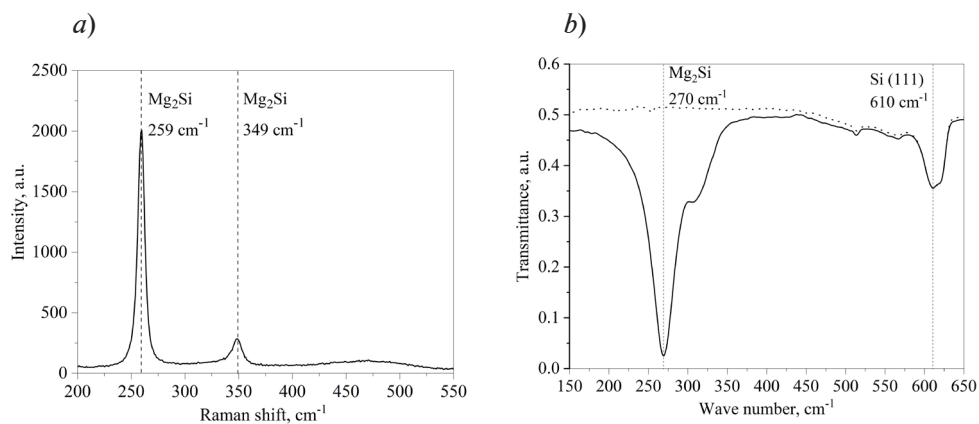


Рис. 1. Спектры комбинационного рассеяния света (КРС) (а) и инфракрасной Фурье-спектроскопии (ИКФС) пропускания (b) синтезированной пленки силицида магния толщиной 682 нм. Температура подложки $250^\circ C$ (ее спектр ИКФС представлен точечной кривой)

Таблица 1

Сравнение полученного спектра КРС пленки Mg_2Si с литературными данными

Фононная мода	Значение рамановского сдвига, cm^{-1}		
	В нашей работе	[8] (метод сверхбыстрой эпитаксии)	[13] (монокристалл)
F_{2g}	259	257	258,5
LO	349	346	360,0

Видно, что для изготовленной нами пленки в спектре КРС наблюдается сдвиг в меньшую сторону волновых чисел для фононной моды LO, по сравнению с монокристаллом; предположительно это может указывать на наличие структурных дефектов в пленке Mg_2Si , а также на сжимающие напряжения внутри нее. Для пленки, полученной методом сверхбыстрой эпитаксии, напротив, наблюдается сдвиг в большую сторону волновых чисел. Различия выражены не так резко, как для монокристаллического Mg_2Si . Причиной этого, скорее всего, является различие в циклах нагрева-охлаждения.

На ИКФС-спектре пропускания пленки (рис. 1, б) наблюдается пик поглощения большой интенсивности со значением 270 см^{-1} , который, по литературным данным [14, 15], свидетельствует об образовании Mg_2Si в составе сформированного образца. Пик поглощения при значении 610 см^{-1} относится к подложке Si (111), на которой была сформирована пленка.

Структурные свойства пленки. Эти свойства были исследованы методом рентгенофазового анализа (РФА) на дифрактометре D8 ADVANCE (Bruker). Рентгеновский спектр объекта представлен на рис. 2. На спектре видны максимумы при значениях $2\Theta = 24,27^\circ$ и $40,13^\circ$, которые, согласно данным статей [8, 16 – 18], указывают на наличие в пленке кристаллических фаз Mg_2Si (111) и Mg_2Si (220) соответственно. Также в спектре наблюдаются пики при $2\Theta = 47,43^\circ$ и $58,09^\circ$, принадлежащие фазам Mg_2Si (311) и Mg_2Si (400) соответственно. Наибольшую интенсивность имеет пик при $2\Theta = 40,13^\circ$, что свидетельствует о преобладающем росте Mg_2Si вдоль кристаллографического направления (220).

В табл. 2 представлены результаты расчета межплоскостных расстояний и периода кристаллической решетки по данным рентгеновской дифракции.

Факт обнаружения на спектрах рентгеновской дифракции множественных рефлексов от разных кристаллографических плоскостей указывает на поликристаллическую структуру изготовленной пленки Mg_2Si . Поликристаллические пленки, как правило,

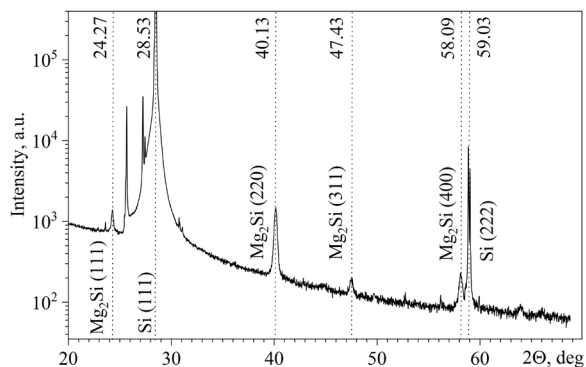


Рис. 2. Спектр рентгеновской дифракции пленки Mg_2Si толщиной 682 нм на подложке КЭФ Si (111) с удельным сопротивлением $2 - 15\text{ Ом}\cdot\text{см}$

Таблица 2

Результаты расчета межплоскостных расстояний d и периода решетки a пленки Mg_2Si по полученным данным рентгеновской дифракции

2Θ , град	Фаза	d , Å	a , Å
24,27	Mg_2Si (111)	3,6629	6,3443
40,13	Mg_2Si (220)	2,2443	6,3479
47,43	Mg_2Si (311)	1,9145	6,3498
58,09	Mg_2Si (400)	1,5860	6,3440

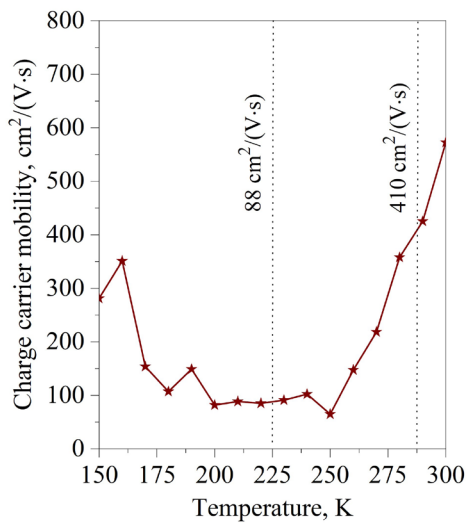


Рис. 3. График температурной зависимости подвижности носителей заряда в структуре Mg_2Si/Si (толщина пленки 682 нм). Индукция магнитного поля на образце 1,8 Тл

было установлено, что пленка при комнатной температуре обладает электронным типом проводимости. Скорее всего, это обусловлено диффузией легирующей примеси — фосфора для полупроводниковой шайбы КЭФ Si (111) — из подложки в пленку Mg_2Si .

Изготовление фотодиодов. Для создания фотодиодов Шоттки со структурами $Au/Mg_2Si/Si/Au-Sb$ и $Al/Mg_2Si/Si/Au-Sb$, поверхность сформированной пленки (лицевая сторона) были осаждены контакты из алюминия Al и золота Au толщиной по 100 нм каждый. На обратной стороне подложки для создания омического контакта необходимо было сформировать слой n^+-Si в слаболегированном кремнии. С этой целью был осажден слой сурьмы Sb толщиной 25 нм, после чего был осажден еще один слой золота толщиной 75 нм. Осаждение контактов было выполнено методом электронно-лучевого испарения; их отжиг — при температуре $350^\circ C$. Структурная схема полученных фотодиодов приведена на рис. 4

При условиях, аналогичных описанным в настоящей статье, формирование и изучение свойств контакта Si/Au-Sb было осуществлено в работе [8], где в качестве подложки была использована высокорезистивная полупроводниковая пластина Si (111) с удельным сопротивлением 1 кОм·см. Таким образом нам было известно, что контакт Si/Au-Sb не образует выпрямляющего барьера Шоттки.

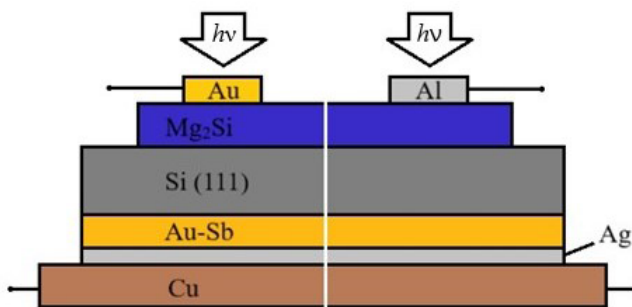


Рис. 4. Структурная схема фотодиодов, изготовленных на основе пленки Mg_2Si (стрелки указывают направление падающих фотонов)

характеризуются внутренними структурными напряжениями, поскольку они состоят из нанокристаллов, ориентированных беспорядочным образом. Также полученные результаты говорят о наличии в пленке высокой концентрации структурных дефектов, что неизбежно приводит к ухудшению электрических свойств [9, 11]. Анализ спектров рентгеновской дифракции позволяет предвидеть неутешительно низкие результаты для характеристик изготовленных диодных структур на основе такой пленки, по сравнению с обычным $p-n$ -фотодиодом на основе монокристаллического кремния [15].

Подвижность носителей заряда в пленке. Расчет указанной подвижности был проведен на основе данных измерений эффекта Холла четырехзондовым методом ван дер Пау. Полученный график зависимости подвижности носителей заряда от температуры показан на рис. 3.

В соответствии с полученными результатами было установлено, что пленка при комнатной температуре обладает электронным типом проводимости. Скорее всего, это обусловлено диффузией легирующей примеси — фосфора для полупроводниковой шайбы КЭФ Si (111) — из подложки в пленку Mg_2Si .

Образец помещали на изолированную контактную площадку для дальнейшего включения фотодиодов в измерительную цепь. Контакт между слоем Au-Sb и медной площадкой был получен с помощью проводящей пасты на основе порошка серебра Ag. Включение контактов на лицевой стороне было реализовано с использованием зажимов.

Вольтамперные характеристики фотодиодов. Вольтамперные характеристики (ВАХ) измеряли без засветки внешним излучением, в прямой (положительный полюс на контактах пленки) и обратной (положительный полюс на контакте Au-Sb) конфигурациях включения.

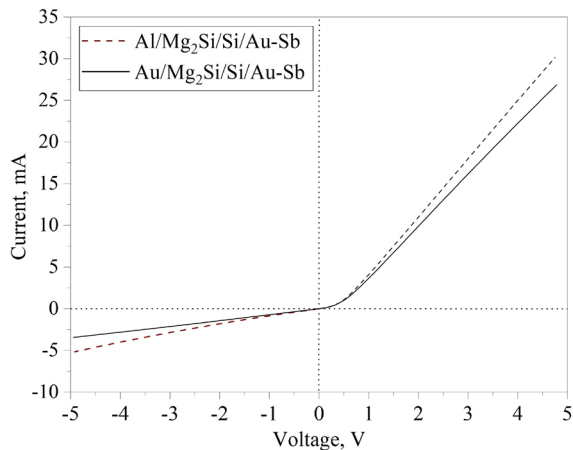


Рис. 5. Вольтамперные характеристики структур Al/Mg₂Si/Si-*n*/Au-Sb и Au/Mg₂Si/Si-*n*/Au-Sb (толщина пленки 682 нм)

Подобный вид ВАХ для исследованных структур не характерен для диодов с обычным *p-n*-переходом [19]. Наиболее вероятно, что контакты металл-Mg₂Si образовывали выпрямляющий барьер Шоттки.

Исследование фотоотклика фотодиода. Фотоспектральные характеристики были измерены на оптическом стенде, где образец освещался монохроматическим излучением в диапазоне от 420 до 1400 нм, с шагом в 2 нм. При этом стенд был изолирован от засветки внешним излучением. Зависимости фотоотклика от длины падающей волны представлены на рис. 6.

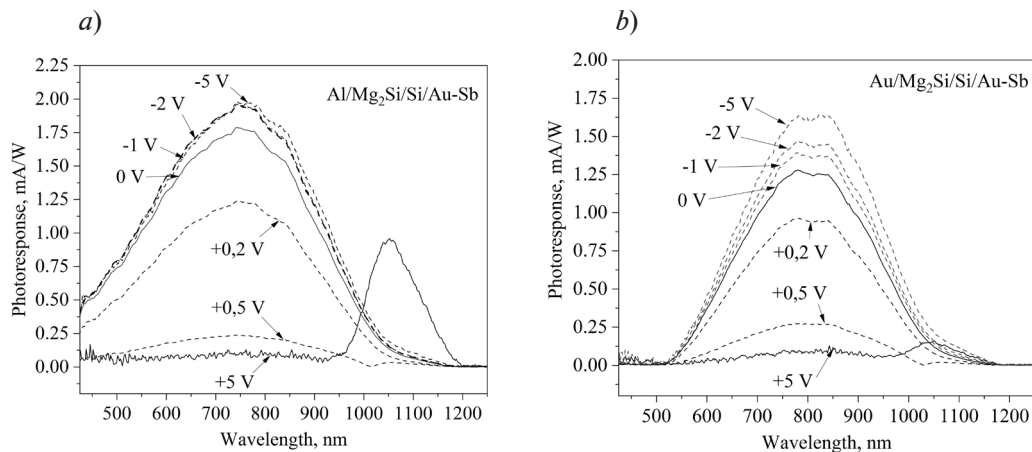


Рис. 6. Графики спектральных фотооткликов для структур Al/Mg₂Si/Si-*n*/Au-Sb (a) и Au/Mg₂Si/Si-*n*/Au-Sb (b). Толщина пленки Mg₂Si – 682 нм

В случае прямого включения диода (положительный полюс на контактах пленки) и приложенном потенциале +0,2 В, для структуры с алюминиевым контактом фотоотклик наблюдался в диапазоне длин волн от 450 до 1050 нм, для диода с золотым контактом – в диапазоне от 550 до 1050 нм. На длинах волн от 1100 нм и более фотоотклик не наблюдался. При повышении приложенного потенциала до +0,5 В, на кривых фотоотклика для обоих контактов начинали появляться локальные пики с положением максимума 1050 нм. Максимумы этого пика наблюдались при потенциале +5 В, причем его интенсивность была значительно выше для контакта Al. Пик фотоотклика характеризуется сдвигом в ИК-область, по сравнению с соответствующими кривыми для существующих кремниевых *p-n*-фотодиодов [15]. Значения интенсивности фотоотклика, полученные в нашей работе при прямом включении, значительно ниже таковых, по сравнению с обычным



p-n-фотодиодом на основе монокристаллического кремния [15]. Это связано, в первую очередь, с активной рекомбинацией носителей заряда на дефектах пленки Mg_2Si .

В случае обратного включения при потенциалах от -1 до -5 В, наблюдался только одиночный пик, который для алюминиевого контакта лежал в диапазоне от 450 до 1050 нм. Что же касается золотого контакта, то его коротковолновая граница была смещена влево и расположена в диапазоне от 550 до 1050 нм. Амплитуда данного пика практически не зависела от величины подаваемого потенциала. Уровень интенсивности пика был также выше для алюминиевого контакта. Разница в фотоотклике для двух указанных контактов связана с разными значениями работы выхода этих металлов. Так, работа выхода электронов из алюминия меньше, чем из золота: 4,25 и 4,70 эВ, соответственно.

Обсуждение результатов и основные выводы

Таким образом, в работе приведены результаты исследования пленки Mg_2Si толщиной 682 нм, сформированной на подложке Si (111). Измерены и проанализированы характеристики диодных структур, изготовленных на основе данной пленки.

Методом спектроскопии комбинационного рассеяния обнаружены сдвиги 259 и 349 cm^{-1} (фононные моды F_{2g} и LO), что доказывает факт силицидообразования, в соответствии с данными статей [11, 12]. Дополнительно указанный факт был подтвержден методом инфракрасной Фурье-спектроскопии (в спектре наблюдался пик поглощения высокой интенсивности при значении волнового числа 270 cm^{-1} , который, по данным статей [14, 15], свидетельствовал об образовании Mg_2Si в составе пленки).

Методом рентгенофазового анализа установлено, что пленки содержат кристаллические фазы Mg_2Si (111) и Mg_2Si (220) при значениях $2\Theta = 24,27^\circ$ и $40,13^\circ$, соответственно [8, 16–18]. Также в пленке содержатся фазы Mg_2Si (311) и Mg_2Si (400) при $2\Theta = 47,43^\circ$ и $58,09^\circ$. Наибольшую интенсивность имеет рефлекс при $2\Theta = 40,13^\circ$, что свидетельствует о преобладающем росте пленки Mg_2Si вдоль кристаллографического направления (220). Из данных рентгенофазового анализа следует, что сформированная пленка имеет поликристаллическую структуру с высокой концентрацией дефектов.

На основе сформированной пленки были изготовлены два диода со структурами вида Al/ Mg_2Si /Si-*n*/Au-Sb и Au/ Mg_2Si /Si-*n*/Au-Sb. Из графиков их вольтамперных характеристик установлено, что работа диодов не соответствует режиму выпрямления стандартного *p-n*-перехода или диода Шоттки [17], что может быть следствием высокотемпературной (свыше 1000 °C) очистки в сверхвысоком вакууме.

Особенность такой технологии и привела к формированию в кремниевой подложке *p-n*-перехода, встроенного с двух сторон [20]. Легирующей примесью *p*-типа в данном случае выступили атомы бора, источником которых служили боросиликатные стекла в сверхвысоковакуумных камерах. Выделение атомов бора происходит преимущественно при дегазации камер при температурах 200 – 250 °C. В результате сформировались сложные гетероструктуры Al/ Mg_2Si /Si-*p*/Si-*n*/Si-*p*/Au-Sb и Au/ Mg_2Si /Si-*p*/Si-*n*/Si-*p*/Au-Sb со встречновключенными *p-n*-переходами и дополнительным гетеропереходом с силицидом магния Mg_2Si .

Такая структура проявляет уникальные фотоспектральные характеристики с локализованной полосой фотоотклика на длине волны 1050 нм и при положительном потенциале на алюминиевом и золотом контактах. Низкие, по сравнению с обычным *p-n*-фотодиодом на основе монокристаллического кремния [15], значения чувствительности обусловлены невысоким кристаллическим качеством сформированных пленок.

Полученные результаты будут использованы, прежде всего, для улучшения технологии формирования пленок Mg_2Si . Также просматривается возможность изготовления узкополосных инфракрасных фотодетекторов, работающих в диапазоне длин волн от 950 до 1200 нм. Исследования показали, что метод реактивной эпитаксии с низкими скоростями осаждения не вполне подходит для изготовления фотодетектирующих структур на основе пленок Mg_2Si . Для наилучшего кристаллического качества пленок силицида магния необходимо получать нанокристаллы Mg_2Si как можно больших размеров.

Предполагаемый путь улучшения технологии – это повышение скоростей осаждения магния и кремния либо уменьшение толщины выращиваемой пленки (отдельных ее слоев или их количества).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shevlyagin A. V., Pyaschenko V. M., Kuchmizhak A. A., Mitsai E. V., Amosov A. V., Balagan S. A., Kulnich S. A. Textured stainless steel as a platform for black Mg₂Si/Si heterojunction solar cells with advanced photovoltaic performance // *Materials*. 2022. Vol. 15. No. 19. P. 6637.
2. Борисенко В. Е., Кривошеева А. В., Мигас Д. Б., Пушкарчук В. А., Филонов А. Б., Шапошников В. Л. Атомарная структура, фундаментальные электронные, оптические и магнитные свойства низкоразмерных структур из полупроводников // Доклады БГУИР (Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники). 2019. Т. 120. № 2. С. 73–84.
3. Yu H., Gao C., Zou J., Yang W., Xie Q. Simulation study on the effect of doping concentrations on the photodetection properties of Mg₂Si/Si heterojunction photodetector // *Photonics*. 2021. Vol. 8. No. 11. P. 509.
4. Yu H., Ji S., Luo X., Xie Q. Technology CAD (TCAD) simulations of Mg₂Si/Si heterojunction photodetector based on the thickness effect // *Sensors*. 2021. Vol. 21. No. 16. P. 5559.
5. Вигдорович Е. Н. Радиационная стойкость эпитаксиальных структур на основе GaAs // Российский технологический журнал. 2019. Т. 7. № 3. С. 41–49.
6. Akiyama T., Hori N., Tanigawa S., Tsuya D., Udono H. Fabrication of Mg₂Si pn-junction photodiode with shallow mesa-structure and ring electrode // *JJAP Conference Proceedings, 2017: Asia-Pacific Conference on Semiconducting Silicides and Related Materials – Science and Technology Towards Sustainable Electronics (APAC Silicide 2016)*. July 16–18, 2016, Fukuoka, Japan. Session ID: 011102.
7. Gouralnik A. S., Shevlyagin A., Chernev I., Ustinov A. Yu., Gerasimenko A. V., Gutakovskii A. K. Synthesis of crystalline Mg₂Si films by ultrafast deposition of Mg on Si (111) and Si (001) at high temperatures. Mg/Si intermixing and reaction mechanisms // *Materials Chemistry and Physics*. 2021. Vol. 258. 15 January. P. 123903.
8. Чернев И. М., Субботин Е. Ю., Аргунов Е. В., Козлов А. Г., Герасименко А. В., Галкин Н. Г., Поляков М. В., Волкова Л. С., Дудин А. А., Гуральник А. С. Пленка Mg₂Si на Si (111), полученная методом сверхбыстрого реактивного осаждения Mg: структура и термоэлектрические свойства // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3-1. С. 106–111 (статья на английском языке).
9. Shevlyagin A., Iyaschenko V., Kuchmizhak A., Mitsai E., Sergeev A., Gerasimenko A., Gutakovskii A. Mg₂Si is the new black: Introducing a black silicide with > 95 % average absorption at 200 – 1800 nm wavelengths // *Applied Surface Science*. 2022. Vol. 602. 15 November. P. 154321.
10. Chernev I. M., Gouralnik A. S., Subbotin E. Yu., Galkin K. N., Kropachev O. V., Goroshko D., Goroshko O. A., Gerasimenko A. V., Lisenkov O. E., Galkin N. G. FeSi and CrSi₂ thin films as transparent conductive layers for VIS/SWIR sensitive Mg₂Si films grown of Si // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2023. Vol. 87. No. 3 Suppl. Pp. S370–S374.
11. Kato T., Sago Y., Fujiwara H. Optoelectronic properties of Mg₂Si semiconducting layers with high absorption coefficients // *Journal of Applied Physics*. 2011. Vol. 110. No. 6. P. 063723.
12. Baleva M., Zlateva G., Atanassov A., Abrashev M., Goranova E. A. Resonant Raman scattering in ion-beam-synthesized Mg₂Si in a silicon matrix // *Physical Review B*. 2005. Vol. 72. No. 11. P.115330.
13. Onari S., Cardona M. Resonant Raman scattering in the II–IV semiconductors Mg₂Si, Mg₂Ge, and Mg₂Sn // *Physical Review B*. 1976. Vol. 14. No. 8. Pp. 3520–3531.
14. Baleva M., Marinova M., Atanassov A. Infrared spectra of semiconducting silicides nanolayers // *Journal of Physics: Conference Series*. 2008. Vol. 113. No. 1. P. 012043.
15. Шольгин И. О., Фомин Д. В., Галкин Н. Г., Галкин К. Н., Чернев И. М., Поляков А. В. Формирование и свойства фотодиодных структур Al/Mg₂Si/Si/Au–Sb // *Известия вузов. Физика*. 2025. Т. 68. № 3. С. 22–31.
16. Stathokostopoulos D., Teknetzi A., Tarani E., Karfaridis D., Chrissafis K., Hatzikraniotis E., Vourlias G. Synthesis and characterization of nanostructured Mg₂Si by pack cementation process // *Results in Materials*. 2022. Vol. 13. No. 1. P. 100252.
17. Конотопский Л. Е., Копылец И. А., Севрюкова В. А., Зубарев Е. Н., Кондратенко В. В. Особенности роста наноразмерных слоев Mg₂Si в многослойных рентгеновских зеркалах Si/Mg₂Si // *Журнал нано- и электронной физики*. 2016. Т. 8. № 2. С. 02021-1–02021-6.

18. Yu H., Deng R., Mo Z., Ji S., Xie Q. Fabrication and characterization of visible to near-infrared photodetector based on multilayer graphene/Mg₂Si/Si heterojunction // *Nanomaterials*. 2022. Vol. 12. No. 18. P. 3230.
19. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. В 2-х книгах. Кн. 1. Пер. с англ., 2-е изд. М.: Мир, 1984. 456 с.
20. Liehr M., Renier M., Wachnik R. A., Werner J., Scilla G. S., Ho P. S. Electrical properties of vacuum annealed Si surface // *Journal of Vacuum Science and Technology A*. 1987. Vol. 5. No. 4. Pp. 2131–2134.

REFERENCES

1. Shevlyagin A. V., П'yaschenko V. M., Kuchmizhak A. A., et al., Textured stainless steel as a platform for black Mg₂Si/Si heterojunction solar cells with advanced photovoltaic performance, *Materials*. 15 (19) (2022) 6637.
2. Borisenko V. E., Krivosheyeva A. V., Migas D. B., et al., Atomic structure, fundamental electronic, optical and magnetic properties of low-dimensional structures of semiconductors, *Doklady BGUIR*. (2) (2019) 73–84 (in Russian).
3. Yu H., Gao C., Zou J., et al., Simulation study on the effect of doping concentrations on the photodetection properties of Mg₂Si/Si heterojunction photodetector, *Photonics*. 8 (11) (2021) 509.
4. Yu H., Ji S., Luo X., Xie Q., Technology CAD (TCAD) simulations of Mg₂Si/Si heterojunction photodetector based on the thickness effect, *Sensors*. 21 (16) (2021) 5559.
5. Vigdorovich E. N., Radiation resistance of epitaxial structures based on GaAs, *Russian Technological Journal*. 7 (3) (2019) 41–49 (in Russian).
6. Akiyama T., Hori N., Tanigawa S., et al., Fabrication of Mg₂Si pn-junction photodiode with shallow mesa-structure and ring electrode, *JJAP Conf. Proc.*, 2017: Asia-Pacific Conf. on Semiconducting Silicides and Related Materials – Science and Technology Towards Sustainable Electronics (APAC Silicide 2016). July 16–18, 2016, Fukuoka, Japan. Sess. ID: 011102.
7. Gouralnik A. S., Shevlyagin A., Chernev I., et al., Synthesis of crystalline Mg₂Si films by ultrafast deposition of Mg on Si (111) and Si (001) at high temperatures. Mg/Si intermixing and reaction mechanisms, *Mater. Chem. Phys.* 258 (15 Jan) (2021) 123903.
8. Chernev I. M., Subbotin E. Yu., Argunov E. V., et al., Mg₂Si film on Si (111) prepared by Ultra-Fast Mg reactive deposition: Crystal structure and thermoelectric properties, *St. Petersburg State Polytechnic University Journal. Physics and Mathematics*. 16 (3.1) (2023) 106–111.
9. Shevlyagin A., Iiyaschenko V., Kuchmizhak A., Mg₂Si is the new black: Introducing a black silicide with > 95 % average absorption at 200–1800 nm wavelengths, *Appl. Surf. Sci.* 602 (15 Nov) (2022) 154321.
10. Chernev I. M., Gouralnik A. S., Subbotin E. Yu., et al., FeSi and CrSi₂ thin films as transparent conductive layers for VIS/SWIR sensitive Mg₂Si films grown of Si, *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* 87 (3 Suppl) (2023) S370–S374.
11. Kato T., Sago Y., Fujiwara H., Optoelectronic properties of Mg₂Si semiconducting layers with high absorption coefficients, *J. Appl. Phys.* 110 (6) (2011) 063723.
12. Baleva M., Zlateva G., Atanassov A., et al., Resonant Raman scattering in ion-beam-synthesized Mg₂Si in a silicon matrix, *Phys. Rev. B*. 72 (11) (2005) 115330.
13. Onari S., Cardona M., Resonant Raman scattering in the II–IV semiconductors Mg₂Si, Mg₂Ge, and Mg₂Sn, *Phys. Rev. B*. 14 (8) (1976) 3520–3531.
14. Baleva M., Marinova M., Atanassov A., Infrared spectra of semiconducting silicides nanolayers, *J. Phys. Conf. Ser.* 113 (1) (2008) 012043.
15. Sholygin I. O., Fomin D. V., Galkin N. G., et al., Formation and properties of Al/Mg₂Si/Si/Au–Sb photodiode structures, *Izvestiya vuzov. Fizika*. 68 (3) (2025) 22–31 (in Russian).
16. Stathokostopoulos D., Teknetzi A., Tarani E., et al., Synthesis and characterization of nanostructured Mg₂Si by pack cementation process, *Results Mater.* 13 (1) (2022) 100252.
17. Konotopskiy L. E., Kopylets I.A., Sevrykova V. A., et al., Features of Mg₂Si layer growth in Si/Mg₂Si multilayers, *J. Nano- & Electron. Phys.* 8 (2) (2016) 02021 (6 pp.) (in Russian).
18. Yu H., Deng R., Mo Z., et al., Fabrication and characterization of visible to near-infrared photodetector based on multilayer graphene/Mg₂Si/Si heterojunction, *Nanomater.* 12 (18) (2022) 3230.

19. Sze S. M., Physics of semiconductor devices, 2-nd edition, John Wiley & Sons, New York, 1981.

20. Liehr M., Renier M., Wachnik R. A., et al., Electrical properties of vacuum annealed Si surface, J. Vac. Sci. Technol. A. 5 (4) (1987) 2131–2134.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ФОМИН Дмитрий Владимирович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики, заместитель директора по науке и инновациям Института компьютерных и инженерных наук Амурского государственного университета, г. Благовещенск, Россия.

675027, Россия, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21

e-office@yandex.ru

ORCID: 0000-0002-5474-5281

ШОЛЫГИН Илья Олегович — инженер кафедры физики Института компьютерных и инженерных наук Амурского государственного университета, г. Благовещенск, Россия.

675027, Россия, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21

ilia.sholygin235@bk.ru

ORCID: 0009-0004-6651-1468

ПОЛЯКОВ Алексей Вячеславович — младший научный сотрудник кафедры физики Института компьютерных и инженерных наук Амурского государственного университета, г. Благовещенск, Россия.

675027, Россия, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21

polyakov_a_1999@mail.ru

ORCID: 0009-0009-5104-5966

ГАЛКИН Николай Геннадьевич — доктор физико-математических наук, Заслуженный деятель науки Российской Федерации, главный научный сотрудник лаборатории оптики и электрофизики Института автоматизации и процессов управления Дальневосточного отделения РАН, г. Владивосток, Россия.

690041, Россия, г. Владивосток, ул. Радио, 5

galkin@iacp.dvo.ru

ORCID: 0000-0003-4127-2988

ГАЛКИН Константин Николаевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории оптики и электрофизики Института автоматизации и процессов управления Дальневосточного отделения РАН, г. Владивосток, Россия.

690041, Россия, г. Владивосток, ул. Радио, 5

galkinkn@iacp.dvo.ru

ORCID: 0000-0001-5386-1013

ЧЕРНЕВ Игорь Михайлович — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории оптики и электрофизики Института автоматизации и процессов управления Дальневосточного отделения РАН, г. Владивосток, Россия.

690041, Россия, г. Владивосток, ул. Радио, 5

igor_chernev7@mail.ru

ORCID: 0000-0002-8726-9832

THE AUTHORS**FOMIN Dmitriy V.**

Amur State University
21 Ignatievskoe HWY, Blagoveshchensk, 675027, Russia
e-office@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-5474-5281

SHOLYGIN Ilya O.

Amur State University
21 Ignatievskoe HWY, Blagoveshchensk, 675027, Russia
ilia.sholygin235@bk.ru
ORCID: 0009-0004-6651-1468

POLYAKOV Aleksey V.

Amur State University
21 Ignatievskoe HWY, Blagoveshchensk, 675027, Russia
polyakov_a_1999@mail.ru
ORCID: 0009-0009-5104-5966

GALKIN Nikolay G.

Institute of Automation and Control Processes, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences.
5 Radio St., Vladivostok, 690041, Russia
galkin@iacp.dvo.ru
ORCID: 0000-0003-4127-2988

GALKIN Konstantin N.

Institute of Automation and Control Processes, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences.
5 Radio St., Vladivostok, 690041, Russia
galkinkn@iacp.dvo.ru
ORCID: 0000-0001-5386-1013

CHERNEV Igor M.

Institute of Automation and Control Processes, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences.
5 Radio St., Vladivostok, 690041, Russia
igor_chernev7@mail.ru
ORCID: 0000-0002-8726-9832

*Статья поступила в редакцию 29.05.2025. Одобрена после рецензирования 29.10.2025.
Принята 29.10.2025.*

Received 29.05.2025. Approved after reviewing 29.10.2025. Accepted 29.10.2025.

Original article

UDC 620.92; 539.232; 538.9; 535.215.6

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19103>

TEMPERATURE EFFECTS ON THE LIGHT CURRENT-VOLTAGE CHARACTERISTICS OF THE HETEROJUNCTION SOLAR CELLS FABRICATED ON GALLIUM-DOPED SILICON SUBSTRATES

O. K. Ataboev¹ , Sh. B. Utamuradova¹, E. I. Terukov²,
A. I. Baranov³, K. Kh. Iniyatova⁴

¹ Research Institute of Semiconductor Physics and Microelectronics at the National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek, Tashkent, Republic of Uzbekistan;

² Ioffe Institute, RAS, St. Petersburg, Russia;

³ Alferov University, RAS, St. Petersburg, Russia;

⁴ Nukus State Technical University, Nukus, Karakalpakstan, Republic of Uzbekistan

 omonboy12@mail.ru

Abstract. In this study, the impacts of temperature on the light current-voltage characteristics of heterojunction solar cells fabricated on gallium-doped crystalline *p*-type silicon (c-Si) has been studied under air mass zero spectrum (136.7 mW/cm²) in the temperature range from 173 to 373 K. Our experimental results indicated that the short-circuit current density increased linearly with temperature, exhibiting a positive temperature coefficient of 0.058%/K, whereas the open-circuit voltage (V_{oc}) decreased linearly. From the experiment, the calculated temperature coefficient value of the V_{oc} was found to be $-0.182\%/K$. Both the maximum output power and conversion efficiency of the heterojunction solar cells increased linearly with decreasing temperature from 373 K, reaching peak values of ~ 29.5 mW/cm² and $\sim 21.5\%$ at 173 K. The temperature coefficient of the maximum output power was evaluated to be $-0.2\%/K$, which represents one of the record-breaking small values reported among SCs based on other single c-Si technologies.

Keywords: heterojunction solar cell, temperature dependence, open-circuit voltage, conversion efficiency, temperature coefficient

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 24-79-10275).

For citation: Ataboev O. K., Utamuradova Sh. B., Terukov E. I., Baranov A. I., Iniyatova K. Kh., Temperature effects on the light current-voltage characteristics of the heterojunction solar cells fabricated on gallium-doped silicon substrates, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (1) (2026) 30–42. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19103>

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 620.92; 539.232; 538.9; 535.215.6

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19103>


ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА СВЕТОВЫЕ ВОЛЬТАМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ГЕТЕРОСТРУКТУРНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ НА ПОДЛОЖКАХ КРЕМНИЯ, ЛЕГИРОВАННОГО ГАЛЛИЕМ

О. К. Атабоев¹ , Ш. Б. Утамурадова¹, Е. И. Теруков²,
А. И. Баранов³, К. Х. Иниятова⁴

¹ Научно-исследовательский институт физики полупроводников и микроэлектроники при Национальном университете Узбекистана имени М. Улугбека, г. Ташкент, Республика Узбекистан;

² Физико-технический институт имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия;

³ Академический университет имени Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия;

⁴ Нукусский государственный технический университет, г. Нукус, Каракалпакстан, Республика Узбекистан
 omonboy12@mail.ru

Аннотация. В работе исследовано влияние температуры на световые вольтамперные характеристики гетероструктурных солнечных элементов (изготовлены на кремнии *p*-типа, легированном галлием) при нулевой воздушной массе (поверхностная плотность потока энергии 136,7 мВт/см²) в температурном диапазоне 173 – 373 К. Экспериментальные результаты показали, что плотность тока короткого замыкания линейно возрастает с повышением температуры, демонстрируя положительный температурный коэффициент 0,058%/К, тогда как напряжение холостого хода V_{oc} линейно снижается. Температурный коэффициент V_{oc} , рассчитанный по результатам эксперимента, составил –0,182%/К. Максимальная выходная мощность и коэффициент преобразования гетероструктурных солнечных элементов линейно увеличивались при понижении температуры от 373 К, достигая максимальных значений (около 29,5 мВт/см² и 21,5% при 173 К). Согласно оценке, температурный коэффициент максимальной выходной мощности составил всего –0,2%/К, что является одним из рекордно малых значений для солнечных элементов на основе других технологий монокристаллического кремния.

Ключевые слова: гетеропереходный солнечный элемент, температурная зависимость, напряжение холостого хода, эффективность преобразования, температурный коэффициент

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-79-10275).

Для цитирования: Атабоев О. К., Утамурадова Ш. Б., Теруков Е. И., Баранов А. И., Иниятова К. Х. Влияние температуры на световые вольтамперные характеристики гетероструктурных солнечных элементов, изготовленных на подложках кремния, легированного галлием // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 30–42. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19103>

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

Introduction

In recent years, the global demand for renewable energy sources has shown a consistent upward trend. This increase is largely driven by the progressive depletion of fossil fuel resources, rapid economic growth, and the ongoing expansion of industrial sectors. Consequently, to mitigate the emerging energy shortfall, a worldwide shift toward renewable energy technologies – particularly solar PhotoVoltaic (PV) one is becoming increasingly prominent [1]. Among the various renewable energy technologies, PV systems based on silicon (Si), cadmium telluride (CdTe), copper-indium-gallium-selenide ($\text{CuInGa}_{1-x}\text{Se}_x$), copper-zinc-tin-selenide (CuZnSnSe) (the last two are abbreviated as CIGS and CZTS), and perovskite materials represent the most prominent and rapidly advancing solutions due to their scalability, efficiency, and compatibility with diverse applications [2].

Currently, silicon-based solar cells (SCs) dominate the global PV market, accounting for over 95% of the total market share. This dominance is largely attributed to the maturity of Si fabrication technologies and the widespread availability of Si as a raw material [3]. Among Si-based PV technologies, silicon heterojunction solar cells (HJT SCs) have attracted considerable attention owing to their high-efficiency architecture. As a result, HJT SCs have achieved high conversion efficiencies of up to 27.1% for *n*-type and 26.6% for *p*-type Si substrates, significantly surpassing the performance of passivated emitter and rear contact (abbreviated as PERC) and conventional homojunction cells [4, 5]. Moreover, this type SCs have a higher bifacial coefficient compared to other Si-based technology SCs [6]. These advantages make HJT SCs highly attractive not only for terrestrial applications but also for space applications.

To date, the performance of SCs has been mainly evaluated under the standard test conditions (AM1.5G, 100 mW/cm²) in the temperature range from 10 to 80°C. However, there is a notable lack of data regarding the PV behavior of SCs at sub-zero temperatures, particularly under air mass zero (AM0) irradiation conditions, which are representative of space environments [7, 8]. According to Refs. [9, 10], spacecrafts in low-Earth orbit (LEO) travel at approximately 8 km/s and complete one orbit around the Earth every 90 minutes. As the spacecraft passes through each orbit, it either enters the illuminated (sunlit) side of the Earth or shadowed (dark) one. As a result, the temperature on the sunlit side can rise up to 100°C (373 K), while on the dark side and during transitions into and out of the Earth's shadow, the temperature can drop as low as -100°C (173 K).

Based on the above-mentioned, here we explore the influence of temperature on the light *J-V* curves of HJT SCs fabricated on gallium-doped *p*-type c-Si substrates. The light *J-V* curves were systematically analyzed over a broad temperature range from 173 to 373 K under AM0 (air mass zero) spectral conditions (flux surface density of the electromagnetic energy was 136.7 mW/cm²).

Material preparation and methods

Sample preparation. The investigated HJT SCs were fabricated at R&D Center of Thin film technologies in Energetics, Saint-Petersburg, Russian Federation. To perform investigation, Si HJT SCs (Fig. 1) were created on gallium-doped *p*-type c-Si substrates grown by the Czochralski (Cz) method, with an acceptor concentration of $N_a \geq 3.1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, a thickness of $\sim 135 \mu\text{m}$, crystallographic orientation (100) and with an initial bulk minority carrier lifetime of $\tau_{bulk} \geq 0.2 \text{ ms}$. In the c-Si substrate, the oxygen concentration was $\sim 2.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, the carbon concentration was $\sim 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, and the dislocation density was $\sim 500 \text{ cm}^{-3}$.

Initially, *p*-type c-Si substrates underwent a wet chemical cleaning procedure. After that, substrates were subjected to pyramidal surface texturing in order to minimize incident light reflection and enhance the short-circuit current density (J_{sc}) of the HJT SCs [11]. Next, thin intrinsic hydrogenated amorphous silicon (*i*- α -Si:H) layers $\sim 5 \text{ nm}$ thick were deposited on both front and rear surfaces of the textured substrates using Radio-Frequency Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition method (RF PECVD). The purpose of this layer was to passivate dangling bonds (Si – H) on the surfaces of Si substrates [12]. Using the same method to form *p-n* junction, heavy doped *n*⁺-type α -Si:H layers were deposited on the front side of the *i*- α -Si:H coated *p*-type c-Si substrates. Simultaneously, to create the back-surface field (BSF), heavy doped *p*⁺-type α -Si:H layers were deposited on the rear sides of *i*- α -Si:H deposited *p*-type c-Si substrates. The thicknesses of both the front and rear *n*⁺-type and *p*⁺-type α -Si:H layers were kept identical (they were from 10 to 15 nm). To obtain *p*⁺-type and *n*⁺-type conductivity in

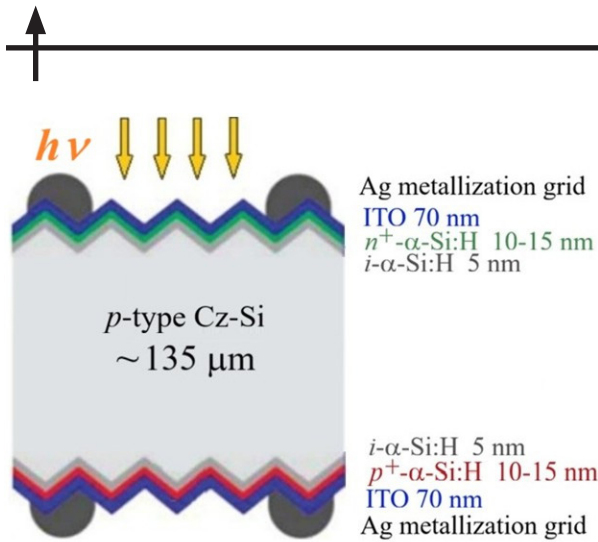


Fig. 1. A cross-section view of the finished HJT SCs based on p -type c -Si substrates

the α -Si:H layers respectively, the monosilane (SiH_4) gas was diluted with (high-purity, 99.999%) diborane (B_2H_6) and phosphine (PH_3) gases. All α -Si:H layers were deposited at a low temperature from 180 to 185°C with a frequency of 40.68 MHz. Further, transparent conductive oxide (TCO) layers composed of indium tin oxide (ITO – 90 wt.% In_2O_3 and 10 wt.% SnO_2), a thickness of ~ 70 nm, were deposited on the front and rear surfaces of the photosensitive heterostructures using Radio-Frequency (RF) magnetron sputtering. To collect photogenerated charge carriers from the heterostructure surfaces, silver (Ag) paste was screen-printed onto both the front and rear sides of the photosensitive heterostructures. The “Busbar” type contacts had a height of ~ 25 μm , a width of ~ 45 μm , and were patterned with a

pitch of ~ 1.36 mm. A view of the HJT SCs is shown in Fig. 1. To perform experiment, samples measuring 1×1 cm were cut from a high-efficiency HJT SCs with the full size 15.6×15.6 cm. After cutting, no additional passivation was applied to the lateral surfaces, and the edge isolation was not done. A solid-state “MiniMaker2” diode laser with a wavelength of 1064 nm was used to cut the samples.

This study has focused on characterizing the temperature-dependent performance of p -type c -Si HJT SCs in the temperature range from 173 to 373 K, without considering radiation effects.

Characterization and measurement of performances. To study the effect of temperature on the light J - V curves of HJT SCs, these curves were measured using a liquid nitrogen cryostat (Janis VPF-100) in the temperature range from 173 to 373 K, in 20 K increments. In the course of the measurements, the samples were illuminated by a class AAA pulsed solar simulator (SS-80AA simulator) under AM0 spectral conditions (136.7 mW/cm^2). The short-circuit current density (J_{sc}) and open-circuit voltage (V_{oc}) were recorded using a Keithley SM2460 Source Meter.

In the course of the measurements, temperature stabilization was achieved using a liquid nitrogen cryostat equipped with temperature monitoring device, namely, a Lake Shore Model 335 temperature controller having a control accuracy of $\pm 0.1^\circ\text{C}$. Each measurement of the light J - V curves was conducted after the target temperature was reached and maintained for 4 – 5 min under AM0 spectrum (136.7 mW/cm^2). Temperature coefficients of the output parameters of the HJT SCs, such as the open-circuit voltage (V_{oc}), the short-circuit current density (J_{sc}), the fill factor (FF), the maximum output power (P_{max}) and the conversion efficiency (η) were extracted from the slopes of the straight-line portions of the experimental temperature-dependent curves.

About 30 HJT SCs samples were fabricated for the investigation. They had similar parameters within a margin of error of no more than 2%. Of these samples, only one, measuring 1×1 cm, was selected for the temperature-dependence investigation.

Results and discussion

Theoretical formulation of the open-circuit voltage versus temperature. It has been reliably established that the key PV parameters of HJT SCs, such as V_{oc} , J_{sc} , FF , P_{max} and η exhibit significant temperature dependence. Among them, V_{oc} is the most sensitive to ambient temperature, demonstrating a pronounced decrease as the temperature goes up, which in turn leads to a significant reduction in the η value of the HJT SCs [13, 14].

To interpret the experimental temperature dependence $V_{oc}(T)$ for the HJT SCs (see further Fig. 3, b), we employed a current transport model previously reported in [15, 16]. This model enables the analysis of solar cell performance under arbitrary injection conditions and for any ratio of carrier diffusion length (L_{diff}) to substrate thickness (d). To derive the fundamental equations, an n^+p - p^+ heterostructure was considered, accounting for the electronic properties of both the n^+p and p - p^+ heterojunctions. By applying appropriate boundary conditions at the interfaces, the key expression describing the of $V_{oc}(T)$ was obtained. A comprehensive derivation and discussion

of these equations are provided in our previous work [17]. Therefore, only a brief overview is presented in this study.

It is well known that when a solar cell is illuminated with white light, nonequilibrium electron-hole pairs are photogenerated within the base region. These carriers are separated by the built-in electric field at the heterojunction, resulting in the generation of photocurrent. Consequently, the equivalent electrical circuit of a HJT SCs can be modeled through an ideal current source of density J_{sc} . Under this illumination condition, the corresponding boundary conditions are defined as follows:

$$\frac{d\Delta n}{dx} = -\frac{J - J_{surf}}{qD} \text{ at } x = 0, \quad \frac{d\Delta n}{dx} = 0 \text{ at } x = d, \quad (1)$$

where q is the elementary charge, J_{surf} is the total surface recombination current density, d is the c-Si substrate thickness, Δn is the excess carrier concentration;

$$J_{surf} = qS_0\Delta n_{(x=0)} + qS_d\Delta n_{(x=d)},$$

where S_0, S_d are the surface recombination velocities on the front and rear surfaces of substrate, respectively.

Taking into consideration the theoretical framework established in our previous work [16], as well as the boundary conditions (1), the following analytical expression for the current density J was derived:

$$J = \frac{\sinh\left(\frac{d}{L_{diff}}\right)}{\cosh\left(\frac{d-x}{L_{diff}}\right)} \left(-qGL_{diff} + \frac{qD\Delta n(x)}{L_{diff}} \right) + J_{surf}, \quad (2)$$

at the boundary of the n^+p heterojunction (for the cross-section $x = 0$) Eq. (2) takes the form:

$$J = -J_{sc} + \frac{qD\Delta n_{(x=0)}}{L_{diff}} \cdot \tanh\left(\frac{d}{L_{diff}}\right) + J_{surf}, \quad (3)$$

where

$$J_{sc} = qGL_{diff} \tanh\left(\frac{d}{L_{diff}}\right). \quad (4)$$

The voltage V drops across the HJT SC structure is predominantly determined by the forward bias applied to the n^+p heterojunction [15, 16]:

$$V = \frac{kT}{q} \ln \left[\frac{\Delta n (\Delta n + N_a)}{n_i^2(T)} \right], \quad (5)$$

where $n_i(T)$ is the intrinsic equilibrium carrier concentration in the substrate at a given temperature T ; k is the Boltzmann constant.

Under open-circuit conditions ($J = 0$), the excess carrier concentration Δn is uniform over all cross-sections of the substrate and,

$$\Delta n(V_{oc}) = \frac{J_{sc}}{q \left[\frac{D}{L_{diff}} \tanh\left(\frac{d}{L_{diff}}\right) + S \right]}, \quad (6)$$

where $S = S_0 + S_d$.

Open circuit voltage V_{oc} can be estimated as

$$V_{oc}(T) = \frac{E_g(T)}{q} - \left. \left. \left. \frac{kT}{q} \ln \left\{ \frac{N_{c0} N_{v0}}{N_a(T) + \frac{J_{sc}(T)}{q \left[\frac{D}{L_{diff}} \tanh\left(\frac{d}{L_{diff}}\right) + S(T) \right]}} \right\} \left(\frac{T}{T_0} \right)^3 \right. \right. \right. \quad (7)$$

where N_{c0} , N_{v0} are the effective density of states in conduction and valence band at $T_0 = 300$ K, D is the diffusion coefficient.

Temperature dependence of output PV parameters of HJT SCs. In order to investigate the effects of temperature on the output PV parameters of HJT SCs fabricated on p -type c-Si substrates, light J - V curves were measured under AM0 spectrum (136.7 mW/cm^2) in the temperature range between 173 and 373 K (see Fig. 2). It can be seen in Fig. 2 that ambient temperature has a pronounced impact on the shape of the light J - V curves. Specially, the J_{sc} value increases slightly with temperature, while the V_{oc} exhibits a decreasing trend.

As Fig. 2 suggests at elevated temperatures, the influence of series resistance R_s on the shape of the light J - V curves becomes less significant, as observed a sharp increase in J_{sc} within this temperature range. In contrast, in the high temperature range, a significant decrease in the shunt resistance R_{sh} is observed, as clearly illustrated by Fig. 2.

In order to investigate the temperature dependence of each output PV parameter, such as V_{oc} , J_{sc} , FF , P_{max} and η , of HJT SCs fabricated on p -type c-Si substrates, we analyzed the variation of all key output characteristics as a function of temperature.

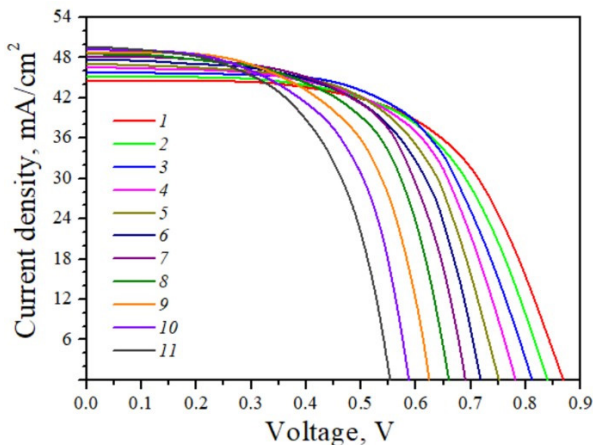


Fig. 2. Light J - V curves of HJT SCs based on p -type c-Si substrate under AM0 spectrum (136.7 mW/cm^2) in the temperature range between 173 and 373 K.

T , K: 173 (1), 193 (2), 213 (3), 233 (4), 253 (5), 273 (6), 293 (7), 313 (8), 333 (9), 353 (10), 373 (11)

Fig. 3, a presents the temperature dependence of short-circuit current density $J_{sc}(T)$ of HJT SCs based on p -type c-Si substrates under AM0 spectrum (136.7 mW/cm^2). The experimental results demonstrate a linear increase in J_{sc} with temperature. For example, the J_{sc} value increased at a rate of $0.028 \text{ mA/K}^{\circ}\text{C}$ from 44.6 mA/cm^2 to $\sim 50 \text{ mA/cm}^2$ in the taken temperature range. It is well known that the bandgap of c-Si narrows with increasing temperature [18], causing a shift in the absorption coefficient in the direction of the long-wave region. As a result, the substrate absorbs a broader spectrum of infrared radiation, enhancing electron-hole pair generation in the photoactive region [19, 20].

Based on the experimental results, the temperature coefficients of the short-circuit current density (TCJ_{sc}) was extracted from the slope of the straight-line portion of J_{sc} versus temperature characteristics for HJT SCs based on p -type c-Si substrates. The TCJ_{sc} value was

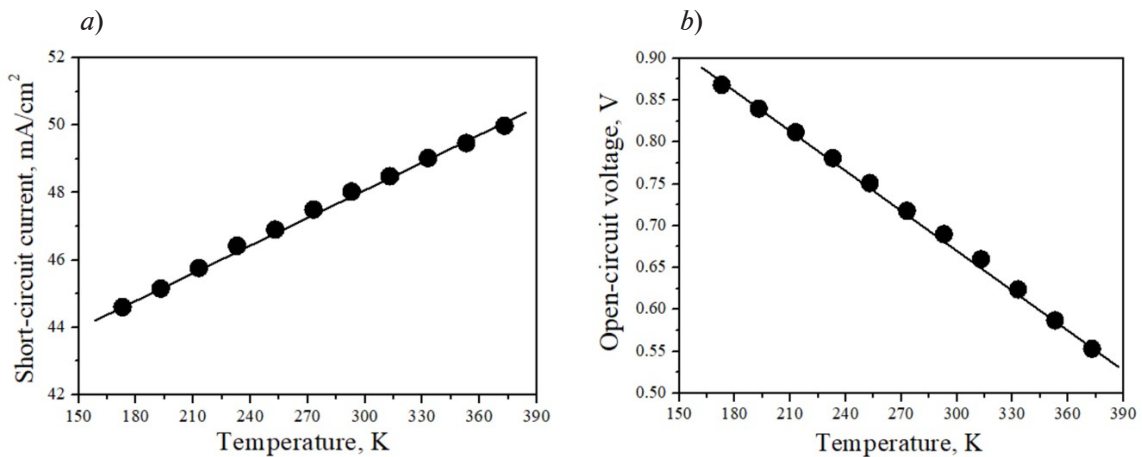


Fig. 3. Temperature dependences of short-circuit current density (a) and open-circuit voltage (b) of HJT SCs based on *p*-type c-Si substrates under AM0 spectrum

calculated to be 0.058%/K. This value is in good agreement with the previously reported data in Ref. [19].

The experimental results on the temperature dependence of open-circuit voltage $V_{oc}(T)$ for HJT SCs based on *p*-type c-Si substrates under AM0 spectrum (136.7 mW/cm²) are given in Fig. 3, b. As shown, the V_{oc} value decreases linearly with increasing temperature. When decreasing, the V_{oc} takes on values from 0.8684 to 0.5530 V as the temperature increases from 173 to 373 K. This decrease in V_{oc} observed is primarily attributed to the temperature-induced narrowing of the Si bandgap [18], the exponential rise in the reverse saturation current, and the increase in the intrinsic carrier concentration n_i [21], as described by Eq. (5). Simultaneously, according to Eq. (7), PV parameters of HJT SCs, such as J_{sc} , surface $S(T)$ and bulk $\tau(T)$ recombination velocity, acceptor concentration $N_a(T)$ and minority carriers diffusion length L_{diff} exhibit an increasing trend with temperature. Within the temperature range under study, the total surface recombination velocity $S(T)$ in *p*-type HJT SCs increased from 10.6 cm/s at 173 K to 21.8 cm/s at 373 K, which is in good agreement with the data reported in Ref. [22]. The total recombination velocity, encompassing both surface ($S = S_0 + S_d$) and bulk $\tau(T)$ contributions at various temperatures, was estimated using the approach proposed in Refs. [15, 16]. The combined temperature-dependent changes in these parameters contribute to the observed reduction in V_{oc} .

The temperature coefficients of the open-circuit voltage (TCV_{oc}) for HJT SCs based on *p*-type c-Si substrates were determined from the slopes of the straight-line portions of the experimental temperature-dependent curves $V_{oc}(T)$ which exhibited the TCV_{oc} value -0.182% /K in the range from 173 to 373 K. Notably, the obtained value is significantly lower than those reported for other c-Si SCs technologies [7, 19].

Fig. 4 presents experimental results on the temperature dependence of the fill factor $FF(T)$ of HJT SCs based on *p*-type c-Si substrates under AM0 spectrum (136.7 mW/cm²). It is well known that the FF is one of the key performance indicators of SCs, reflecting the quality and ideality of the *p-n* junction. It is defined by the following expression [20]:

$$FF = \frac{J_m V_m}{J_{sc} V_{oc}}, \quad (8)$$

where J_m , V_m are the current density and the voltage at the maximum power point.

As illustrated in Fig. 4, the FF of the HJT SCs fabricated on *p*-type c-Si exhibits an almost linear decline from 76.0% to approximately

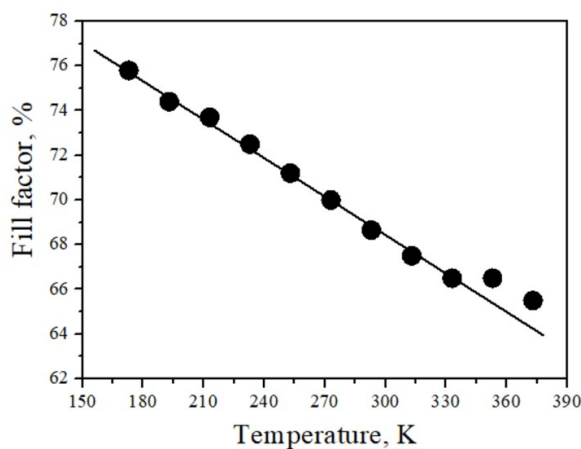


Fig. 4. Temperature dependence of the fill factor of HJT SCs based on *p*-type c-Si substrates under AM0 spectrum

65.5% as the temperature increases from 173 to 373 K. Within this temperature range, the series resistance (R_s) decreases slightly from $\sim 4.9 \Omega \cdot \text{cm}^2$ to $\sim 2.0 \Omega \cdot \text{cm}^2$ (see Fig. 5, *a*). In contrast, the shunt resistance (R_{sh}) exhibits a more pronounced linear decrease from $\sim 905 \Omega \cdot \text{cm}^2$ to $\sim 227 \Omega \cdot \text{cm}^2$ (Fig. 5, *b*), which significantly contributes to the reduction in the FF at elevated temperatures.

In HJT SCs, the R_s was determined from the slope of the J - V curve at the open-circuit voltage point, while the R_{sh} was derived from the slope at the short-circuit current point [23].

The R_s of a SC^{sh} comprises multiple resistive components connected in series with the p - n junction, including the bulk resistances of the p -type and n -type semiconductor regions, the metal-semiconductor contact resistances. Conversely, the R_{sh} characterizes current leakage pathways through, surface recombination currents, bulk defect-assisted tunneling and peripheral leakage at device edges [24].

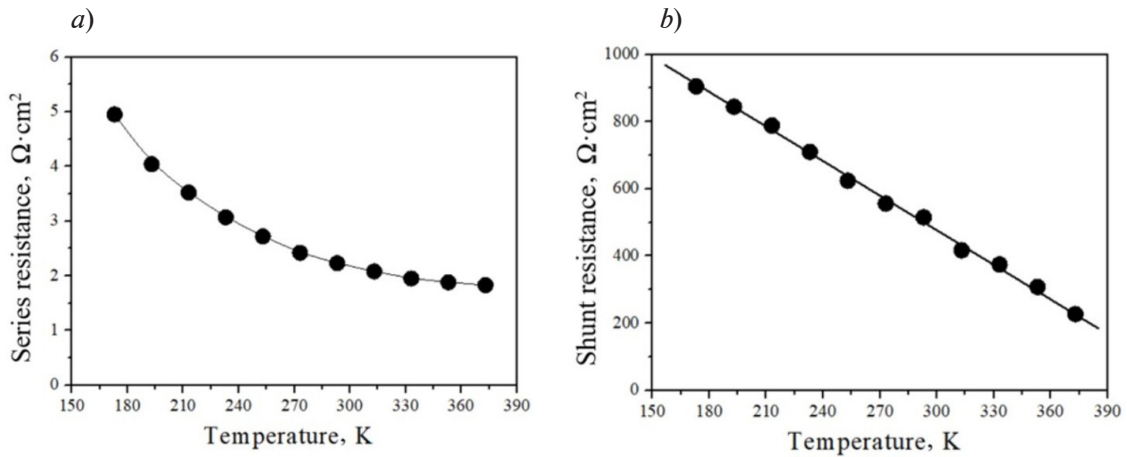


Fig. 5. Temperature dependence of the series (*a*) and shunt resistances (*b*) of HJT SCs based on p -type c-Si substrates under AM0 spectrum

It is well known that the FF of a SCs is influenced by both R_s and R_{sh} . To achieve a high FF value, the series resistance R_s must be minimized, while the shunt resistance R_{sh} should be maximized. In our study, a reduction in the R_s with increasing temperature was clearly observed, which, under typical conditions, should lead to an increase in FF . However, the experimental results revealed a contrary behavior, wherein the FF decreased with temperature. One of the primary reasons for this discrepancy is the simultaneous reduction in the R_{sh} value due to parasitic leakage paths through p - n junction at elevated temperatures (Fig. 5, *b*), as well as the linear decrease in the V_{oc} with temperature. According to Eq. (8), the FF exhibits a positive correlation with the V_{oc} , hence, a reduction in the V_{oc} leads to a corresponding decline in the FF . As a result, the combined effect of decreasing the R_{sh} and V_{oc} leads to a deterioration of the FF with increasing temperature, as confirmed by our experimental data [25].

The temperature coefficient of the FF ($TCFF$) and R_{sh} (TCR_{sh}), determined from the slope of the linear decreases in the FF and R_{sh} , were found to be $-0.077\%/K$ and $-0.375\%/K$, respectively, over the temperature range under study.

Fig. 6 shows the temperature dependence of the maximum output power $P_{max}(T)$ (*a*) and the conversion efficiency $\eta(T)$ (*b*) of the HJT SCs based on p -type c-Si substrates under $136.7 \text{ mW}/\text{cm}^2$. The P_{max} value is determined by the product of the J_{sc} , V_{oc} and FF values.

As illustrated in Fig. 6, *a*, the P_{max} value of HJT SCs decreases linearly from ~ 29.5 to $\sim 18.0 \text{ mW}/\text{cm}^2$ with increasing temperature from 273 to 373 K. This behavior of the P_{max} is primarily associated with the temperature dependencies of the key PV parameters such as V_{oc} , FF , R_{sh} and R_s , which collectively have the most significant impact on the $P_{max}(T)$ characteristics [26].

The temperature coefficient of the P_{max} (TCP_{max}) for HJT SCs was evaluated to be $-0.2\%/K$ in the investigated temperature range. These results demonstrate that the studied p -type c-Si HJT SCs exhibit the modest temperature coefficient of the P_{max} among various Si-based PV technologies [7, 19]. The relatively low temperature coefficient of the P_{max} in HJT SCs, compared to those of other Si-based PV technologies, can be attributed to the presence of i - α -Si:H passivation layers on both surfaces of the c-Si substrate.

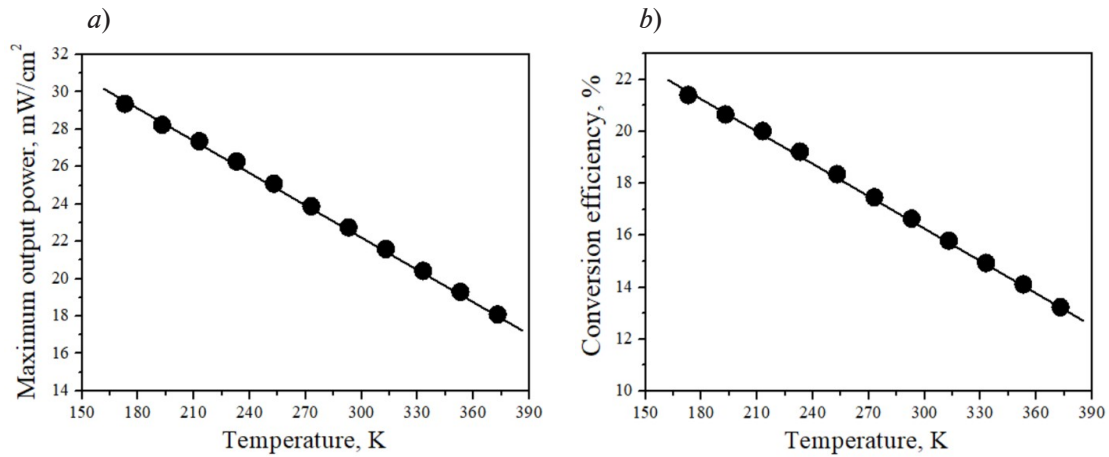


Fig. 6. Temperature dependences of the maximum output power (a) and conversion efficiency (b) of HJT SCs based on p -type c-Si substrates under AM0 spectrum

Fig. 6, b shows the experimental results of the temperature dependence of the conversion efficiency $\eta(T)$ of the HJT SCs based on p -type c-Si substrates under AM0 (136.7 mW/cm^2). The η of the HJT SCs is defined as the ratio of the P_{\max} to the incident light power (P_{rad}), which is expressed by the following equation [20]:

$$\eta = \frac{P_{\max}}{P_{\text{rad}}} \cdot 100\% = \frac{J_{\text{sc}} V_{\text{oc}} FF}{P_{\text{rad}}} \cdot 100\%, \quad (9)$$

where $P_{\text{rad}} = 136.7 \text{ mW/cm}^2$.

Referring to Fig. 6, b , the η of the HJT SCs based on p -type c-Si exhibits a temperature dependence similar to that of the P_{\max} . The η values of HJT SCs decrease linearly from $\sim 21.5\%$ at 173 K to $\sim 13.3\%$ at 373 K. According to Ref. [27], the η of HJT SCs can be calculated using the following expression:

$$\eta_c = \eta_{\text{ref}} [1 - \beta_0 (T_c - T_{\text{ref}})], \quad (10)$$

where T_c , T_{ref} are the temperatures of the HJT SCs and the reference (room) temperature ($T_{\text{ref}} = 298 \text{ K}$), respectively; η_c , η_{ref} are the conversion efficiencies of the HJT SCs at T_c and T_{ref} ; β_0 is the temperature coefficient of η ($\eta = -0.002 \text{ K}^{-1}$ for p -type c-Si HJT SCs).

As the HJT SC temperature increases, the difference $T_c - T_{\text{ref}}$ grows resulting in a linear decrease in the η .

Summary

In this study, the effect of temperature on the J - V curves of HJT SCs based on p -type c-Si substrates were investigated under AM0 spectrum (136.7 mW/cm^2) in the temperature range from 173 to 373 K. The experimental light J - V curves of the HJT SCs exhibit an increase in a short-circuit current density with temperature, whereas the open-circuit voltage decreases linearly. Furthermore, the fill factor and shunt resistance degraded significantly with rising temperature, whereas the series resistance showed a moderate reduction. As a result, the maximum output power declined linearly with temperature, with respective temperature coefficient of $-0.2\% / \text{K}$. Despite this decline, the studied HJT SCs achieved superior specific power at room temperature.

These findings confirm that gallium-doped p -type c-Si-based HJT SCs possess a unique combination of high specific power, low temperature sensitivity, and excellent low-temperature performance. Such characteristics make HJT SCs particularly promising for power generation in small spacecraft (CubeSats) operating in the low-Earth orbit environments.

In future studies, we plan to present experimental results that evaluate the combined impact of radiation and temperature on the photovoltaic (PV) performance of the HJT SCs.



REFERENCES

1. **Hassan Q., Viktor P., Al-Musawi T.J., et al.**, The renewable energy role in the global energy transformations, *Renew. Energy Focus*. 48 (2024) 100545.
2. **Machin A., Marquez F.**, Advancements in photovoltaic cell materials: Silicon, organic and perovskite solar cells, *Materials*. 17 (5) (2024) 1165.
3. **Green M. A., Dunlop E. D., Yoshita M., et al.**, Solar cell efficiency tables (Version 64), *Prog. Photovolt.: Res. Appl.* 32 (7) (2024) 425–441.
4. **Lv X., Hu Z., Yang J., et al.**, Transmission electron microscopy study on the laser-cutting induced microdefects in silicon heterojunction solar cells, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*. 292 (15 Oct) (2025) 113792.
5. **Lin H., Yang M., Ru X., et al.**, Silicon heterojunction solar cells with up to 26.81% efficiency achieved by electrically optimized nanocrystalline silicon hole contact layers, *Nat. Energy*. 8 (8) (2023) 789–799.
6. **Joseph K. L. V., Rosana N. T. M., Kumar J. A., Samrot A. V.**, Commercial bifacial silicon solar cells – characteristics, module topology and passivation technique for high electrical output: An overview, *Results Eng.* 26 (June) (2025) 104971.
7. **Le A. H. T., Basnet R., Yan D., et al.**, Temperature-dependence performance of silicon solar cells with polysilicon passivating contacts, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*. 225 (15 June) (2021) 111020.
8. **Singh P., Singh S. N., Lal M., Husain M.**, Temperature dependence of I-V characteristics and performance parameters of silicon solar cell, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*. 92 (Dec) (2008) 1611–1616.
9. **Thirsk R., Kuipers A., Mukai C., Williams D.**, The space-flight environment: The international Space Station and beyond, *Can. Med. Assoc. J.* 180 (12) (2009) 1216–1220.
10. **Buitrago-Leiva J. N., El Khayati Ramouz M., Camps A., Ruiz-de-Azua J. A.**, Statistical analysis of LEO and GEO satellite anomalies and space radiation, *Aerosp.* 11 (11) (2024) 924.
11. **Ataboev O. K., Terukov E. I., Shelopin G. G., Kabulov R. R.**, Wet chemical treatment of monocrystalline silicon wafer surfaces, *Appl. Sol. Energy*. 57 (5) (2021) 363–369.
12. **Wolf S. D., Olibet S., Ballif C.**, Stretched-exponential α -Si:H/c-Si interface recombination decay, *Appl. Phys. Lett.* 93 (9) (2008) 032101.
13. **Kumar R., Jain P. K.**, Impact of temperature on the performance of efficient GaInP single-junction solar cells with double back surface field, *MRS Adv.* 10 (12) (2025) 1536–1544.
14. **Acharyya S., Ghosh D. K., Banerjee D., Maity S.**, Analyzing the operational versatility of advanced IBC solar cells at different temperatures and also with variation in minority carrier lifetimes, *J. Comput. Electron.* 23 (6) (2024) 1170–1194.
15. **Panaiotti I. E., Terukov E. I.**, A study of the effect of radiation on recombination loss in heterojunction solar cells based on single-crystal silicon, *Tech. Phys. Lett.* 45 (3) (2019) 193–196.
16. **Panaiotti I. E., Terukov E. I., Shakhrai I. S.**, A method for calculating operating characteristics of silicon heterojunction solar cells with arbitrary parameters of crystalline substrates, *Tech. Phys. Lett.* 46 (9) (2020) 835–837.
17. **Ataboev O. K., Utamuradova Sh. B., Panaiotti I. E., et al.**, Temperature dependence of photovoltaic performance of silicon heterojunction solar cells based on gallium- and phosphorous-doped silicon wafers, *Radiat. Phys. Chem.* 240 (March) (2026) 113407.
18. **Bludau W., Onton A., Heinke W.**, Temperature dependence of the band gap of silicon, *J. Appl. Phys.* 45 (4) (1974) 1846–1848.
19. **Haschke J., Seif J. P., Riesen Y., et al.**, The impact of silicon solar cell architecture and cell interconnection on energy yield in hot and sunny climates, *Energy Environ. Sci.* 10 (5) (2017) 1–11.
20. **Ataboev O. K., Kabulov R. R., Matchanov N. A., Egamov S. R.**, Influence of temperature on the output parameters of a photovoltaic module based on amorphous hydrogenated silicon, *Appl. Sol. Energy*. 55 (3) (2019) 159–167.
21. **Löper P., Pysch D., Richter A., et al.**, Analysis of the temperature dependence of the open-circuit voltage, *Energy Procedia*. 27 (2012) 135–142.
22. **Bernardini S., Bertoni M. I.**, Insights into the degradation of amorphous silicon passivation layer for heterojunction solar cells, *Phys. Status Solidi A*. 216 (4) (2019) 1800705.
23. **Singh P., Ravindra N. M.**, Analysis of series and shunt resistance in silicon solar cells using single and double exponential models, *Emerg. Mater. Res.* 1 (1) (2011) 33–38.

24. **Fahrenbruch A. L., Bube R. H.**, Fundamentals of solar cells. Photovoltaic solar energy conversion, Academic Press, New York, 1983. 559 p.

25. **Büyükbaş-Uluşan A., Turan R., Altındal Ş.**, On the investigation of current transport mechanisms (CTMs) of the crystalline Si solar cells utilizing current/voltage (I-V) characteristics in temperature range of 110–380 K, *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* 36 (19) (2025) 1173.

26. **Green M. A.**, General temperature dependence of solar cell performance and implications for device modelling, *Progr. Photovol. Res. Appl.* 11 (5) (2003) 333–340.

27. **Dubey S., Sarvaiya J. N., Seshadri B.**, Temperature dependent photovoltaic efficiency and its effect on PV production in the world – A review, *Energy Procedia.* 33 (2013) 311–321.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Hassan Q., Viktor P., Al-Musawi T. J., Ali B. M., Algburi S., Alzoubi H. M., Al-Jiboory A. K., Sameen A. Z., Salman H. M., Jaszczur M.** The renewable energy role in the global energy transformations // *Renewable Energy Focus.* 2024. Vol. 48. March. P. 100545.

2. **Machin A., Marquez F.** Advancements in photovoltaic cell materials: Silicon, organic and perovskite solar cells // *Materials.* 2024. Vol. 17. No. 5. P. 1165.

3. **Green M. A., Dunlop E. D., Yoshita M., Kopidakis N., Bothe K., Siefert G., Hinken D., Rauer M., Hohl-Ebinger J., Hao X.** Solar cell efficiency tables (Version 64) // *Progress in Photovoltaics: Research and Applications.* 2024. Vol. 32. No. 7. Pp. 425–441.

4. **Lv X., Hu Z., Yang J., Yu X., Jin C., Yang D.** Transmission electron microscopy study on the laser-cutting induced microdefects in silicon heterojunction solar cells // *Solar Energy Materials and Solar Cells.* 2025. Vol. 292. 15 October. P. 113792.

5. **Lin H., Yang M., Ru X., et al.** Silicon heterojunction solar cells with up to 26.81% efficiency achieved by electrically optimized nanocrystalline silicon hole contact layers // *Nature Energy.* 2023. Vol. 8. No. 8. Pp. 789–799.

6. **Joseph K. L. V., Rosana N. T. M., Kumar J. A., Samrot A. V.** Commercial bifacial silicon solar cells – characteristics, module topology and passivation technique for high electrical output: An overview // *Results in Engineering.* 2025. Vol. 26. June. P. 104971.

7. **Le A. H. T., Basnet R., Yan D., Chen W., Nandakumar N., Duttgupta S., Seif J. P., Hameiri Z.** Temperature-dependence performance of silicon solar cells with polysilicon passivating contacts // *Solar Energy Materials and Solar Cells.* 2021. Vol. 225. 15 June. P. 111020.

8. **Singh P., Singh S. N., Lal M., Husain M.** Temperature dependence of I-V characteristics and performance parameters of silicon solar cell // *Solar Energy Materials and Solar Cells.* 2008. Vol. 92. December. Pp. 1611–1616.

9. **Thirsk R., Kuipers A., Mukai C., Williams D.** The space-flight environment: The international Space Station and beyond // *Canadian Medical Association Journal.* 2009. Vol. 180. No. 12. Pp. 1216–1220.

10. **Buitrago-Leiva J. N., El Khayati Ramouz M., Camps A., Ruiz-de-Azua J. A.** Statistical analysis of LEO and GEO satellite anomalies and space radiation // *Aerospace.* 2024. Vol. 11. No. 11. P. 924.

11. **Ataboev O. K., Terukov E. I., Shelopin G. G., Kabulov R. R.** Wet chemical treatment of monocrystalline silicon wafer surfaces // *Applied Solar Energy.* 2021. Vol. 57. No. 5. Pp. 363–369.

12. **Wolf S. D., Olibet S., Ballif C.** Stretched-exponential α -Si:H/c-Si interface recombination decay // *Applied Physics Letters.* 2008. Vol. 93. No. 9. P. 032101.

13. **Kumar R., Jain P. K.** Impact of temperature on the performance of efficient GaInP single-junction solar cells with double back surface field // *MRS Advances.* 2025. Vol. 10. No. 12. Pp. 1536–1544.

14. **Acharyya S., Ghosh D. K., Banerjee D., Maity S.** Analyzing the operational versatility of advanced IBC solar cells at different temperatures and also with variation in minority carrier lifetimes // *Journal of Computational Electronics.* 2024. Vol. 23. No. 6. Pp. 1170–1194.

15. **Панайотти И. Е., Теруков Е. И.** Исследование влияния радиации на рекомбинационные потери в гетеропереходных солнечных элементах на основе поликристаллического кремния // *Письма в Журнал технической физики.* 2019. Т. 45. № 5. С. 9–12.

16. **Панайотти И. Е., Теруков Е. И., Шахрай И. С.** Метод расчета рабочих характеристик кремниевых гетеропереходных солнечных элементов с произвольными параметрами кристаллической подложки // *Письма в Журнал технической физики.* 2020. Т. 46. № 17 (173). С. 3–5.

17. **Ataboev O. K., Utamuradova Sh. B., Panaiotti I. E., Terukov E. I., Malevskiy D. A., Baranov A. I., Troshin A. V.** Temperature dependence of photovoltaic performance of silicon heterojunction solar cells based on gallium- and phosphorous-doped silicon wafers // *Radiation Physics and Chemistry*. 2026. Vol. 240. March. P. 113407.
18. **Bludau W., Onton A., Heinke W.** Temperature dependence of the band gap of silicon // *Journal of Applied Physics*. 1974. Vol. 45. No. 4. Pp. 1846–1848.
19. **Haschke J., Seif J. P., Riesen Y., et al.** The impact of silicon solar cell architecture and cell interconnection on energy yield in hot and sunny climates // *Energy and Environmental Science*. 2017. Vol. 10. No. 5. Pp. 1–11.
20. **Ataboev O. K., Kabulov R. R., Matchanov N. A., Egamov S. R.** Influence of temperature on the output parameters of a photovoltaic module based on amorphous hydrogenated silicon // *Applied Solar Energy*. 2019. Vol. 55. No. 3. Pp. 159–167.
21. **Löper P., Pysch D., Richter A., Hermle M., Janz S., Zacharias M., Glunz S. W.** Analysis of the temperature dependence of the open-circuit voltage // *Energy Procedia*. 2012. Vol. 27. Pp. 135–142.
22. **Bernardini S., Bertoni M. I.** Insights into the degradation of amorphous silicon passivation layer for heterojunction solar cells // *Physica Status Solidi A*. 2019. Vol. 216. No. 4. P. 1800705.
23. **Singh P., Ravindra N. M.** Analysis of series and shunt resistance in silicon solar cells using single and double exponential models // *Emerging Materials Research*. 2011. Vol. 1. No. 1. Pp. 33–38.
24. **Фаренбрух А., Бьюб Р.** Солнечные элементы: Теория и эксперимент. Пер. с англ. М.: Энергоатомиздат, 1987. 280 с.
25. **Büyükbaş-Uluşan A., Turan R., Altındal Ş.** On the investigation of current transport mechanisms (CTMs) of the crystalline Si solar cells utilizing current/voltage (I-V) characteristics in temperature range of 110–380 K // *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 2025. Vol. 36. No. 19. P. 1173.
26. **Green M. A.** General temperature dependence of solar cell performance and implications for device modelling // *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*. 2003. Vol. 11. No. 5. Pp. 333–340.
27. **Dubey S., Sarvaiya J. N., Seshadri B.** Temperature dependent photovoltaic efficiency and its effect on PV production in the world – A review // *Energy Procedia*. 2013. Vol. 33. Pp. 311–321.

THE AUTHORS

ATABOEV Omonboy K.

Research Institute of Semiconductor Physics and Microelectronics at the National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek.

20, Yangi Olmazor St., Tashkent, 100057, Republic of Uzbekistan
 omonboy12@mail.ru
 ORCID: 0000-0002-5226-1101

UTAMURADOVA Sharifa B.

Research Institute of Semiconductor Physics and Microelectronics at the National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek.

20, Yangi Olmazor St., Tashkent, 100057, Republic of Uzbekistan
 sh-utamuradova@yandex.com
 ORCID: 0000-0002-1718-1122

TERUKOV Evgeniy I.

Ioffe Institute, RAS

26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
 e.terukov@hevelsolar.com
 ORCID: 0000-0002-5226-1101

BARANOV Artem I.

Alferov University, RAS

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

Itiomchik@yandex.ru

ORCID: 0000-0002-5226-1101

INIYATOVA Klara Kh.

Nukus State Technical University

74, A. Dosnazarov St., Nukus, Karakalpakstan, 230100, Republic of Uzbekistan

klarainiyatova2002@gmail.com

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АТАБОЕВ Омонбой Курбанбоевич – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Научно-исследовательского института физики полупроводников и микроэлектроники при Национальном университете Узбекистана имени Мирзо Улугбека, г. Ташкент, Республика Узбекистан.

100057, Республика Узбекистан, г. Ташкент, ул. Янги Олмазор, 20.

omonboy12@mail.ru

ORCID: 0000-0002-5226-1101

УТАМУРАДОВА Шарифа Бекмурадовна – доктор физико-математических наук, профессор Научно-исследовательского института физики полупроводников и микроэлектроники при Национальном университете Узбекистана имени Мирзо Улугбека, г. Ташкент, Республика Узбекистан.

100057, Республика Узбекистан, г. Ташкент, ул. Янги Олмазор, 20.

sh-utamuradova@yandex.com

ORCID: 0000-0002-1718-1122

ТЕРУКОВ Евгений Иванович – доктор технических наук, профессор Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

e.terukov@hevelsolar.com

ORCID: 0000-0002-5226-1101

БАРАНОВ Артем Игоревич – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Академического университета имени Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

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

Itiomchik@yandex.ru

ORCID: 0000-0002-5226-1101

ИНИЯТОВА Клара Хамидуллаевна – *M. Sc.*, старший преподаватель Нукусского государственного технического университета, г. Нукус, Каракалпакстан, Республика Узбекистан.

230100, Республика Узбекистан, Каракалпакстан, г. Нукус, ул. А. Досназарова, 74

klarainiyatova2002@gmail.com

Received 17.08.2025. Approved after reviewing 05.09.2025. Accepted 19.01.2026.

Статья поступила в редакцию 17.08.2025. Одобрена после рецензирования 05.09.2025. Принята 19.01.2026.

Научная статья
УДК 621.315.61: 51-74
DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19104>

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ КАТАСТРОФ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ПРОБИВНОЙ НАПРЯЖЕННОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ

В. В. Киселевич 

Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого,
г. Гомель, Республика Беларусь

 valentinkis@list.ru

Аннотация. На основе гипотезы об аналогии физического явления пробоя и математической катастрофы сборки получено уравнение, выражающее зависимость пробивной напряженности полимерных диэлектриков от температуры окружающей среды. Определены параметры этого уравнения и построены температурные зависимости напряженности пробивного поля для полиэтилентерефталата, атактического полипропилена и полибутадиена. Показана высокая степень соответствия опубликованных экспериментальных данных и расчетных температурных зависимостей, отвечающих полученному уравнению. Установлено хорошее согласие значений характеристических температур стеклования и электрического пробоя для всех исследованных полимеров. Выдвинуто предположение о наличии взаимосвязи между кинетическими процессами стеклования и электрическим разрушением этих полимеров.

Ключевые слова: полимерный диэлектрик, электрическое разрушение, пробивная напряженность, температура стеклования, теория катастроф, катастрофа сборки

Для цитирования: Киселевич В. В. Применение теории катастроф для описания температурных зависимостей пробивной напряженности полимерных диэлектриков // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 43–61. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19104>

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.19104>

APPLICATION OF THE CATASTROPHE THEORY TO DESCRIBE TEMPERATURE DEPENDENCIES OF THE BREAKDOWN FIELD STRENGTH IN POLYMER DIELECTRICS

V. V. Kiselevich 

Gomel State Technical University named after P. O. Sukhoi, Gomel, Republic of Belarus

 valentinkis@list.ru

Abstract. An equation expressing the dependence of the breakdown field strength of polymer dielectrics on ambient temperature has been derived based on the hypothesis of an analogy between the physical phenomenon of breakdown and the mathematical cusp catastrophe. The parameters of this equation were determined, and temperature dependencies of breakdown field strength for polyethylene terephthalate, atactic polypropylene, and polybutadiene were constructed. A high degree of correlation between the published experimental data and the calculated temperature dependencies corresponding to the obtained equation was demonstrated. A good agreement between the characteristic glass transition temperatures and electrical breakdown temperatures for all polymers taken was shown. Our work puts forward a hypothesis suggesting a correlation between the kinetic processes of glass transition and electrical breakdown in these polymers.

Keywords: polymer dielectric, electrical breakdown, breakdown field strength, glass transition temperature, catastrophe theory, cusp catastrophe

For citation: Kiselevich V. V., Application of the catastrophe theory to describe temperature dependencies of the breakdown field strength in polymer dielectrics, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (1) (2026) 43–61. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19104>

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

Введение

Полимерные диэлектрики широко применяются в качестве изоляционных материалов в различных электротехнических и электронных устройствах. Надежность и долговечность работы таких устройств во многом зависят от показателей электрической прочности их изоляции. В связи с этим фундаментальные и прикладные исследования, направленные на изучение закономерностей электрического разрушения (пробоя) полимеров и поиск путей улучшения электропрочностных свойств полимерной изоляции, не теряют своей актуальности и на сегодняшний день [1 – 9].

В физике пробоя твердых диэлектриков очень важно установить характер влияния температуры на пробивную напряженность полимеров. Тщательный анализ публикаций [1 – 3, 10 – 21] позволяет заключить, что рост температуры вызывает снижение величины пробивной напряженности у большинства полимерных диэлектриков. Среди весьма разнообразных температурных зависимостей пробивной напряженности значительный исследовательский интерес представляют зависимости с выраженной переходной областью, внутри которой небольшое повышение температуры приводит к резкому падению напряженности, что выступает характерным признаком развития тепловой формы пробоя полимера [1 – 3, 10 – 14]. Критическая температура, по достижении которой наблюдается резкое падение пробивной напряженности, обычно сопоставима с температурой стеклования аморфных полимеров либо температурой плавления кристаллических полимеров [1 – 3, 12, 13, 15]. Для некоторых полимерных материалов, в частности для полиэфирсульфона [17] и поливинилиденфторида [18], эта критическая температура может быть заметно ниже температуры их стеклования.

Широкое варьирование температуры в ходе электрических испытаний значительно повышает вероятность трансформации физического механизма и формы электрического разрушения полимерных диэлектриков [7, 10, 11]. По этой причине известные аналитические соотношения, которые, как правило, базируются на учете только одного определенного физического механизма пробоя диэлектрика, не всегда обеспечивают удовлетворительное согласие теоретических кривых пробивной напряженности, построенных по данным соотношениям, и экспериментальных точек, снятых в достаточно широких температурных границах, охватывающих переходную область резкого падения напряженности. Кроме того, само наличие переходной области на температурных зависимостях пробивной напряженности зачастую приводит к математическому усложнению и, как следствие, к серьезному обесцениванию практической значимости уравнений, моделирующих эти зависимости.

Альтернативный способ математического описания аномально резкого поведения различных физических величин основан на применении теории катастроф [22 – 24]. Эта (сравнительно новая) математическая теория обеспечивает получение несложных уравнений, которые с довольно высокой точностью воспроизводят экспериментальные данные, отражающие скачкообразный отклик исследуемой величины на плавное изменение внешнего воздействия. Экспоненциально быстрое уменьшение пробивной напряженности полимерных диэлектриков при плавном увеличении температуры в переходной области свидетельствует о принципиальной возможности использования указанной теории для описания пробойных явлений в этих материалах.

К числу последних публикаций, посвященных моделированию процессов разрушения полимеров с привлечением методов теории катастроф, относятся работы [25 – 27]. В статье [25] математическая модель накопления повреждений в полимерных композиционных материалах разработана на основе уравнения катастрофы складки. Автором работы [26] установлено, что поверхность, характеризующая температурные состояния полимерного диэлектрика, подвергнутого действию сильного электрического поля, эквивалентна поверхности катастрофы сборки. В статье [27] пробой пленок полиметилметакрилата при их облучении пучком низкоэнергетических электронов объяснялся наступлением зарядовой катастрофы, тождественной математической катастрофе сборки. Исходя из сказанного, можно заключить, что изучение закономерностей электрического разрушения полимеров в русле теории катастроф представляется перспективным направлением исследований в физике пробоя диэлектриков.

Цель настоящей работы – уточнить характер влияния температуры на величину напряженности пробоя полимерных диэлектриков.

Для достижения поставленной цели было принято решение воспользоваться теорией катастроф. При этом встала первостепенная задача: вывести с позиций данной теории уравнение температурной зависимости пробивной напряженности полимерных диэлектриков и найти параметры этого уравнения для широко применяемых полимеров: полиэтилентерефталата (ПЭТФ), атактического полипропилена (ППА) и полибутадиена (ПБД).

Постановка задачи

Температура T среды, окружающей исследуемый полимерный диэлектрик, оказывает значительное влияние на величину его пробивной напряженности E_{br} . Характер поведения E_{br} во многом зависит от температурного диапазона, в котором проводится анализ кривой $E_{br} = f(T)$. Типовые температурные зависимости $E_{br} = f(T)$, наиболее часто встречаемые в работах по исследованию электропрочностных свойств полимерных диэлектриков, приведены на рис. 1, где приняты следующие обозначения: T'_{br} , T''_{br} – нижняя и верхняя температурные границы переходной области; T_c , E_c – температура и пробивная напряженность, отвечающие точке «с» – точке перегиба на кривой $E_{br} = f(T)$.

Из анализа кривой 1 на рис. 1, а следует, что в областях низких (I) и высоких (III) температур плавное повышение T вызывает плавное снижение E_{br} , тогда как в пределах переходной области II незначительный рост температуры приводит к резкому падению пробивной напряженности. Относительное изменение E_{br} на участках I и III чаще всего

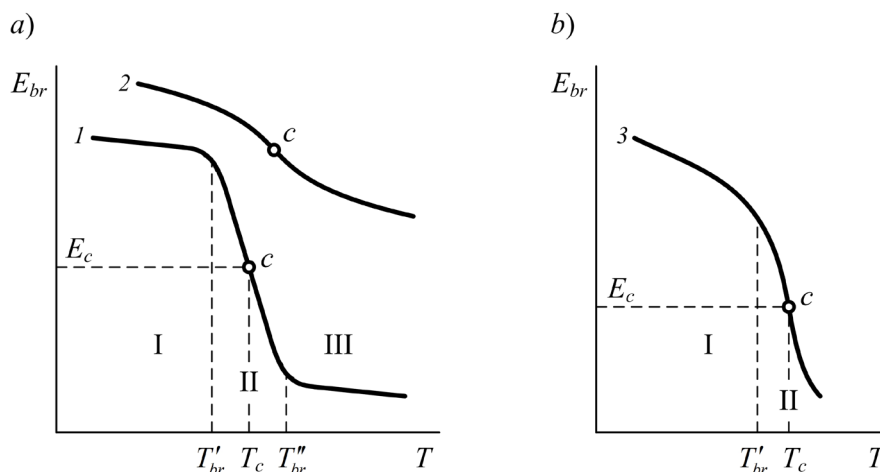


Рис. 1. Характерные температурные зависимости пробивной напряженности полимерных диэлектриков E_{br} .

Представлены кривые резкого (1, 3) и плавного (2) снижения E_{br} ; c – точка перегиба;

I, II и III – низкотемпературная, переходная и высокотемпературная области;

E_c , T_c – значения пробивной напряженности и температуры в точке перегиба c ;

T'_{br} , T''_{br} – нижняя и верхняя границы переходной области

не превышает 20%, а в некоторых случаях эти участки и вовсе вырождаются в атермическое плато [1, 2, 11, 13].

Кривая 2 на рис. 1, *a* соответствует случаю, когда границы между областями I, II и III размыты, а малое повышение T приводит к небольшому уменьшению E_{br} во всем диапазоне изменения температуры.

Для кривой 3 на рис. 1, *b* характерна размытость температурных границ, определяющих область резкого падения E_{br} . Поэтому на кривых такого типа выделяют только две области: низкотемпературную I и переходную II. В области I на рис. 1, *b* пробивная напряженность при плавном повышении температуры снижается довольно быстро и заметно сильнее, чем в такой же области на рис. 1, *a*. Дальнейший плавный подъем температуры на участке II (рис. 1, *b*) вызывает еще более резкое падение E_{br} .

Сложный характер температурной эволюции пробивной напряженности полимеров, вытекающий из анализа рис. 1, во многом обусловлен сложностью и разнообразием их строения. Структурные изменения полимерных диэлектриков в переходной области, вызванные различными вторичными явлениями (например, размягчением/стеклованием, изменением степени кристалличности, окислением и т. п.), приводят к существенному искажению фактического хода экспериментальной зависимости $E_{br} = f(T)$ [28] и, как следствие, затрудняют однозначную интерпретацию результатов эксперимента. К тому же искажение хода зависимости $E_{br} = f(T)$ может означать смену физического механизма пробоя диэлектрика [10, 28]. По этой причине для описания поведения кривых $E_{br} = f(T)$ типа 1 – 3 либо их отдельных участков (см. рис. 1) нередко применяют разные уравнения.

Рассмотрим два типа уравнений $E_{br} = f(T)$, основанных на разных физических механизмах электрического разрушения полимеров.

Соотношение, удовлетворительно описывающее опытные зависимости $E_{br} = f(T)$, которые подчиняются закону, близкому к линейному, имеет вид [10]:

$$E_{br} = \frac{k_B T}{e l_0 q_\xi} \ln \left(\frac{e l_0 q_\xi t_0 w_E}{k_B T} \right) + \phi(q_\xi, W^+), \quad (1)$$

где k_B , Дж/К, – постоянная Больцмана; T , К, – температура; e , Кл, – заряд электрона; l_0 , м, – активационная длина; q_ξ – коэффициент локального усиления электрического поля вблизи неоднородностей, присутствующих на электродах и в объеме полимера; t_0 , с, – параметр, имеющий смысл периода колебаний атомов в твердых телах; w_E , В/(м·с), – скорость линейного возрастания напряженности электрического поля, приложенного к образцу диэлектрика; $\phi(q_\xi, W^+)$, В/м, – функция коэффициента усиления q_ξ и энергии диссоциации связей W^+ , Дж, в молекулярных ионах.

Аналитическое уравнение (1), полученное с позиций ионизационной теории электрического разрушения полимеров [29, 30], не только позволяет прогнозировать вероятный ход температурных кривых пробивной напряженности, но и обеспечивает проведение количественной оценки важных и физически осмысленных параметров, характеризующих кинетические закономерности электрического пробоя: коэффициента усиления поля и энергии диссоциации связей в макроионах. Справедливость формулы (1) успешно подтверждена для полиэтилентерефталата, полипропилена, поликарбоната и ряда других полимерных диэлектриков [10].

Выражение для описания зависимостей $E_{br} = f(T)$, ход которых отличен от линейного, предложено авторами статьи [14] в следующей форме:

$$E_{br} = \sqrt{\frac{8\lambda}{h^2 \gamma(T) k_\gamma}} \cdot \exp \left(-\frac{z r_0 E_{br}}{4 k_B T} \right) \phi_\lambda, \quad (2)$$

где λ , Вт/(м·К), – теплопроводность диэлектрика толщиной h , м; $\gamma(T)$, См/м, и k_γ , К⁻¹, – удельная электропроводность диэлектрика и ее температурный коэффициент; z , Кл, – заряд свободного иона; r_0 , м, – расстояние между анионом и катионом в ионной паре при напряженности поля $E = 0$; ϕ_λ – функция, характеризующая влияние условий теплоотвода и геометрических параметров образца диэлектрика на величину его пробивной напряженности.

Формула (2) выведена на основе представлений теории теплового пробоя с учетом характера температурно-полевой зависимости ионной проводимости полимерного диэлектрика. Экспериментальная проверка этой формулы дала удовлетворительные результаты для поливинилиденфторида, которые, однако, были ограничены областью высоких температур [14].

Таким образом, очевидно, что получение аналитического выражения, адекватно описывающего температурную зависимость пробивной напряженности полимеров в относительно широком интервале температур, охватывающем переходную область, есть актуальная задача. Для ее решения обратимся к теории катастроф [22 – 24].

Теоретический анализ поведения диэлектрика в сильном электрическом поле

Исследование влияния температуры на закономерности поведения полимерного диэлектрика в электрическом поле будем проводить, придерживаясь алгоритма действий, изложенного в работе [31].

Прежде всего зададим физические величины, характеризующие состояние и электропрочностные свойства диэлектрика. В качестве физического параметра состояния (зависимой переменной) возьмем напряженность E_{br} электрического поля в момент пробоя диэлектрика, а в роли физического параметра управления (независимой переменной) – температуру окружающей среды T , при которой выполняется измерение напряженности E_{br} . Скорость w_E возрастания средней напряженности E электрического поля, прикладываемого к диэлектрику при различных фиксированных значениях температуры, примем постоянной:

$$w_E = \partial E / \partial t = \text{const},$$

где t – время.

Далее необходимо определить характерные признаки [22], указывающие на возможную катастрофу в полимерном диэлектрике, подвергнутом действию температуры и сильного электрического поля.

Первым признаком вероятной катастрофы будем считать, как и ранее [31], факт существования критической концентрации носителей заряда [5, 30]:

$$N_c \approx 10^{18} - 10^{19} \text{ см}^{-3},$$

по достижении которой происходит пробой полимерного диэлектрика.

Вторым признаком катастрофы служит резкое уменьшение пробивной напряженности E_{br} при малом повышении температуры T , наблюдаемое в переходной области $[T'_{br}; T''_{br}]$ на зависимости $E_{br} = f(T)$ многих полимеров [1 – 3, 11 – 13, 21].

Третьим признаком катастрофы выступает большая дисперсия опытных значений пробивной напряженности, возникающая при измерении E_{br} в температурном интервале $[T'_{br}; T''_{br}]$. Действительно, хорошо известно [1 – 3, 11, 12, 19, 21], что проведение электрических испытаний полимеров на пробой сопровождается существенным разбросом в совокупности значений E_{br} , определяемых даже для одинаковых образцов, находящихся в одних и тех же условиях. Необратимые изменения структуры полимерного диэлектрика в переходной области, как было отмечено выше, вызывают искажение хода экспериментальной зависимости $E_{br} = f(T)$. Вследствие этого для некоторых полимеров, испытываемых при $T \in [T'_{br}; T''_{br}]$, разброс значений E_{br} становится еще более существенным. В частности, для полиэтилена [11], бутадиев-стирольного сополимера [12] и полиизобутилена [21] дисперсия величин напряженности E_{br} в характерных точках переходной области превышала дисперсию значений E_{br} , измеренных при температурах вне этой области, в среднем в 2 – 7 раз.

Событие, эквивалентное наступлению математической катастрофы, соотнесем с моментом накопления критической концентрации зарядов N_c в полимерном диэлектрике, испытываемом при температуре, в окрестности которой имеет место резкое падение его пробивной напряженности.

Следующий шаг состоит в выборе аналитической функции, описывающей состояние полимерного диэлектрика. Математическое описание физических систем в теории катастроф выполняют посредством потенциальных функций (функций катастроф) типа $\Phi(x, A_i)$, где x – переменная, характеризующая состояние системы; A_i – i -й управляющий параметр, от которого зависит переменная x .

Примем к рассмотрению функцию Φ катастрофы сборки, позволяющую моделировать как плавное, так и резкое изменение состояния физической системы при малом изменении управляющего параметра. Стандартное уравнение этой функции имеет вид [22]:

$$\Phi(x; A_2, A_1) = x^4/4 + A_2x^2/2 + A_1x, \quad (3)$$

где A_1, A_2 – параметры управления, варьирование которых приводит к непрерывному либо скачкообразному (катастрофическому) изменению переменной состояния x .

В нашем случае математическим переменным x и A_1 будут соответствовать физические величины E_{br} и T . Для подтверждения этого соответствия достаточно проанализировать пропорциональность $x^3 \sim -A_1$, вытекающую из уравнения (3) при $A_2 = 0$. Она подразумевает уменьшение переменной x при увеличении параметра A_1 , что качественно согласуется с поведением пробивной напряженности E_{br} при росте температуры T (см. рис. 1).

Теперь необходимо идентифицировать множитель A_2 с конкретным физическим параметром. Из публикаций по теории катастроф известно (см. работы [22 – 24]), что при увеличении параметра A_2 ход зависимости $x(A_1)$ становится более плавным. Одновременно с этим известен факт увеличения пологости температурной зависимости $E_{br} = f(T)$ полимеров при повышении скорости w_E возрастания средней напряженности E приложенного электрического поля [10].

В свете этих закономерностей, в роли физической величины, отвечающей математическому множителю A_2 , уместно принять параметр $w = f(w_E)$, пропорциональный скорости подъема напряженности w_E . Здесь необходимо отметить, что задача нахождения точного вида функции $w = f(w_E)$ нуждается в дополнительном исследовании, поскольку результаты экспериментальных данных, относящихся к поведению скоростной зависимости $E_{br} = f(w_E)$ полимеров, далеко не всегда однозначны [6, 7, 17, 18]. Поэтому далее рассмотрим только общие закономерности влияния скоростного параметра w на характер изменения температурной зависимости $E_{br} = f(T)$.

Математические параметры x, A_1 и A_2 , входящие в уравнение (3), являются безразмерными. Для установления взаимосвязи между параметрами x, A_1, A_2 и соответствующими им размерными аналогами x', A'_1, A'_2 используют следующие соотношения [22]:

$$x = x'/x_D - 1; A_1 = A'_1/A_{D(1)} - 1; A_2 = A'_2/A_{D(2)} - 1, \quad (4)$$

где x' – физическая переменная состояния; A'_1, A'_2 – физические параметры управления; $x_D, A_{D(1)}$ и $A_{D(2)}$ – критические параметры функции катастрофы, под которыми подразумевают значения величин x', A'_1 и A'_2 в физической критической точке, отождествляемой с математической точкой D . В случае катастрофы сборки эта точка представляет собой трижды вырожденную критическую точку D_3 , в которой первые три производные потенциальной функции Φ по переменной состояния x равны нулю [22]:

$$\partial\Phi/\partial x = \partial^2\Phi/\partial x^2 = \partial^3\Phi/\partial x^3 = 0.$$

Чтобы воспользоваться соотношениями (4), следует вначале условиться о том, какую характеристическую точку на температурной зависимости $E_{br} = f(T)$ считать физической критической точкой. В качестве такой точки примем точку перегиба c на кривой $E_{br} = f(T)$ (см. рис. 1), в окрестности которой скорость снижения пробивной напряженности E_{br} при повышении температуры T максимальна.

Физические параметры E_{br}, T, w , отнесенные к критической точке c , запишем в виде

$$E_{br} = E_c, T = T_c, w = w_c.$$

Затем, действуя согласно алгоритму, принятому в теории катастроф [22], поставим в соответствие физической критической точке c математическую точку D_3 . Тогда критические физические параметры E_c, T_c, w_c станут равносильными критическим параметрам функции катастрофы:

$$E_c \equiv E_D, T_c \equiv T_D, w_c \equiv w_D.$$



Теперь можно обратиться к соотношениям (4) и привести физические величины E_{br} , T и w к безразмерному виду:

$$F_{br} = (E_{br}/E_D) - 1; \Theta = (T/T_D) - 1; A_w = (w/w_D) - 1, \quad (5)$$

где F_{br} – безразмерная напряженность электрического поля при пробое (математическая переменная состояния); Θ – безразмерная температура (первый математический управляющий параметр); A_w – безразмерная величина, пропорциональная скорости возрастания средней напряженности поля (второй математический управляющий параметр).

Далее, полагая $x = F_{br}$, $A_1 = a_T \Theta$ и $A_2 = A_w$, из уравнения (3) получим выражение для функции катастрофы сборки, отражающее влияние температуры на пробивную напряженность полимерных диэлектриков:

$$\Phi(F_{br}; A_w, \Theta) = \frac{1}{4} F_{br}^4 + \frac{1}{2} A_w F_{br}^2 + a_T \Theta F_{br}, \quad (6)$$

где a_T – коэффициент изменения масштаба по шкале температур.

В основе анализа функций катастроф лежит исследование особенностей их поведения в окрестности критических точек при изменении управляющих параметров [22 – 24]. Положение критических точек находят путем решения уравнений вида

$$\partial^n \Phi / \partial x^n = 0,$$

где n – степень производной, $n \in [1, k + 1]$ (k – число управляющих параметров).

Тогда, учитывая, что в случае катастрофы сборки $k = 2$, запишем уравнения, определяющие положение критических точек ее функции:

$$\partial \Phi / \partial F_{br} = F_{br}^3 + A_w F_{br} + a_T \Theta = 0; \quad (7)$$

$$\partial^2 \Phi / \partial F_{br}^2 = 3F_{br}^2 + A_w = 0; \quad (8)$$

$$\partial^3 \Phi / \partial F_{br}^3 = 6F_{br} = 0. \quad (9)$$

Невырожденные критические точки (точки минимума и максимума), в которых равна нулю только первая производная от функции Φ по переменной F_{br} , удовлетворяют уравнению (7). В дважды вырожденных критических точках (точках перегиба функции Φ) одновременно выполняются равенства (7) и (8). Тривжды вырожденная критическая точка D_3 , в которой, как было указано выше, первые три производные функции Φ обращаются в нуль, удовлетворяет условиям (7) – (9).

Геометрия катастрофы сборки

Геометрическое место критических точек, отвечающих уравнению (7), в трехмерном пространстве F_{br}, A_w, Θ образует равновесную поверхность катастрофы сборки (рис. 2), которая состоит из верхнего и нижнего листов с расположенной между ними складкой.

Границы складки на поверхности катастрофы сборки образованы скрученной кубической (далее бифуркационной) кривой β , задаваемой параметрическим соотношением

$$(F_{br}, A_w, \Theta) = (F_{br}, -3F_{br}^2, 2F_{br}^3/a_T). \quad (10)$$

Проекция бифуркационной кривой β на плоскость A_w, Θ управляющих параметров представляет собой фигуру в виде клина с острием в точке сборки D_3 (см. рис. 2, а). Положение точек этой проекции определяется следующим уравнением, вытекающим из уравнений (7), (8):

$$27(a_T \Theta)^2 + 4A_w^3 = 0. \quad (11)$$

Уравнение (11) устанавливает взаимосвязь между значениями A_w и Θ , параметризующими функции Φ с дважды вырожденными критическими точками.

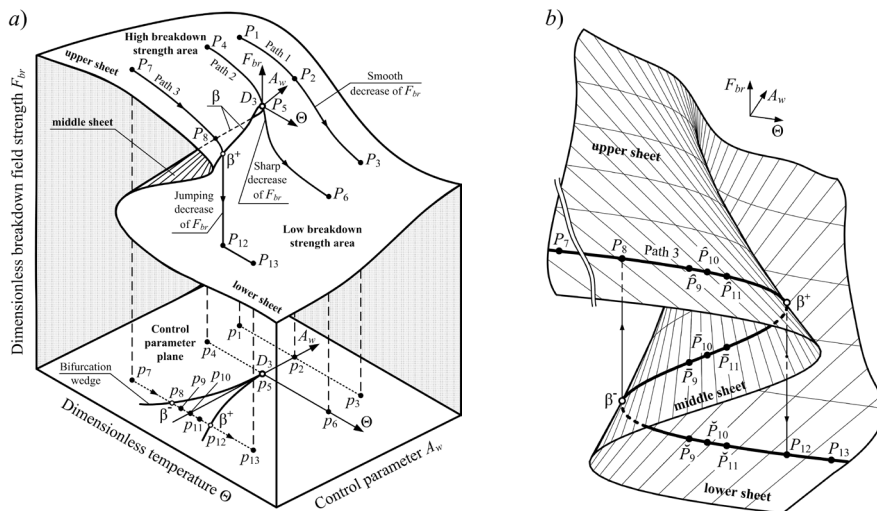


Рис. 2. Геометрия катастрофы сборки: *a* – поверхность функции катастрофы $\Phi(F_{br}, A_w, \Theta)$; *b* – область складки на этой поверхности.

Верхний и нижний листы поверхности характеризуют устойчивые состояния диэлектрика с высокой и низкой напряженностью пробивного поля, а средний лист – множество неустойчивых состояний функции Φ , не имеющее места в действительности; P_i, p_i – точки, лежащие в направлении путей 1 – 3 на поверхности сборки и в плоскости управляющих параметров; l – номер точки; β^-, β^+ – точки левой и правой ветвей бифуркационной кривой β , в которых осуществляется переход соответственно на верхний и нижний листы поверхности сборки; D_3 – точка сборки

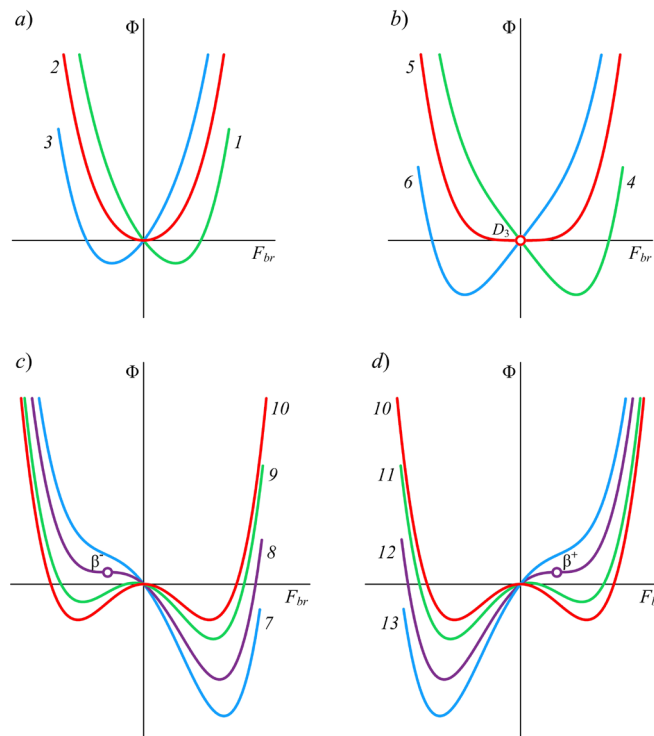


Рис. 3. Профили функции катастрофы сборки Φ для различных значений управляющих параметров. Номера профилей соответствуют номерам l характерных точек равновесной поверхности сборки.

Минимумы и максимумы функции Φ определяют устойчивые и неустойчивые состояния равновесия системы; β^-, β^+ – дважды вырожденные критические точки (точки перегиба функции Φ), отвечающие левой и правой границам бифуркационной кривой (см. рис. 2); D_3 – трижды вырожденная критическая точка (точка сборки)

Отдельные характерные точки поверхности сборки и проекции этих точек на плоскость $A_w \Theta$ обозначены на рис. 2 соответственно через P_l и p_l , где l – порядковый номер точки.

Профили $\Phi(F_{br})$, отражающие качественное поведение функции $\Phi(F_{br}; A_w, \Theta)$ в этих точках, изображены на рис. 3; номера профилей, обозначенные курсивом, идентичны номерам точек P_l и p_l .

На профилях *1* – *4*, *6*, *7* и *13* функций Φ , параметризуемых точками p_l , расположенными снаружи бифуркационного клина, присутствует лишь одна критическая точка – точка минимума. Профили *9* – *11*, построенные для точек p_l , размещенных внутри этого клина, имеют три экстремума: два минимума и расположенный между ними максимум. Профили *8* и *12*, отвечающие точкам левой (p_8) и правой (p_{12}) ветвей клина, обладают двумя критическими точками: точкой минимума и дважды вырожденной точкой перегиба. Профилю *5*, характеризующему функцию Φ с трижды вырожденной критической точкой, принадлежит только пологий (вырожденный) минимум, находящийся в начале координат.

Наличие складки на поверхности сборки приводит к тому, что каждой точке p_l , лежащей на плоскости $A_w \Theta$ внутри бифуркационного клина, в пространстве $F_{br} A_w \Theta$ соответствуют три точки (см. рис. 2, *b*):

точка \hat{P}_l^j верхнего листа, образованного правосторонними минимумами функции Φ ;

точка \hat{P}_l^j среднего листа, сформированного максимумами функции Φ ;

точка \hat{P}_l^j нижнего листа, образованного левосторонними минимумами функции Φ .

Точки минимума на профилях $\Phi(F_{br})$ (рис. 3) отвечают устойчивым состояниям равновесия, а точки максимума и перегиба – неустойчивым. В силу этого значения переменной состояния F_{br} в точках верхнего и нижнего листов поверхности сборки формируют множество устойчивых состояний диэлектрика, а значения F_{br} в точках среднего листа – множество неустойчивых состояний. При этом верхнему листу поверхности сборки отвечают состояния диэлектрика с высокой пробивной напряженностью F_{br} , а нижнему листу – с низкой величиной F_{br} ; неустойчивые состояния среднего листа этой поверхности не имеют места в действительности.

Каждая из точек, образующих поверхность сборки, характеризует определенное состояние диэлектрика при строго заданных значениях управляющих параметров A_w и Θ . Переходы между этими состояниями, сопровождаемые изменением пробивной напряженности F_{br} диэлектрика, осуществляются посредством варьирования A_w и Θ . В настоящей работе мы сосредоточимся на исследовании влияния температуры Θ на величину F_{br} .

С этой целью рассмотрим три характерных направления (пути 1 – 3 на рис. 2), по которым может происходить изменение напряженности F_{br} при одинаковом изменении температуры Θ и разных фиксированных значениях безразмерного параметра скорости A_w .

Путь 1. $A_{w(1)} = \text{const} > 0$, Θ возрастает.

Плавное повышение температуры диэлектрика, соответствующее переходу от точки p_1 к точке p_3 в плоскости $A_w \Theta$, приводит к плавному уменьшению пробивной напряженности F_{br} , эквивалентному непрерывному переходу из точки P_1 на верхнем листе в точку P_3 на нижнем листе поверхности сборки.

Путь 2. $A_{w(2)} = \text{const} = 0$, Θ возрастает.

Переход $P_4 \rightarrow P_6$ с верхнего на нижний лист поверхности сборки, наблюдаемый при повышении температуры от точки p_4 до точки p_6 , также является непрерывным. Однако, поскольку $A_{w(2)} < A_{w(1)}$, переход $P_4 \rightarrow P_6$ протекает более резко, чем переход $P_1 \rightarrow P_3$ для пути 1, а следовательно, и пробивная напряженность диэлектрика снижается более стремительно при условии $A_{w(2)} = 0$, чем в случае $A_{w(1)} > 0$. Такой характер трансформации хода теоретической зависимости $F_{br} = f(\Theta)$ при уменьшении безразмерного параметра A_w находится в согласии с упоминавшейся выше закономерностью [10] усиления пологости температурной зависимости пробивной напряженности полимеров при возрастании скорости w_E .

Путь 3. $A_{w(3)} = \text{const} < 0$, Θ возрастает.

Кривая, моделирующая поведение пробивной напряженности F_{br} при плавном увеличении температуры Θ в направлении $p_7 \rightarrow p_{13}$, имеет три характерных участка: I, II и III (см. рис. 2, *a, b*).

I. Плавное снижение F_{br} вдоль верхнего листа поверхности сборки при переходе $P_7 \rightarrow \beta^+$, вызванном постепенным увеличением Θ от точки p_7 до точки $p_{12} \equiv \beta^+$ в плоскости управления $A_w \Theta$.

II. Скачкообразное падение напряженности F_{br} при уходе с области складки в точке β^+ , эквивалентное прыжку $\beta^+ \rightarrow P_{12}$ с верхнего на нижний лист поверхности сборки.

III. Плавное снижение F_{br} вдоль нижнего листа поверхности сборки при переходе $P_{12} \rightarrow P_{13}$, вызванном равномерным повышением Θ от точки p_{12} до точки p_{13} в плоскости управления $A_w \Theta$.

Обращение путей 1 – 3. Обращение путей 1 и 2 в плоскости $A_w \Theta$ приводит к их обращению в пространстве $F_{br} A_w \Theta$. Благодаря этому увеличение F_{br} при обратных переходах $P_3 \rightarrow P_1$ и $P_6 \rightarrow P_4$ имеет зеркальный характер относительно снижения F_{br} в случае соответствующих прямых переходов $P_1 \rightarrow P_3$ и $P_4 \rightarrow P_6$.

При обращении пути 3 в плоскости $A_w \Theta$, его обращения в пространстве $F_{br} A_w \Theta$ не происходит вследствие гистерезиса переменной состояния F_{br} в области складки на поверхности сборки.

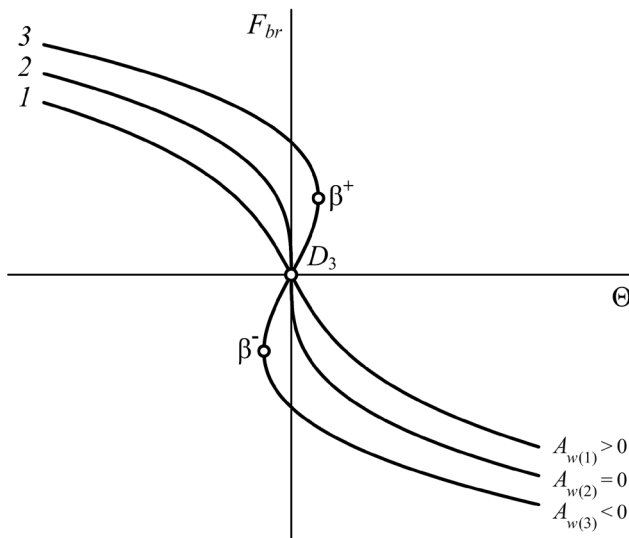


Рис. 4. Температурные зависимости безразмерной пробивной напряженности F_{br} для характерных значений управляющего параметра A_w .

Показаны кривые, моделирующие плавный (1), резкий (2) и скачкообразный (3) варианты снижения напряженности F_{br} при плавном повышении температуры Θ в направлении путей 1, 2 и 3 (см. рис. 2)

$F_{br} = f(\Theta)$, построенные для путей 1 – 3 по уравнению (7), представлены на рис. 4. Характер изменения кривых 1 – 3 на этом рисунке полностью согласуется с рассмотренными выше закономерностями поведения F_{br} при варьировании Θ .

Выражения для пробивной напряженности полимеров

Для получения зависимости $E_{br} = f(T)$, выраженной в размерных величинах, подставим соотношения (5) в уравнение (7) и после выполнения необходимых преобразований запишем искомое уравнение температурной зависимости пробивной напряженности полимерных диэлектриков:

$$E_{br} = E_D \left[1 - \sqrt[3]{a_T (T/T_D - 1) + A_w (E_{br}/E_D - 1)} \right]. \quad (12)$$

Совместное решение уравнений (7), (8) позволяет определить значения напряженности пробоя и температуры диэлектрика в точках бифуркационной кривой β :

$$F_{\beta}^{\mp} = \mp (-A_w/3)^{1/2}; \quad \Theta_{\beta}^{\mp} = \mp \frac{2(-A_w/3)^{3/2}}{a_T}, \quad (13)$$

где знаки минус и плюс отвечают левой и правой границам β , лежащим на нижнем и верхнем листах поверхности катастрофы сборки.

Наличие гистерезиса вытекает из принципа максимального промедления [22, 23], согласно которому скачкообразное изменение переменной состояния происходит только при покидании области складки.

Действительно, в отличие от прямого пути $7 \rightarrow 13$, на котором вход и выход из области складки осуществляется в точках P_8 и β^+ , при движении в обратном направлении $13 \rightarrow 7$ система входит в область складки в точке P_{12} , а покидает ее в точке β^- (см. рис. 2, б). Поэтому перемещение от точки p_{13} к точке $p_8 \equiv \beta^-$ на плоскости $A_w \Theta$ вызывает плавное повышение пробивной напряженности, а скачкообразный подъем F_{br} , эквивалентный прыжку с нижнего на верхний лист поверхности сборки, происходит в момент перехода через точку β^- . Дальнейшее равномерное уменьшение Θ после прыжка $\beta^- \rightarrow P_8$ снова приводит к плавному увеличению F_{br} .

Температурные зависимости безразмерной пробивной напряженности

Учитывая, что, согласно пересчетным соотношениям (4), безразмерные параметры F_{β}^{\mp} и Θ_{β}^{\mp} представимы в виде

$$F_{\beta}^{\mp} = (E_{\beta}^{\mp}/E_D) - 1; \Theta_{\beta}^{\mp} = (T_{\beta}^{\mp}/T_D) - 1, \quad (14)$$

из выражений (5), (13) и (14) найдем размерные значения этих параметров:

$$E_{\beta}^{\mp} = E_D \left(1 \mp \sqrt{\frac{1-w/w_D}{3}} \right); \quad (15)$$

$$T_{\beta}^{\mp} = T_D \left\{ 1 \mp \frac{2[(1-w/w_D)/3]^{3/2}}{a_T} \right\}. \quad (16)$$

Обсуждение результатов

Сравнение теории с экспериментом. Выполним проверку применимости уравнения (12) для описания температурного поведения пробивной напряженности полимеров. С этой целью воспользуемся экспериментальными данными по исследованию зависимостей $E_{br} = f(T)$ для ПЭТФ [10], ППА [11] и ПБД [12]. Параметры уравнения (12), найденные при обработке опытных кривых $E_{br} = f(T)$ в температурном интервале $[T'; T'']$ (T' и T'' – нижняя и верхняя границы интервала), представлены в табл. 1. Также здесь приведены значения температуры стеклования T_g и плотности энергии когезии e_{coh} указанных полимеров [12, 32, 33].

Параметры E_{β}^{\mp} и T_{β}^{\mp} в точках β^- и β^+ , определяющих границы области резкого падения пробивной напряженности, можно найти только для случая $A_w < 0$. Среди исследуемых полимеров этому условию отвечает ПБД с $A_w = -0,147 < 0$. Тогда, используя формулы (15) и (16), вычислим значения граничных параметров T_{β}^{\mp} и E_{β}^{\mp} для ПБД:

$$T_{\beta}^{-} = 176 \text{ К}, T_{\beta}^{+} = 197 \text{ К}, E_{\beta}^{-} = 362 \text{ МВ/м}, E_{\beta}^{+} = 569 \text{ МВ/м}.$$

В качестве примера на рис. 5 представлены графики зависимости пробивной напряженности от температуры для полиэтилентерефталата (кривая 1) и атактического полипропилена (кривая 2). Видно, что сплошные кривые 1 и 2, построенные по уравнению (12), хорошо ложатся на обозначенные символами экспериментальные данные [10, 11].

Таблица 1

Значения экспериментальных параметров для трех полимерных диэлектриков

Полимер	$[T'; T'']$, К	Значение параметра уравнения (12)				T_g , К	e_{coh} , МДж/м ³
		a_T	A_w	E_D , МВ/м	T_D , К		
ПЭТФ	[295; 383]	0,057	0,022	536	334	340 [32]	396 [33]
ППА	[205; 327]	2,364	0,156	411	260	262 [32]	282 [33]
ПБД	[164; 296]	0,392	-0,147	466	187	180 [12]	284 [33]

Обозначения: T_g – температура стеклования, e_{coh} – плотность энергии когезии. Примечание. Параметры уравнения (12) найдены при обработке опытных кривых $E_{br} = f(T)$ в температурном интервале $[T'; T'']$.

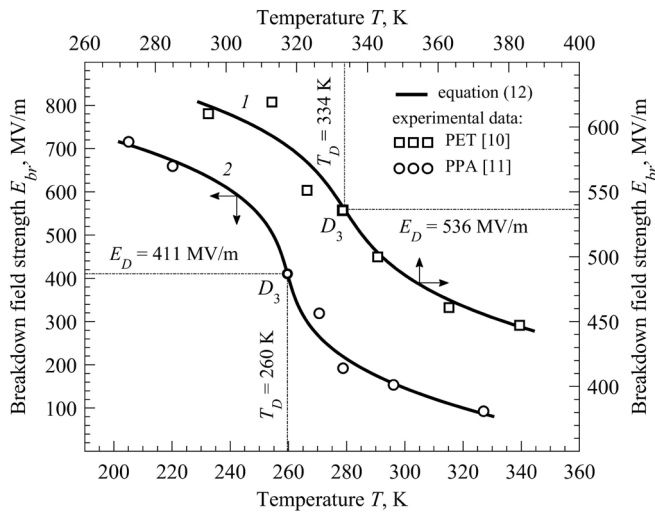


Рис. 5. Сравнение экспериментальных (символы) и теоретических (линии) температурных зависимостей пробивной напряженности ПЭТФ (РЕТ) (кривая 1) и ППА (РРА) (кривая 2); E_D , T_D – значения напряженности пробоя и температуры в характеристической точке D_3

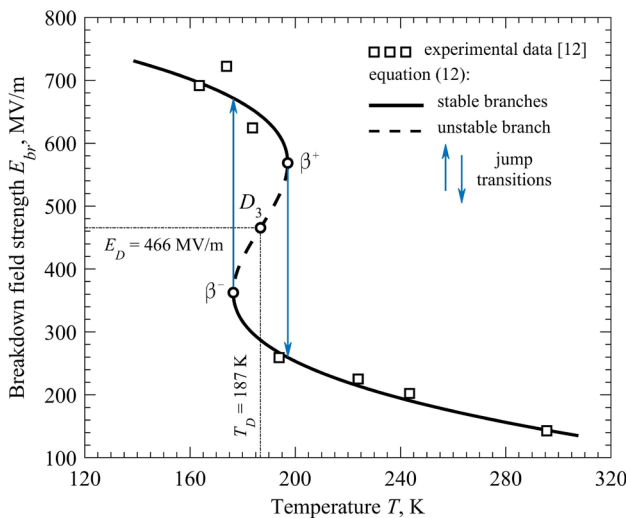


Рис. 6. Графики экспериментальной [12] (символы) и аппроксимирующей (линии) температурных зависимостей пробивной напряженности ПБД. Аппроксимирующая кривая включает стабильные и неустойчивую ветви (сплошные и пунктирная линии). Вертикальными стрелками показаны гипотетические скачкообразные переходы между состояниями ПБД с высокой и низкой напряженностью пробивного поля; E_D , T_D – значения напряженности и температуры в характеристической точке D_3

Вид зависимостей 1 и 2 является типичным для случая $A_w > 0$, когда плавное повышение температуры вызывает плавное снижение значения пробивной напряженности, причем максимальная скорость этого снижения ожидаемо достигается при характеристической температуре T_D .

Пробивная напряженность E_{br} полибутадиена (рис. 6) плавно снижается в интервале от 194 до 296 К, а в окрестности критической температуры $T_D = 187$ К небольшое повышение T приводит к резкому снижению E_{br} . Действительно, при небольшой ширине переходной области

$$\Delta_T = T_\beta^+ - T_\beta^- = 21 \text{ К}$$

скачкообразное падение напряженности E_{br} , прогнозируемое теорией катастроф, составляет для полибутадиена величину

$$\Delta_E = E_\beta^+ - E_\beta^- = 207 \text{ МВ/м.}$$

Кривая $E_{br} = f(T)$, моделирующая температурное поведение пробивной напряженности ПБД, состоит из трех ветвей. Верхняя и нижняя ветви (сплошные линии на рис. 6) характеризуют устойчивые состояния диэлектрика с высокой и низкой пробивной напряженностью, соответственно. Средняя ветвь (штриховая линия) отвечает неустойчивым состояниям диэлектрика, которые не имеют места в действительности, поскольку повышение T на этой ветви предполагает рост E_{br} , что идет вразрез с реальным изменением напряженности пробоя ПБД. Вертикальные линии со стрелками на рис. 6 обозначают гипотетические скачкообразные переходы между состояниями ПБД с высоким и низким значениями величины E_{br} . Выполненные построения свидетельствуют о достаточно хорошей корреляции экспериментальных точек [12] и теоретической кривой, удовлетворяющей уравнению (12).

Здесь важно подчеркнуть, что большинство экспериментальных кривых $E_{br} = f(T)$, приводимых в публикациях по исследованию электропрочностных характеристик полимеров, отвечают случаю $A_w \geq 0$, т. е. имеют плавный либо резкий ход, подобный ходу модельных кривых 1 и 2 на рис. 4. Вместе с тем крайне резкое уменьшение E_{br} полибутадиена, обнаруженное авторами [12] вблизи температуры его стеклования $T_g = 180$ К, было достаточно приемлемо описано нами при помощи модельной зависимости, соответствующей

щей условию $A_w < 0$ и аналогичной кривой 3 на рис. 4. Это позволяет предполагать, что скачкообразное изменение пробивной напряженности при $A_w < 0$, вытекающее из анализа зависимости $E_{br} = f(T)$ с позиций теории катастроф, вероятно, не лишено смысла и в применении к реальным полимерным диэлектрикам.

Быстрое снижение E_{br} полибутадиена при такой характерно низкой температуре стеклования ($T_g \approx 180$ К) авторы статьи [12] объясняют высокой молекулярной подвижностью, присущей ПБД как типичному эластомеру с неполярной структурой. Косвенным подтверждением этой гипотезы, по-видимому, могут служить работы [2, 13], в которых отмечалось, что резкое падение пробивной напряженности в окрестности температуры стеклования T_g свойственно преимущественно аморфным неполярным полимерам, имеющим, как правило, низкое значение температуры стеклования [32, 33].

Заметим, что вопрос о возможном критическом (скачкообразном) характере поведения пробивной напряженности у реальных полимерных диэлектриков, несомненно, нуждается в дополнительном экспериментальном и теоретическом изучении, подразумевающим охват большого числа как аморфных, так и кристаллических полимеров. Кроме того, при объяснении закономерностей резкого изменения электропрочностных свойств полимерных диэлектриков с низкой температурой стеклования необходимо, помимо учета их структурных особенностей, на котором фокусировалось изложение статьи [12], также принимать во внимание и специфику электрического разрушения этих материалов при низких температурах.

Такой подход использован в работе [7], где было установлено, что при снижении температуры испытаний до 77 К обнаруживается чрезвычайно резкое усиление полевой зависимости долговечности пленок полиэтилентерефталата, а кинетический процесс их электрического разрушения приобретает черты критического явления. В свете этого обстоятельства не исключено, что вырождение температурной зависимости $E_{br} = f(T)$ вблизи характеристической температуры T_D формально также может быть связано с переходом процесса электрического разрушения полимерного диэлектрика к критической стадии.

Сопоставление характеристических температур T_D и T_g . Вопрос о вероятной связи между температурой начала резкого падения пробивной напряженности и температурой стеклования полимерных диэлектриков ранее затрагивался в работах [1 – 3, 12, 13, 15, 19, 34]. Однако единого мнения о взаимосвязи кинетических процессов стеклования и электрического пробоя полимеров до сих пор не существует. Учитывая такую неопределенность, ниже обсудим степень влияния процессов размягчения (стеклования) ПЭТФ, ППА и ПБД на характер изменения их пробивной напряженности.

Рассмотрение кинетического процесса электрического разрушения с позиций ионизационной теории пробоя [9, 29, 30] позволяет заключить, что одной из причин, вызывающих быстрое возрастание предпробивного тока, является повышение уровня молекулярной подвижности в тех локальных областях полимера, где имеет место значительное усиление напряженности поля [9]. Рост молекулярной подвижности вследствие разрыва макромолекул приводит к изменению ориентации их фрагментов в сильном электрическом поле [9]. Ориентирующее действие поля вызывает резкий рост подвижности носителей заряда и, как следствие, стремительный рост тока в проводящем канале, который завершается пробоем полимера [9, 30].

В свою очередь, общеизвестно, что процесс размягчения полимеров неразрывно связан с размораживанием сегментальной подвижности макромолекул в окрестности температуры стеклования T_g . Активация сегментального движения по достижении T_g должна способствовать дополнительному вкладу в эффект быстрого повышения подвижности носителей заряда, возникающий при нахождении полимерного диэлектрика в сильном электрическом поле. Поэтому в свете сказанного вполне резонно предположить, что проведение электрических испытаний при температурах, недалеко отстоящих от T_g , по всей видимости, будет сопровождаться появлением качественных изменений в поведении температурных кривых электропрочностных свойств некоторых полимеров.

Близость значений T_D и T_g (см. табл. 1) указывает на высокую вероятность тесной связи процессов электрического разрушения ПЭТФ, ППА и ПБД с активацией явления размягчения этих полимеров. Значительные изменения в аморфной фазе кристаллического ПЭТФ и структуре аморфных ППА и ПБД, вызванные усилением сегментальной

подвижности вблизи температуры стеклования, скорее всего, и порождают факт наибольшей скорости снижения пробивной напряженности этих полимеров именно в области характеристических температурных точек T_D и T_g , сопоставимых по своим значениям.

Известно также (см., например, работы [32, 33, 35]), что структурные и морфологические особенности полимеров во многом определяют температуру их стеклования.

Выясним, какое влияние оказывают фазовое состояние и полярность полимера на значение пробивной напряженности E_D при температуре T_D в трижды вырожденной критической точке D_3 .

Увеличение содержания кристаллической фазы в объеме полимерного материала способствует повышению жесткости и ограничению молекулярной подвижности его полимерной цепи [35]. Эта закономерность, по-видимому, может служить объяснением того, что напряженность E_D кристаллического полиэтилентерефталата заметно выше, чем E_D аморфных полипропилена и полибутадиена (см. табл. 1).

Полярность полимера определяет уровень свойственных ему межмолекулярных взаимодействий. Она зависит от числа полярных групп, входящих в состав структурного звена полимерной цепи, и обычно характеризуется величиной плотности энергии когезии e_{coh} [35]. При этом большим значениям e_{coh} отвечает более высокая степень полярности [35]. Из данных табл. 1 следует, что при переходе от неполярных ППА и ПБД к полярному ПЭТФ, наряду с ростом e_{coh} , повышается и величина напряженности E_D . Это согласуется с ранее отмечавшимся фактом существования корреляции между значениями пробивной напряженности и энергии когезии ряда полимеров, представляющей линейно-возрастающую функцию вида $E_{br} = f(e_{coh})$ [1].

Расчет коэффициента усиления электрического поля. Наличие информации об экспериментальной температурной зависимости $E_{br} = f(T)$ позволяет приближенно оценивать значения физических параметров, характеризующих кинетику процесса электрического разрушения полимеров [7, 10]. Одним из таких параметров служит коэффициент усиления поля q_ξ , равный отношению локальной напряженности электрического поля, действующего на макромолекулы, к средней напряженности поля, приложенного к образцу полимера [7, 10].

Соотношение для расчета q_ξ на основании опытных данных о температурной зависимости пробивной напряженности полимеров имеет следующий вид¹:

$$q_\xi = \frac{k_B}{el_0 b} \ln \left(\frac{el_0 q_\xi t_0 w_E}{k_B T} \right), \quad (17)$$

где b , В/(м·К), – угловой коэффициент прямой $E_{br} = a + bT$, приближенно аппроксимирующей экспериментальную зависимость $E_{br} = f(T)$; a , В/м, – начальная ордината этой прямой.

С помощью выражения (17) нами была выполнена количественная оценка коэффициента усиления q_ξ при характеристической температуре T_D для ПЭТФ и ППА. Экспериментальные кривые $E_{br} = f(T)$ этих полимеров характеризуются плавным ходом и, следовательно, их можно приближенно описать линейной зависимостью. Полученные результаты указанной оценки представлены в табл. 2.

Параметры a и b , указанные в табл. 2, были взяты для ПЭТФ из статьи [10], а для ППА определены нами путем аппроксимации экспериментальных точек, полученных в работе [11], линейной функцией $E_{br} = a + bT$ на температурном интервале $[T'; T'']$ (см. табл. 1). Значения скорости w_E , использованные при расчете q_ξ , были взяты из статей [10, 11]; значения величин активационной длины l_0 и периода колебаний атомов в молекулах полимера t_0 были приняты следующими [7]: $l_0 = 0,5 \text{ \AA}$, $t_0 = 10^{-13} \text{ с}$.

Результаты расчетов коэффициентов локального усиления электрического поля (см. табл. 2) находятся в хорошем согласии с известными литературными данными для полимерных диэлектриков [5, 7, 29, 30]: $q_\xi \approx 3 - 22$. Так, для ПЭТФ величина коэффициента усиления $q_\xi = 23,5$, найденная нами из анализа температурной зависимости $E_{br} = f(T)$ [10],

¹ См.: Сударь Н. Т. Электрическое разрушение полимерных диэлектрических пленок в условиях подавления частичных разрядов: дисс. ... докт. физ.-мат. наук: 01.04.04: заш. 12.03.2009. СПб.: СПбГПУ, 2009. 302 с.

Таблица 2

**Результаты оценки коэффициента локального усиления
электрического поля в полимерных диэлектриках
и использованные значения их параметров**

Полимер	a , МВ/м	b , МВ/(м·К)	w_E , МВ/(м·с)	q_ξ
ПЭТФ	1270 [10]	-2,19 [10]	27,0 [10]	23,5
ППА	1865	-5,67	13,7 [11]	9,5

оказалась сопоставимой со значением $q_\xi = 20$, рассчитанным по итогам измерения скоростной зависимости $E_{br} = f(w_E)$ на идентичных образцах этого полимера (см. сноску 1).

Заключение

С позиций теории катастроф получено уравнение (12), описывающее температурную зависимость пробивной напряженности полимерных диэлектриков в переходной области, характеризующейся наиболее резким падением напряженности электрического поля в момент пробоя. Найдены параметры уравнения (12) и построены температурные зависимости пробивной напряженности для полиэтилентерефталата, атактического полипропилена и полибутадиена. Для последних установлено хорошее согласие между опубликованными экспериментальными данными и температурными кривыми пробивной напряженности, построенными по уравнению (12).

Проанализирована поверхность функции катастрофы сборки, задаваемая уравнением (7) и отражающая общие закономерности изменения пробивной напряженности диэлектрика в переходной области при варьировании температуры и безразмерного параметра, пропорционального скорости возрастания средней напряженности электрического поля.

Проведено сравнение значений характеристической температуры стеклования T_g и значений температуры в трижды вырожденной критической точке T_D для полимеров ПЭТФ, ППА и ПБД, которое позволило спрогнозировать наличие связи между кинетическими процессами стеклования и электрического разрушения этих полимеров.

Полученные в статье результаты можно использовать для объяснения экспериментальных данных, относящихся к поведению напряженности пробоя полимерных диэлектриков в условиях изменения температуры окружающей среды.

В дальнейшем предполагается исследовать влияние особенностей химического строения аморфных и кристаллических полимерных диэлектриков на их пробивную напряженность при характеристической температуре T_D .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сажин Б. И., Лобанов А. М., Романовская О. С. Электрические свойства полимеров. 3-е изд. Л.: Химия, 1986. 224 с.
2. Dissado L. A., Fothergill J. C. Electrical degradation and breakdown in polymers (IEE Materials and Devices. Book Series. Vol. 9). London, UK: Peter Peregrinus Ltd., 1992. 601 p.
3. Ушаков В. Я. Изоляция установок высокого напряжения. М.: Энергоатомиздат, 1994. 496 с.
4. Pakhotin V. A., Semenov S. E., Sudar N. T. Increasing the lifetime of polymer dielectrics in an AC field by using phosphorescent dopants: Theoretical justifications and numerical simulation // Journal of Applied Physics. 2025. Vol. 137. No. 21. P. 214104.
5. Закревский В. А., Пахотин В. А., Сударь Н. Т. Долговечность полимеров в переменном электрическом поле // Журнал технической физики. 2020. Т. 90. № 2. С. 251–256.
6. Tumusova A. N., Kapralova V. M., Sudar N. T. Impulse and DC breakdown strength of polypropylene thin film // Physics of Complex Systems. 2020. Vol. 1. No. 2. Pp. 56–60.

7. **Бережанский В. Б., Городов В. В., Закревский В. А., Чубраева Л. И.** Исследование электрического старения полимеров в жидком азоте // Известия Академии наук. Энергетика. 1994. № 5. С. 142–150.
8. **Павлов А. А., Борисова М. Э., Камалов А. М., Диденко А. Л.** Электрофизические свойства полиимидных материалов и композитов на их основе // Глобальная энергия. 2025. Т. 31. № 1. С. 122–135.
9. **Закревский В. А., Кузьмин С. В., Сударь Н. Т.** Электрические свойства и электрическое разрушение тонких пленок недопированного полианилина // Высокомолекулярные соединения. Серия А. 2008. Т. 50. № 4. С. 635–643.
10. **Сударь Н. Т.** Влияние температуры на пробивную напряженность полимеров в постоянном электрическом поле // Труды СПбГТУ. 2008. № 507. С. 275–279.
11. **Artbauer J., Griač J.** The intrinsic electric strength of polymers and its relation to the structure. Part I: Experimental // Acta Technica ČSAV. 1966. Vol. 11. No. 3. Pp. 416–428.
12. **Sabuni H., Nelson J. K.** The electric strength of copolymers // Journal of Materials Science. 1977. Vol. 12. No. 12. Pp. 2435–2440.
13. **Ieda M.** Dielectric breakdown process of polymers // IEEE Transactions on Electrical Insulation. 1980. Vol. EI-15. No. 3. Pp. 206–224.
14. **Шуваев В. П., Сажин Б. И.** О возможном механизме электротеплового пробоя полимерных диэлектриков на постоянном токе // Высокомолекулярные соединения. Серия Б. Краткие сообщения. 1985. Т. 27. № 6. С. 446–449.
15. **Wu C., Chen L., Deshmukh A., et al.** Dielectric polymers tolerant to electric field and temperature extremes: integration of phenomenology, informatics, and experimental validation // ACS Applied Materials & Interfaces. 2021. Vol. 13. No. 45. Pp. 53416–53424.
16. **Zhang Q., Chen X., Zhang B., et al.** High-temperature polymers with record-high breakdown strength enabled by rationally designed chain-packing behavior in blends // Matter. 2021. Vol. 4. No. 7. Pp. 2448–2459.
17. **Yoshimura N., Nishida M., Noto F.** Dielectric breakdown of polyethersulfone (PES) film under DC voltage conditions // IEEE Transactions on Electrical Insulation. 1982. Vol. EI-17. No. 4. Pp. 359–362.
18. **Hikita M., Nagao M., Sawa G., Ieda M.** Dielectric breakdown and electrical conduction of poly(vinylidene-fluoride) in high temperature region // Journal of Physics D: Applied Physics. 1980. Vol. 13. No. 4. Pp. 661–666.
19. **Семенов С. Е.** Влияние температуры на импульсную электрическую прочность полимерных пленок // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 2. С. 141–149.
20. **Борисова М. Э., Марченко М. С.** Электрическая прочность пленок полиимида // Электротехника. 1998. № 5. С. 4–6.
21. **Artbauer J.** Electric strength of polymers // Journal of Physics D: Applied Physics. 1996. Vol. 29. No 2. Pp. 446–456.
22. **Гилмор Р.** Прикладная теория катастроф. В 2-х кн. Пер. с англ. М.: Мир, 1984. Кн. 1. – 350 с. Кн. 2. – 285 с.
23. **Постон Т., Стюарт И.** Теория катастроф и ее приложения. Пер. с англ. М.: Мир, 1980. 608 с.
24. **Zeeman E. C.** Catastrophe theory: Selected papers, 1972–1977. Oxford, England: Addison-Wesley, 1977. 675 p.
25. **Рудской А. И., Баурова Н. И.** Технологическая наследственность при производстве и эксплуатации конструкционных материалов // Технология металлов. 2019. № 2. С. 2–10.
26. **Емельянов О. А.** Электротепловая неустойчивость полярного полимерного диэлектрика за областью температуры стеклования // Письма в Журнал технической физики. 2001. Т. 27. № 16. С. 32–39.
27. **Thete A., Geelen D., van der Molen S. J., Tromp R. M.** Charge catastrophe and dielectric breakdown during exposure of organic thin films to low-energy electron radiation // Physical Review Letters. 2017. Vol. 119. No. 26. P. 266803.
28. **Сканави Г. И.** Физика диэлектриков (область сильных полей). М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1958. 907 с.

29. **Закревский В. А., Слуцкер А. И.** Возможные механизмы распада макромолекул в механическом и электрическом полях // Высокомолекулярные соединения. Серия А. 1984. Т. 26. № 6. С. 1201–1206.
30. **Закревский В. А., Сударь Н. Т.** Ионизационный механизм электрического разрушения (пробоя) полимерных диэлектрических пленок // Физика твердого тела. 2013. Т. 55. № 7. С. 1298–1303.
31. **Киселевич В. В.** Электрическая долговечность полимеров с точки зрения теории катастроф // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 2. С. 93–108.
32. **Бартнев Г. М., Бартнева А. Г.** Релаксационные свойства полимеров. М.: Химия, 1992. 384 с.
33. **Ван Кревелен Д. В.** Свойства и химическое строение полимеров. Пер. с англ. М.: Химия, 1976. 416 с.
34. **Ju T., Treufeld I., Wolak M., et al.** Effect of glass transition temperature on enhanced dielectric breakdown strength and lifetime of multilayer polymer films // ACS Applied Materials & Interfaces. 2024. Vol. 16. No. 1. Pp. 795–806.
35. **Нильсен Л. Е.** Механические свойства полимеров и полимерных композиций. Пер. с англ. М.: Химия, 1978. 312 с.

REFERENCES

1. **Sazhin B. I., Lobanov A. M., Romanovskaya O. S.**, Elektricheskiye svoystva polimerov [Electrical properties of polymers], 3th edition, Khimiya Publishing, Leningrad, 1986 (in Russian).
2. **Dissado L. A., Fothergill J. C.**, Electrical degradation and breakdown in polymers (IEE Materials and Devices, Book Ser., Vol. 9), Peter Peregrinus Ltd., London, UK, 1992.
3. **Ushakov V. Y.**, Insulation of high-voltage equipment, Springer, Berlin–Heidelberg, 2004.
4. **Pakhotin V. A., Semenov S. E., Sudar N. T.**, Increasing the lifetime of polymer dielectrics in an AC field by using phosphorescent dopants: Theoretical justifications and numerical simulation, J. Appl. Phys. 137 (21) (2025) 214104.
5. **Zakrevskii V. A., Pakhotin V. A., Sudar' N. T.**, Lifetime of polymers in AC electric field, Tech. Phys. 65 (2) (2020) 238–242.
6. **Tumusova A. N., Kapralova V. M., Sudar N. T.**, Impulse and DC breakdown strength of polypropylene thin film, Physics of Complex Systems. 1 (2) (2020) 56–60.
7. **Berezhanskiy V. B., Gorodov V. V., Zakrevskiy V. A., Chubrayeva L. I.**, Issledovaniye elektricheskogo stareniya polimerov v zhidkom azote [Study of electrical aging of polymers in liquid nitrogen], Izvestiya Akademii Nauk. Energetika [Thermal Engineering]. 5 (1994) 142–150 (in Russian).
8. **Pavlov A. A., Borisova M. E., Kamalov A. M., Didenko A. L.**, Electrophysical properties of polyimide materials and polyimide-based composites, Global Energy. 31 (1) (2025) 122–135 (in Russian).
9. **Zakrevskii V. A., Kuz'min S. V., Sudar' N. T.**, Electrical properties and electrical failure of thin films of undoped polyaniline, Polym. Sci. Ser. A. 50 (4) (2008) 411–416.
10. **Sudar' N. T.**, Vliyaniye temperatury na probivnuyu napryazhennost polimerov v postoyannom elektricheskom pole [Influence of temperature on breakdown strength polymers in the direct current], Trudy SPbGTU [Proceedings of St. Petersburg State Technical University]. 507 (2008) 275–279 (in Russian).
11. **Arthbauer J., Griač J.**, The intrinsic electric strength of polymers and its relation to the structure. Part I: Experimental, Acta Tech. ČSAV. 11 (3) (1966) 416–428.
12. **Sabuni H., Nelson J. K.**, The electric strength of copolymers, J. Mater. Sci. 12 (12) (1977) 2435–2440.
13. **Ieda M.**, Dielectric breakdown process of polymers, IEEE Trans. Electr. Insul. EI-15 (3) (1980) 206–224.
14. **Shuvayev V. P., Sazhin B. I.**, O vozmozhnom mekhanizme elektroteplovogo proboya polimernykh dielektrikov na postoyannom toke [On a possible mechanism of electrothermal breakdown of polymer dielectrics on direct current], Vysokomol. Soedin. Ser. B [Polym. Sci. U.S.S.R. Ser. B]. 27 (6) (1985) 446–449 (in Russian).

15. **Wu C., Chen L., Deshmukh A., et al.**, Dielectric polymers tolerant to electric field and temperature extremes: integration of phenomenology, informatics, and experimental validation, *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 13 (45) (2021) 53416–53424.
16. **Zhang Q., Chen X., Zhang B., et al.**, High-temperature polymers with record-high breakdown strength enabled by rationally designed chain-packing behavior in blends, *Matter*. 4 (7) (2021) 2448–2459.
17. **Yoshimura N., Nishida M., Noto F.**, Dielectric breakdown of polyethersulfone (PES) film under DC voltage conditions, *IEEE Trans. Electr. Insul.* EI-17 (4) (1982) 359–362.
18. **Hikita M., Nagao M., Sawa G., Ieda M.**, Dielectric breakdown and electrical conduction of poly(vinylidene-fluoride) in high temperature region, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 13 (4) (1980) 661–666.
19. **Semenov S. E.**, The temperature effect on impulse dielectric strength of polymer films, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 17 (2) (2024) 141–149 (in Russian).
20. **Borisova M. E., Marchenko M. S.**, Electric strength of polyimide films, *Russ. Electr. Engin.* 5 (1998) 4–6 (in Russian).
21. **Artbauer J.**, Electric strength of polymers, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 29 (2) (1996) 446–456.
22. **Gilmore R.**, *Catastrophe theory for scientists and engineers*, Dover Publications, New York, 1993.
23. **Poston T., Stewart I.**, *Catastrophe theory and its applications*, Pitman, London, 1978.
24. **Zeeman E. C.**, *Catastrophe theory: Selected papers, 1972–1977*, Addison-Wesley, Oxford, England, 1977.
25. **Rudskoi A. I., Baurova N. I.**, Technological heredity during the production and operation of structural materials, *Russ. Metall.* 2019 (13) (2019) 1378–1383.
26. **Emel'yanov O. A.**, Electrothermal instability of a polar polymer dielectric above the glass transition temperature, *Tech. Phys. Lett.* 27 (8) (2001) 679–682.
27. **Thete A., Geelen D., van der Molen S. J., Tromp R. M.**, Charge catastrophe and dielectric breakdown during exposure of organic thin films to low-energy electron radiation, *Phys. Rev. Lett.* 119 (26) (2017) 266803.
28. **Skani G. I.**, *Fizika dielektrikov (oblast' sil'nykh polei) [Physics of dielectrics: Strong fields domain]*, GIFML Publishing, Moscow, 1958 (in Russian).
29. **Zakrevskii V. A., Slutsker A. I.**, Possible mechanisms of degradation of macromolecules in mechanical and electrical fields, *Polym. Sci. U.S.S.R.* 26 (6) (1984) 1341–1348.
30. **Zakrevskii V. A., Sudar' N. T.**, Ionization mechanism of the electrical degradation (breakdown) of polymer dielectric films, *Phys. Solid State*. 55 (7) (2013) 1395–1400.
31. **Kiselevich V. V.**, An electrical lifetime of polymers in terms of the catastrophe theory, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 18 (2) (2025) 93–108 (in Russian).
32. **Bartenev G. M., Barteneva A. G.**, *Relaxation properties of polymers*, Khimiya Publishing, Moscow, 1992 (in Russian).
33. **Van Krevelen D. W., Te Nijenhuis K.**, *Properties of polymers: their correlation with chemical structure; their numerical estimation and prediction from additive group contributions*, 4th edition, Elsevier, Amsterdam, 2009.
34. **Ju T., Treufeld I., Wolak M., et al.**, Effect of glass transition temperature on enhanced dielectric breakdown strength and lifetime of multilayer polymer films, *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 16 (1) (2024) 795–806.
35. **Nielsen L. E., Landel R. F.**, *Mechanical properties of polymers and composites*, 2nd edition, CRC Press, Boca Raton, FL, 1993.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

КИСЕЛЕВИЧ Валентин Владимирович – старший преподаватель кафедры «Промышленная теплоэнергетика и экология» Гомельского государственного технического университета имени П. О. Сухого, г. Гомель, Республика Беларусь.

246029, Республика Беларусь, г. Гомель, пр. Октября, 48

valentinkis@list.ru

ORCID: 0000-0003-0542-0939

THE AUTHOR

KISELEVICH Valentin V.

Gomel State Technical University named after P. O. Sukhoi

48 October Ave., Gomel, 246029, Republic of Belarus

valentinkis@list.ru

ORCID: 0000-0003-0542-0939

*Статья поступила в редакцию 30.09.2025. Одобрена после рецензирования 01.11.2025.
Принята 01.11.2025.*

Received 30.09.2025. Approved after reviewing 01.11.2025. Accepted 01.11.2025.

Научная статья

УДК 538.915

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19105>

ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННАЯ РЕЛАКСАЦИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО ПОТЕНЦИАЛА В КОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНКАХ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА

С. М. Кулемина [✉], Д. Э. Темнов

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

[✉] sonia.kulemina@yandex.ru

Аннотация. В работе исследована стабильность электретного состояния пленок полилактида с дисперсным наполнителем – белой сажей; при этом использован метод термостимулированной релаксации поверхностного потенциала. Показано, что оптимальными электретными свойствами обладают пленки с содержанием наполнителя не менее 4%, поляризованные в поле отрицательного коронного разряда. Методом численного моделирования найдены значения параметров релаксационных процессов (энергия активации и эффективный частотный фактор), ответственных за электретное состояние данного материала. Для изученных образцов определено время релаксации электретного состояния при комнатной температуре. Полученные результаты позволяют рекомендовать композит для использования в качестве активного упаковочного материала.

Ключевые слова: электретное состояние, термостимулированная релаксация поверхностного потенциала, полилактид, дисперсный наполнитель

Финансирование: Исследование выполнено при поддержке внутреннего гранта Российского государственного педагогического университета имени А. И. Герцена (проект № 57-ВГ).

Для цитирования: Кулемина С. М., Темнов Д. Э. Термостимулированная релаксация поверхностного потенциала в композитных пленках на основе полилактида // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 62–69. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19105>

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.19105>

THERMALLY STIMULATED RELAXATION OF SURFACE POTENTIAL IN POLYLACTIDE-BASED COMPOSITE FILMS

S. M. Kulemina [✉], D. E. Temnov

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

[✉] sonia.kulemina@yandex.ru

Abstract. The stability of the electret state in polylactide films with a white soot dispersed filler has been studied using the method of thermally stimulated relaxation of the surface potential. The best electret properties were shown to exhibit by the films with a filler content of at least 4%, and the films polarized in a negative corona discharge field. The parameter values of the relaxation processes (the activation energy value and effective frequency factor one) responsible for the electret state of this material were found by numerical simulation. The relaxation time of the electret state at room temperature was determined for the samples under study. The obtained results allow us to recommend the composites as an active packaging material.

Keywords: electret state, thermally stimulated relaxation of surface potential, polylactide, dispersed filler

Funding: The research was supported by an internal grant from the Herzen State Pedagogical University of Russia, St. Petersburg (Project No. 57-VG).

For citation: Kulemina S. M., Temnov D. E., Thermally stimulated relaxation of surface potential in polylactide-based composite films, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (1) (2026) 62–69. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19105>

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

Введение

Полилактид (*англ.* polylactide (PLA)) представляет собой биополимер, который в последние годы привлекает особое внимание исследователей и промышленности благодаря сочетанию таких полезных свойств, как биоразлагаемость и возобновляемость сырьевой базы при удовлетворительных эксплуатационных характеристиках [1]. Совокупность этих свойств позволяет широко применять полилактид в медицине, пищевой и фармацевтической упаковке, а также в технологиях аддитивного производства (3D-печати). Одним из перспективных направлений его использования является разработка так называемой активной упаковки, способной взаимодействовать с содержимым и внешней средой с целью продления срока хранения и повышения безопасности продукции [2, 3].

Однако полилактид характеризуется низкими электретными характеристиками, а именно – малой величиной первоначального поверхностного потенциала и высокой скоростью релаксации накопленного заряда. Согласно известным исследовательским результатам, введение наполнителей в полимерную матрицу позволяет существенно повысить как уровень, так и временную стабильность ее электретного эффекта. [4 – 8]. В качестве наполнителей для PLA активно изучаются как неорганические, так и углеродсодержащие материалы. Их добавление способствует повышению плотности ловушек заряда и улучшению стабильности электретного состояния за счет формирования дополнительных центров захвата носителей заряда и модификации морфологии полимерной матрицы.

Особый интерес представляет использование белой сажи (диоксид кремния SiO_2 , *англ.* white soot (WS)) в качестве наполнителя. Данный материал обладает развитой системой поверхностных гидроксильных групп, которые способны взаимодействовать с макромолекулами PLA. Кроме того, частицы WS могут выступать как центры локализации заряда, что способствует улучшению электретных свойств системы.

Ранее сообщалось, что введение дисперсных частиц WS в различные полимерные матрицы, такие как полиэтилен и полипропилен, приводит к значительному улучшению электретных характеристик материалов [9]. Но систематические исследования влияния белой сажи на электретные свойства пленок полилактида нуждаются в углублении и детализации, что определило актуальность проведенного нами исследования.

Таким образом, цель данной работы – выяснить характер влияния белой сажи в качестве наполнителя на электретные свойства полилактида.

Материалы и методы исследования

В работе изучены образцы полилактида (производитель Nature Works, Марка 4032D, температура плавления $155 - 170^\circ\text{C}$) с белой сажой БС-120 (производитель Роспак, ГОСТ32159-2013) в качестве наполнителя, изготовленные в Казанском технологическом университете. Средний размер частиц наполнителя составлял $19 - 27$ нм. Процесс смешения полимерной композиции с наполнителем осуществляли на вальцах при температуре 180°C в течение 5 мин; скорость вращения валков составляла 2,5 об/с. Полученную смесь затем формировали в пленочные образцы толщиной 0,5 мм (использовался лабораторный пресс модели УТ-30RS).

Режим прессования характеризовался следующими параметрами:

температура плит	200°C,
давление	35 МПа,
предварительный нагрев	20 мин,
выдержка под давлением	300 с,
охлаждение	120 с.

Конечная толщина готовых образцов для исследований находилась в диапазоне 300 ± 50 мкм.

Оценка стабильности электретоного состояния проводилась путем измерения термостимулированной релаксации потенциала на поверхности образцов [10].

Для повышения стабильности электретоного состояния все образцы перед основной процедурой подвергали термическому отжигу в свободном состоянии. Далее осуществляли их поляризацию в поле положительного или отрицательного коронного разряда при 70°C в течение 600 с. Завершающим этапом экспериментального цикла была регистрация температурной зависимости поверхностного потенциала в режиме нагрева с постоянной скоростью 0,08 °C/с.

Результаты и их обсуждение

Сравнительный анализ графиков на рис. 1, *a* (нормированные зависимости поверхностного потенциала для пленок полилактида с 4% белой сажи) выявил ключевое различие: начало деполяризации сдвинуто в область более низкой температуры (60 – 65°C) для образцов, поляризованных положительным коронным разрядом. Наблюдаемый эффект прямо свидетельствует о различных механизмах поляризации и релаксационных процессов в материале. На этом основании сделано заключение, что ловушки для отрицательных зарядов обладают значительно большей глубиной. Именно ввиду этого получены как повышенная стабильность, так и улучшенные физико-химические свойства пленок, прошедших обработку в поле отрицательной короны.

На рис. 1, *b* представлены те же зависимости в абсолютных значениях поверхностного потенциала. Видно, что в отрицательном поле коронного разряда значение поверхностного потенциала выше ($1,45 \pm 0,03$ кВ для отрицательного, $1,35 \pm 0,03$ кВ для положительного). Это говорит о том, что при отрицательной полярности больше не только глубина приповерхностных ловушек, но и выше концентрация ловушек для отрицательных носителей заряда.

На рис. 2 представлено графически влияние температуры на поверхностный потенциал образцов с различной массовой долей наполнителя (2, 4 и 6 %), поляризованных отрицательным коронным разрядом. На начальном этапе нагрева значение потенциала сохраняет

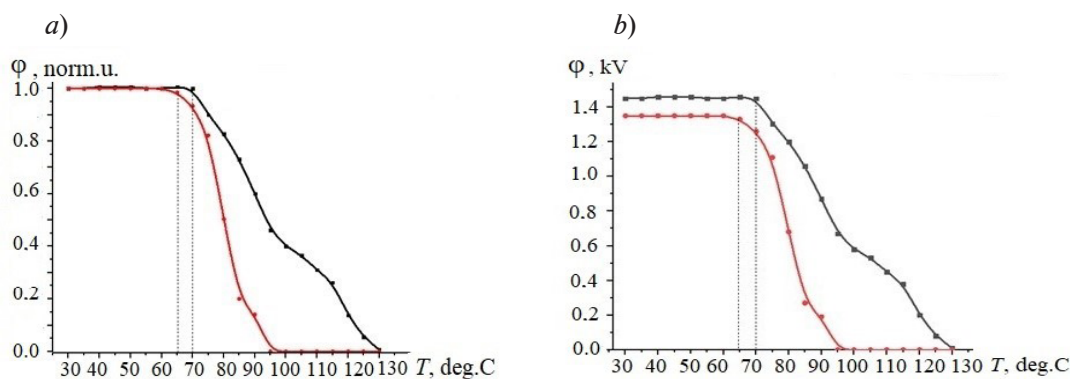


Рис. 1. Температурные зависимости нормированного (*a*) и абсолютного (*b*) значений поверхностного потенциала для композиции PLA + 4% WS при отрицательной (черные кривые) и положительной (красные кривые) полярности поляризующего коронного разряда.

Температурные интервалы переходных областей показаны точечными вертикальными линиями

стабильность. Его спад наблюдается только после достижения определенной пороговой температуры T_c , причем значение T_c растет при увеличении концентрации наполнителя в композиции.

Как показано в работе [11], производная потенциала φ по температуре описывается выражением

$$\frac{d\varphi}{dT} = -\frac{\varphi_0 \omega}{\beta} \exp\left(-\frac{W}{kT} - \int_{T_0}^T \frac{\omega}{\beta} \exp\left(-\frac{W}{kT'}\right) dT'\right), \quad (1)$$

где ω – эффективный частотный фактор; β – скорость нагревания образца; k – постоянная Больцмана; W – энергия активации.

Зависимость (1) по виду не отличается от температурной зависимости термостимулированного тока короткого замыкания, причем параметр W может выражать как энергию активации равновесной проводимости (при симметричном ходе кривых термостимулированной релаксации потенциала на поверхности образцов [10] для положительной и отрицательной полярности коронного разряда), так и глубину ловушек для заряда, захваченного на них в процессе поляризации образца (при несимметричном ходе кривых поверхностного потенциала), что и наблюдалось в данном случае (см. рис. 1, *b*).

На рис. 3 приведены температурные зависимости $\partial\varphi/\partial T$, рассчитанные по полученным экспериментальным данным. В температурном интервале 20 – 140 °С наблюдается два релаксационных процесса: в областях около 80 и 120 °С. Важно отметить, что высокотемпературный процесс (примерно 120 °С) обнаруживается только для образцов с дисперсным наполнителем.

Для определения параметров этих релаксационных процессов был использован метод численного моделирования. Теоретические зависимости температурного спада поверхностного потенциала рассчитывались по следующей формуле:

$$\varphi(T) = \varphi_0 \left\{ S_1 \exp\left[-\int_{T_0}^T \frac{\omega_1}{\beta} \exp\left(-\frac{W_1}{kT'}\right) dT'\right] + S_2 \exp\left[-\int_{T_0}^T \frac{\omega_2}{\beta} \exp\left(-\frac{W_2}{kT'}\right) dT'\right] \right\}, \quad (2)$$

где $W_1, W_2, \text{эВ}$, – величины энергии активации; $\omega_1, \omega_2, \text{с}^{-1}$, – частотные факторы; S_1, S_2 – весовые коэффициенты; подстрочные индексы 1 и 2 относятся к первому и второму процессам.

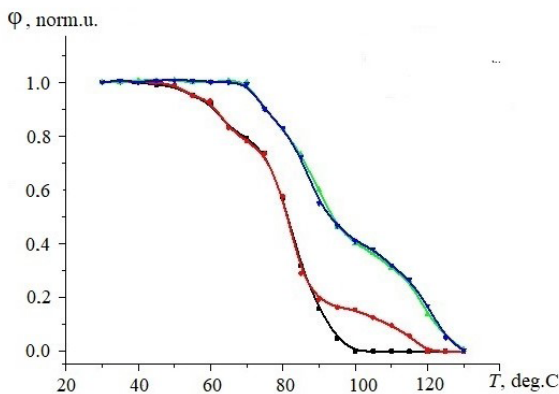


Рис. 2. Сравнение температурных зависимостей поверхностного потенциала для серии образцов PLA+WS, подвергнутых поляризации отрицательным коронным разрядом. Концентрация s WS, %: 0, 2, 4 и 6 (черная, красная, зеленая и синяя кривые, соответственно)

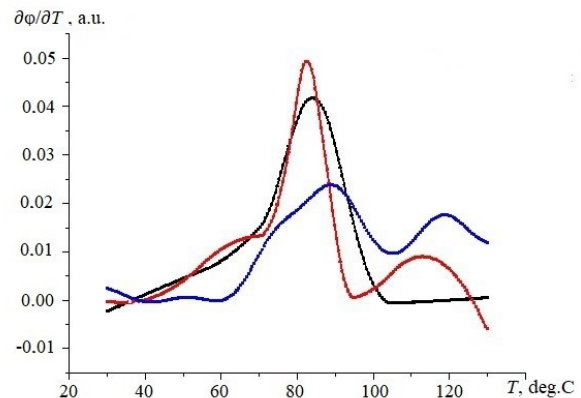


Рис. 3. Температурные зависимости величины $\partial\varphi/\partial T$ для пленок PLA + s WS; s , %: 0, 2 и 4 (черная, красная и синяя линии, соответственно)

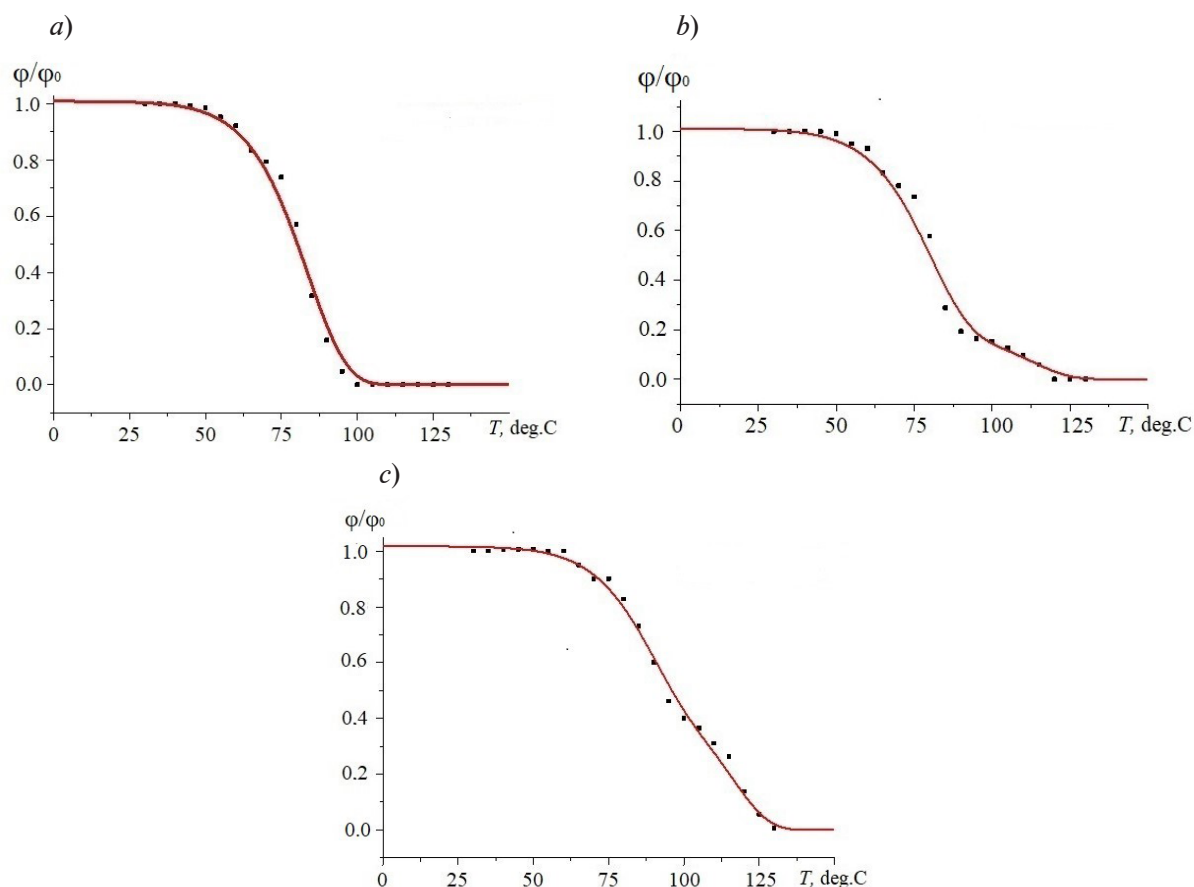


Рис. 4. Экспериментальные (точки) и расчетные (линии) зависимости нормализованного поверхностного потенциала для пленок PLA + c WS; c , %: 0 (а), 2 (b) и 4 (с). Расчет проведен по формуле (2)

На рис. 4 приведено сравнение экспериментальных и теоретических кривых термостимулированной релаксации потенциала на поверхности исследуемых образцов [10], а в таблице представлены параметры релаксационных процессов, для них рассчитанные.

Первый процесс, вероятно, обусловлен расстеклованием полимера, которое приводит к активации сегментальной подвижности макромолекул в исследуемом температурном

Таблица

Характеристика двух релаксационных процессов в полилактидных пленках с разным содержанием белой сажи в качестве наполнителя

Параметр	Значение параметра для PLA+ WS (c , %)							
	$c = 0\%$		$c = 2\%$		$c = 4\%$		$c = 6\%$	
	I	II	I	II	I	II	I	II
W , эВ	0,86	–	0,84	1,13	0,86	1,14	0,86	1,14
ω_0 , c^{-1}	$9 \cdot 10^{10}$	–	$1 \cdot 10^{10}$	$7 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{10}$	$7 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{10}$	$7 \cdot 10^{12}$
S	1,0	0,0	0,83	0,17	0,55	0,45	0,55	0,45

Обозначения: W – энергия активации, ω_0 – эффективный частотный фактор, S – весовой коэффициент I либо II процесса (в температурных областях 80 и 120 °C, соответственно); PLA – polylactide (полилактид), WS – white soot (белая сажа), c – концентрация белой сажи в образце.



интервале [12], второй – образованием электронных ловушек при добавлении в полимер нанодисперсного наполнителя [13].

Проведенные исследования демонстрируют, что введение белой сажи в полилактидную матрицу способствует повышению стабильности электрретного состояния. Расчет времени релаксации τ электрретного состояния полилактидных пленок выполняется по следующей формуле:

$$\tau = \frac{1}{\omega_0} \exp\left(\frac{W}{kT}\right), \quad (3)$$

где ω_0 – частотный фактор.

Релаксационные характеристики композитов с 4% белой сажи ($\tau \approx 280$ ч при комнатной температуре) позволяют рассматривать их как перспективный материал для активной упаковки пищевых продуктов.

Полученные данные свидетельствуют о том, что оптимальная концентрация наполнителя, обеспечивающая наивысшие электрретные свойства пленок PLA, находится в диапазоне 4 – 6%.

Заключение

Введение в пленки полилактида гидратированного диоксида кремния (белой сажи) улучшает электрретные характеристики данного полимера благодаря образованию достаточно глубоких электронных ловушек. При 4%-м содержании наполнителя время релаксации электрретного состояния в композитных пленках достигает 280 ч при комнатной температуре, что делает их пригодными для использования в качестве активного упаковочного материала. Рассчитаны параметры релаксационных процессов как в исходных пленках полилактида, так и в наполненных белой сажой.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Балов А., Ашина О. Мировой рынок биополимеров // Химический журнал. 2012. № 3. С. 48–53.
2. Загидуллина И. А., Гужова А. А., Перушкина Е. В., Минзапирова А. М., Фазлыева Л. Ф. Активный упаковочный материал для молока // Вестник Технологического университета. 2021. Т. 24. № 9. С. 57–60.
3. Шабанова П. В., Абаева А. В. Разработка биоразлагаемых активных материалов на основе полилактида, бактериальной наноцеллюлозы и растительных экстрактов // Health, Food & Biotechnology. 2024. Т. 6. № 2. С. 58–67.
4. Камалова Р. И., Загидуллина И. А., Галиханов М. Ф. Влияние талька на электрретные свойства полилактида // Актуальные проблемы науки о полимерах. Сборник трудов II Всероссийской научной конференции преподавателей и студентов вузов. Казань, 25–26 мая 2021. С. 88–90.
5. Загидуллина И. А., Камалова Р. И., Шарипова Г. Ф., Галиханов М. Ф., Хайруллин Р. З., Гужова А. А. Изменение электрретных характеристик полилактида с помощью введения минеральных наполнителей // Вестник Технологического университета. 2020. Т. 23. № 5. С. 79–83.
6. Коваленко М. А. Исследование электрретных свойств полилактида с нанонаполнителями // Актуальные вопросы физики и техники. Сборник материалов X Республиканской научной конференции студентов, магистрантов и аспирантов. Беларусь, Гомель, 22 апреля 2021. С. 13.
7. Платко А. П., Сотова Ю. Л., Гороховатский Ю. А., Карулина Е. А., Галиханов М. Ф. Электрретный эффект в биоразлагаемых полимерных пленках полилактида с наноразмерным оксидом магния в качестве наполнителя // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 26–33.
8. Гужова А. А., Темнов Д. Э., Галиханов М. Ф., Гороховатский Ю. А. Повышение стабильности электрретных свойств полилактида с помощью дисперсного наполнителя // Вестник Казанского технологического университета. 2013. Т. 16. № 3. С. 73–75.
9. Загидуллина И. А., Камалова Р. И., Галиханов М. Ф., Гужова А. А. Изучение свойств композиций полилактида с аэросилом и короноэлектретов на их основе // Вестник Технологического университета. 2021. Т. 24. № 4. С. 43–47.

10. **Гороховатский Ю. А.** Термоактивационная спектроскопия (феноменологическая теория, экспериментальная методика, примеры применения). СПб.: Изд-во РГПУ им. А. И. Герцена, 2023. 160 с.

11. **Гороховатский Ю. А., Темнов Д. Э.** Термостимулированная релаксация поверхностного потенциала и термостимулированные токи короткого замыкания в предварительно заряженном диэлектрике // Известия Российского государственного педагогического университета им. А. И. Герцена. 2007. Т. 8. № 38. С. 24–34.

12. **Белов Д. А., Круль Л. П., Поликарпов А. П., Климовцова И. А.** Термомеханические свойства полилактоидов // Вестник БГУ. Серия 2: Химия, биология, география. 2007. № 3. С. 40–46.

13. **Гольдаде В. А., Зотов С. В., Шаповалов В. М., Юдин В. Э.** Электретный эффект в полимерных нанокompозитах (обзор) // Полимерные материалы и технологии. 2019. Т. 5. № 2. С. 6–18.

14. **Коваленко М. А., Зотов С. В., Гольдаде В. А., Павлов А. А., Камалов А. М., Борисова М. Э.** Электретное состояние в нанокompозитах на основе полилактоида // Проблемы физики, математики и техники. Беларусь, Гомель. 2023. выпуск 2(55). С. 20–24.

REFERENCES

1. **Balov A., Ashpina O.**, *Mirovoy rynek biopolimerov [The global biopolymer market]*, *The Chemical Journal*. (3) (2012) 48–53 (in Russian).

2. **Zagidullina I. A., Guzhova A. A., Perushkina E. V., et al.**, *Active packaging material for milk*, *Herald of Technological University*. 24 (9) (2021) 57–60 (in Russian).

3. **Shabanova P. V., Abayeva A. V.**, *Development of biodegradable active materials based on polyactide, nanobacterial cellulose and plant extracts*, *Health, Food & Biotechnol.* 6 (2) (2024) 58–67 (in Russian).

4. **Kamalova R. I., Zagidullina I. A., Galikhanov M. F.**, *Vliyaniye talka na elektretnyye svoystva polilaktida [The effect of talc on the electret properties of polyactide]*, *Aktualnyye problemy nauki o polimerakh [Current Problems of Polymer Science]*, *Proc. of the All-Russian Sci. Conf. for Univ. Teachers & Students*, May 25–26 2021, Kazan (2021) 88–90.

5. **Zagidullina I. A., Kamalova R. I., Sharipova G. A., et al.**, *Change of electret characteristics of polyactide acid by addition of mineral fillers*, *Herald of Technological University*. 23 (5) (2020) 79–83 (in Russian).

6. **Kovalenko M. A.**, *Issledovaniye elektretnykh svoystv polilaktida s nanonapolnitelyami [Study of electret properties of polyactide with nanofillers]*, “Aktualnyye voprosy fiziki i tekhniki” [Current Issues in Physics & Engineering]. Collection of materials from the 10th Republican Scientific Conference of Students, Master's Degree Students, and Postgraduates; Belarus, Gomel, April 22, 2021. P. 13.

7. **Platko A. P., Sotova Yu. L., Gorokhovatskiy Yu. A., et al.**, *Electret effect in bio-decomposed polyactide films filled with nanoscale magnesia*, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 11 (1) (2018) 26–33 (in Russian).

8. **Guzhova A. A., Temnov D. E., Galikhanov M. F., Gorokhovatskiy Yu. A.**, *Povysheniye stabilnosti elektretnykh svoystv polilaktida s pomoshchyu dispersnogo napolnitelya [Increasing the stability of the electret properties of a polyactide using a polydisperse filler]*, *Herald of the Kazan Technological University*. 16 (3) (2013) 73–75 (in Russian).

9. **Zagidullina I. A., Kamalova R. I., Galikhanov M. F., Guzhova A. A.**, *Properties of polyactide – fumed silica compositions and coronoelectrets based on them*, *Herald of Technological University*. 24 (4) (2021) 43–47 (in Russian).

10. **Gorokhovatskiy Yu. A.**, *Termoaktivatsionnaya spektroskopiya (fenomenologicheskaya teoriya, eksperimentalnaya metodika, primery primeneniya) [Thermoactivated spectroscopy: Phenomenological theory, experimental technique, application examples]*, Publishing house of Herzen State Pedagogical University of Russia, St. Petersburg, 2023 (in Russian).

11. **Gorokhovatskiy Yu. A., Temnov D. E.**, *Thermally stimulated relaxation of surface potential and thermally stimulated short circuit currents in the charged dielectric*, *Herzen University Journal of Humanities & Sciences*. 8 (38) (2007) 24–34.

12. **Belov D. A., Krul L. P., Polikarpov A. P., Klimovtsova I. A.**, *Thermomechanical properties of polyactides*, *Bulletin of the Belarusian State University. Ser. 2: Chemistry, Biology, Geography*. (3) (2007) 40–46 (in Russian).



13. Goldade V. A., Zotov S. V., Shapovalov V. M., Yudin V. E., Electret effect in polymer nanocomposites (review), Polymer Materials and Technologies. 5 (2) (2019) 6–18 (in Russian).

14. Kovalenko M. A., Zotov S. V., Gol'dade V. A., Pavlov A. A., Kamalov A. M., Borisova M. E., Elektretnoe sostoianie v nanokompozitah na osnove polilaktida. [Electret state in polylactide-based nanocomposites], Problems of Physics, Mathematics and Technology. Belarus, Gomel. 2023. Issue 2(55). P. 20–24.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КУЛЕМИНА Софья Михайловна – инженер кафедры общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета имени А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия.

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

sonia.kulemina@yandex.ru

ORCID: 0009-0002-3569-4981

ТЕМНОВ Дмитрий Эдуардович – кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета имени А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия.

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

tde@ Herzen.spb.ru

ORCID: 0000-0002-9560-4346

THE AUTHORS

KULEMINA Sophia M.

Herzen State Pedagogical University of Russia

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

sonia.kulemina@yandex.ru

ORCID: 0009-0002-3569-4981

TEMNOV Dmitry E.

Herzen State Pedagogical University of Russia

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

tde@ Herzen.spb.ru

ORCID: 0000-0002-9560-4346

Статья поступила в редакцию 16.10.2025. Одобрена после рецензирования 12.11.2025. Принята 20.11.2025.

Received 16.10.2025. Approved after reviewing 12.11.2025. Accepted 20.11.2025.

Математическое моделирование физических процессов

Научная статья

УДК 532.517

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19106>

ТЕЧЕНИЕ И ТЕПЛОБМЕН ПРИ СВОБОДНОЙ КОНВЕКЦИИ ВОЗДУХА ВБЛИЗИ ОДИНОЧНОЙ ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ ОРЕБРЕННОЙ ТРУБЫ

Д. Э. Агеев [✉], М. А. Засимова

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
[✉] ageev2de@gmail.com

Аннотация. В работе представлены результаты численного исследования свободно-конвективного течения воздуха и его теплообмена, формирующихся вокруг одиночной горизонтальной оребренной трубы (отношение диаметра ребер к диаметру несущей трубы равно 2,15). Расчеты выполнены при значении числа Рэлея $Ra = 2 \times 10^7$ и ниже. Изменение Ra осуществлялось путем варьирования перепада температур между нагретой поверхностью трубы и окружающей средой, а также через изменение линейного масштаба задачи. Отношение шага ребер к диаметру несущей трубы s/d варьировалось в диапазоне от 0,09 до 0,55. В результате расчетов найдено оптимальное значение s/d , равное 0,23, при котором обеспечивается максимальный теплосъем с выбранной трубы. Показано хорошее согласие расчетных результатов с экспериментальными данными, доступными в литературе.

Ключевые слова: естественная конвекция, теплообмен, оребренная труба, численное исследование, число Рэлея

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-49-10003).

Для цитирования: Агеев Д. Э., Засимова М. А. Течение и теплообмен при свободной конвекции воздуха вблизи одиночной горизонтальной оребренной трубы // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 70–82. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19106>

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.19106>

A NATURAL CONVECTION AIRFLOW AND ITS HEAT TRANSFER AROUND A SINGLE HORIZONTAL FINNED TUBE

D. E. Ageev [✉], M. A. Zasimova

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
[✉] ageev2de@gmail.com

Abstract. The paper presents the results of numerical investigation of a natural convective airflow and its heat transfer forming around a single horizontal finned tube (the ratio of a fin diameter to the base tube one is 2.15). Calculations have been carried out at a Rayleigh number $Ra = 2 \times 10^7$ or less. Variation of the Ra value was achieved by changing the temperature difference between the heated tube surface and the ambient air, as well as by modifying the geometric scale of the problem. The fin spacing-to-the base tube diameter ratio was varied in the range from 0.09 to 0.55. The optimal fin spacing of 0.23 was determined, corresponding

to the maximum heat removal from the taken tube. Good agreement was shown between the calculated results and available experimental data from the literature.

Keywords: natural convection, heat transfer, finned tube, numerical investigation, Rayleigh number

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 24-49-10003).

For citation: Ageev D. E., Zasimova M. A., A natural convection airflow and its heat transfer around a single horizontal finned tube, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (1) (2026) 70–82. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19106>

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

Введение

На промышленных предприятиях распространены аппараты как воздушного, так и жидкостного охлаждения. Выбор способа охлаждения определяется множеством факторов. Однако несомненным преимуществом воздушного варианта для аппаратов является дешевизна их построения и обслуживания, по сравнению с вариантом водяного охлаждения.

Часто производители аппаратов воздушного охлаждения применяют в теплообменных секциях трубы, работающие в условиях естественной конвекции. Эти теплообменные аппараты менее эффективны, чем устройства, функционирующие при вынужденном конвективном режиме. Однако такие аппараты более экологичны и просты в эксплуатации, так как запасы воздуха как охлаждающего теплоносителя не ограничены. Увеличение площади теплоотдающей поверхности повсеместно используется для интенсификации теплообмена в аппаратах такого рода. С этой целью применяется оребрение теплоотдающей поверхности. Для повышения эффективности теплоотдачи оребренных труб необходимо при их проектировании проводить варьирование значений их геометрических параметров: межреберного и межтрубного шага, формы ребра и т. п.

В работах 1940 – 1970-х гг. экспериментально [1] и аналитически [2] исследовано ламинарное свободноконвективное течение вблизи пары обогреваемых плоских вертикальных пластин, расположенных параллельно друг другу. Найдены закономерности для определения интегральных значений безразмерной теплоотдачи (числа Нуссельта) в зависимости от расстояния между пластинами и числа Рэлея. На основе этих результатов, в частности, определены значения оптимального расстояния между пластинами, при которых теплоотдача максимальна. В работе [3] предложена корреляционная зависимость, позволяющая находить оптимальное расстояние между пластинами на основе данных измерений. В статье [4] поиск оптимального расстояния между пластинами выполнен путем численного моделирования, в том числе для режимов с высокими значениями числа Рэлея, относящимися к переходному и турбулентному обтеканию пластин.

В работах [5 – 10] представлены экспериментальные данные по теплосъему с поверхности одиночных оребренных труб различной конфигурации. В этих исследованиях варьировали в широком диапазоне значения таких параметров, как диаметры ребер и несущей трубы (D и d , соответственно), шаг ребер s , их количество N и др. В статье [5] представлено исследование течения и теплообмена вблизи горизонтальной трубы (ее диаметр d изменяли от 3,81 до 6,99 см) с парой ребер – двух пластин одинаковой высоты (7,62 см), расстояние s между которыми, отнесенное к высоте ребер, изменяли в интервале от 0,042 до 0,167. Авторы статьи [5] показали, что максимальная теплоотдача наблюдается у периферии ребер, а минимальная – на внутренней части ребра, примыкающей к трубе. В работе [6] рассматривалось течение около трубы ($d = 16$ мм) с ограниченным числом кольцевых ребер ($N = 5$) при значении $s/d = 0,5$. Отнесенный к диаметру несущей трубы диаметр ребер D/d варьировали в диапазоне от 4,38 до 6,88. В итоге было установлено, что ребро меньшего диаметра обеспечивает высокую интенсивность теплоотдачи и равномерное распределение теплового потока.

В работе [7] проведены исследования свободноконвективного течения около оребренных труб (их диаметр $d = 24,9$ мм) с алюминиевыми ребрами различного диаметра (отношение D/d принимало значения от 1,41 до 5,02). Количество ребер N изменяли от 65 до 3, при этом варьировали расстояние между ребрами (величина s/d принимала значения от 0,14 до 5,02). Авторы определили оптимальное расстояние между ребрами, при котором теплоотдача максимальна. Так, например, для значения параметра $D/d = 2,41$ оптимальный межреберный шаг, отнесенный к диаметру несущей трубы (s/d), составлял от 0,31 до 0,33 и зависел от перепада температуры между несущей трубой и окружающей средой.

Наиболее детальную информацию об условиях измерений и геометрических параметрах используемой одиночной оребренной трубы содержат работы [8 – 10]. В статье [8] исследовано течение вблизи оребренной трубы с фиксированным диаметром ребер ($D = 300$ мм), при этом величина D/d принимала значения от 1,5 до 6,0. Шаг ребер s/d варьировали от 0,25 до 1,00. В статьях [9, 10] представлены значения безразмерной теплоотдачи в зависимости от числа Рэлея для трубы диаметром $d = 26,4$ мм с накатанными ребрами диаметром $D = 2,15d$ ($s/d = 0,09$). Варьируемым параметром в исследованиях [9, 10] был угол наклона трубы относительно вектора гравитации.

Результаты численного моделирования свободноконвективного течения около оребренной трубы приведены в работах [11 – 13]. В расчетах акцент сделан на анализ роли геометрических параметров трубы и режимных параметров на теплосъем с целью последующей оптимизации конструкции аппаратов воздушного охлаждения, в состав которой входят оребренные трубы. В работе [11] выполнено численное моделирование течения и теплообмена в условиях, приближенных к описанным в статье [7]. При этом авторы [11] использовали CFD-код PHOENICS на сетках до 15 тыс. ячеек. В указанном исследовании (как и в работе [7]) был найден оптимальный диапазон значений межреберного шага s/d , который для случая $D/d = 2,41$ составил от 0,33 до 0,35 (в зависимости от рассматриваемого режима течения).

В работе [12] исследовали течение и теплообмен вблизи оребренной трубы с ребрами фиксированного диаметра $D = 98,7$ мм, изготовленными из алюминия или нержавеющей стали; отношение D/d варьировали в интервале от 2,97 до 6,15, а шаг ребер s/d – от 0,21 до 0,46. Расчеты были проведены в пакете ANSYS Fluent на сетке, состоящей из 2,3 млн. ячеек. Авторами получены следующие оптимальные значения параметра s/d : 0,31 – для трубы с алюминиевыми ребрами, 0,26 – для трубы с ребрами из нержавеющей стали.

Также с применением пакета ANSYS Fluent на сетке размерностью около 1 млн. ячеек в работе [13] получены расчетные данные о структуре течения и теплообмене вблизи оребренной трубы фиксированного диаметра ($d = 25$ мм) с варьируемым диаметром ребер: отношение D/d изменяли от 2 до 5, с межреберным шагом s/d , которое принимало значения от 0,16 до 5,84.

По результатам исследования были определены оптимальные значения s/d . При наименьшем значении $D/d = 2$ оптимальный шаг ребер лежал в диапазоне от 0,20 до 0,23 (зависел от числа Грасгофа); с ростом отношения D/d оптимальные значения s/d увеличивались.

Цель настоящей работы – поиск условий максимальной эффективности работы оребренной трубы, использованной в экспериментальных работах [9, 10].

В связи с заявленной целью было проведено численное исследование свободноконвективного течения и теплообмена для такой трубы.

Исследовалось влияние шага ребер на структуру течения, локальный и средний теплообмен. Значения числа Нуссельта Nu , рассчитанные при разных числах Рэлея Ra , были сопоставлены с экспериментальными данными [9, 10].

Геометрия расчетной области

Рассматривается течение и теплообмен воздуха около горизонтально ориентированной оребренной трубы, геометрические параметры которой показаны на рис. 1, *a*, *b*. Линейным масштабом задачи служит диаметр основания несущей трубы d . Для варианта, приближенного к условиям экспериментов [9, 10], диаметр трубы $d = d_{base} = 26,4$ мм (подстрочный индекс здесь и далее выражает базовую конфигурацию оребренной трубы). В расчетах величину d варьировали в диапазоне от $1,0d_{base}$ до $9,2d_{base}$.

Отношение диаметра кольцевых ребер D к диаметру несущей трубы D/d составляет 2,15. Толщина ребер, отнесенная к диаметру несущей трубы, была неизменной и составляла $\delta/d = 0,02$. Шаг ребер s варьировали в диапазоне от $s_{base} = 0,09d$ (базовый вариант) до $0,55d$. Коэффициент оребрения, рассчитанный по формуле

$$\varphi = 1 + (D - d) / (sd) \cdot (0,5D - d + \delta),$$

принимал значения от 4,3 до 21, значение коэффициента $\varphi = 21$ соответствует базовому варианту задачи.

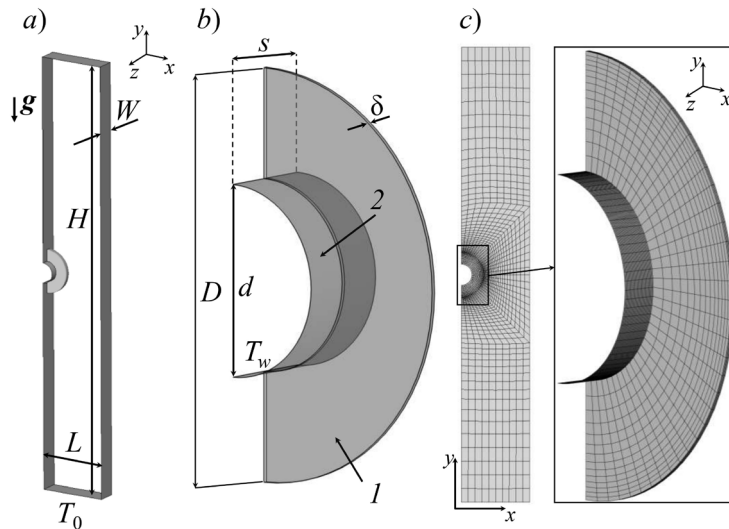


Рис. 1. Схематические изображения к постановке задачи:

a – расчетная область; b – ребро (1) и участок трубы (2), включенный в расчетную область; c – вид расчетной сетки (вариант $s = 0,37d$);

H, L, W – высота, длина и ширина области; d, D – диаметры несущей трубы и кольцевых ребер, соответственно; δ, s – толщина и шаг ребер, соответственно; T_w – температура на поверхностях ребер (и несущей трубы в постановке 1); T_0 – температура на внешних границах расчетной области;

g – вектор гравитационной силы

Начало системы координат расположено на оси трубы, в средней плоскости ребра; ось z направлена вдоль оси трубы, ось y – противоположно гравитационной силе. Предполагается периодичность течения в z -направлении, соответственно в расчетную область включено одно ребро (см. рис. 1). Предполагается также симметрия течения относительно вертикальной плоскости, проходящей через начало координат. Приняты следующие размеры расчетной области: высота $H = 22d$, ширина $W = s$ и длина $L = 3,2d$.

Математическая модель и граничные условия

Численное моделирование свободноконвективного течения выполнено путем решения трехмерных стационарных уравнений Навье – Стокса, дополненных уравнением энергии. Задача решалась в двух постановках:

в несопряженной постановке, когда на поверхностях ребра и несущей трубы задавалась постоянная температура T_w ;

в сопряженной постановке, когда постоянная температура T_w задавалась только на поверхности несущей трубы, и посредством решения уравнения теплопроводности учитывался перенос тепла вдоль ребра.

При проведении расчетов задавались следующие значения физических параметров алюминиевого ребра:

плотность ρ_{Al} , кг/м³, 2719
 коэффициент теплопроводности λ_{Al} , Вт/(м·К), 202,4
 удельная теплоемкость $C_{p,Al}$, Дж/(кг·К), 871,0

В расчетах температуру T_w варьировали в диапазоне от 315 до 506 К. Вдали от трубы (на внешних границах расчетной области) задавалась температура $T_0 = 295$ К. Значение параметра плавучести

$$\varepsilon_T = \beta(T_w - T_0) = \beta\Delta T$$

изменяли в диапазоне от 0,07 до 0,72 ($\beta = 1/T_0$ – коэффициент объемного расширения).

Параметры, характеризующие свойства воздуха, определялись моделью совершенного газа с термодинамическими и теплофизическими свойствами, зависящими от температуры; значение числа Прандтля $Pr = 0,7$.

Параметром, определяющим течение, выступает число Рэлея $Ra = gd^3\varepsilon_T Pr/\nu^2$, значения которого варьировали от $4 \cdot 10^4$ до $2 \cdot 10^7$. Изменение числа Рэлея осуществлялось либо через варьирование параметра плавучести ε_T , либо линейного масштаба задачи d . При этом для диапазона значений числа Ra , изменяющихся на порядок (от $4 \cdot 10^4$ до $4 \cdot 10^5$), были проведены две серии расчетов.

Первая серия: изменение значений числа Ra осуществлялось варьированием величины ε_T (от 0,07 до 0,72) для фиксированной геометрии трубы ($d = d_{base}$);

Вторая серия: при заданном параметре плавучести $\varepsilon_T = 0,07$ варьировали линейный масштаб задачи d (от $1,0d_{base}$ до $1,5d_{base}$).

Вычислительные аспекты

Численные решения получены с использованием пакета ANSYS Fluent версии 2022 года (2022R1) на основе метода конечных объемов со вторым порядком пространственной дискретизации.

Для расчетов использовались квазиструктурированные сетки (см. рис. 1, *c*), состоящие из гексаэдральных элементов; размерность сеток, в зависимости от величины s/d , составляла от 33 до 128 тыс. ячеек. По окружному направлению ребра, сетка состоит из 38 ячеек, вдоль оси трубы – сетка равномерная, размер ячеек равен $0,005d$. Вдоль радиального направления минимальный размер ячейки, расположенной вблизи края ребра, составлял $0,019d$.

Для случая свободноконвективного течения вблизи базовой конфигурации трубы и при задании $\varepsilon_T = 0,72$ выполнена оценка чувствительности решения к сетке, используемой в расчетах. На рис. 2, *a* представлены распределения модуля безразмерной скорости (отнесена к скорости плавучести) вдоль срединной линии ($z = s/2, y = 0$), полученные в

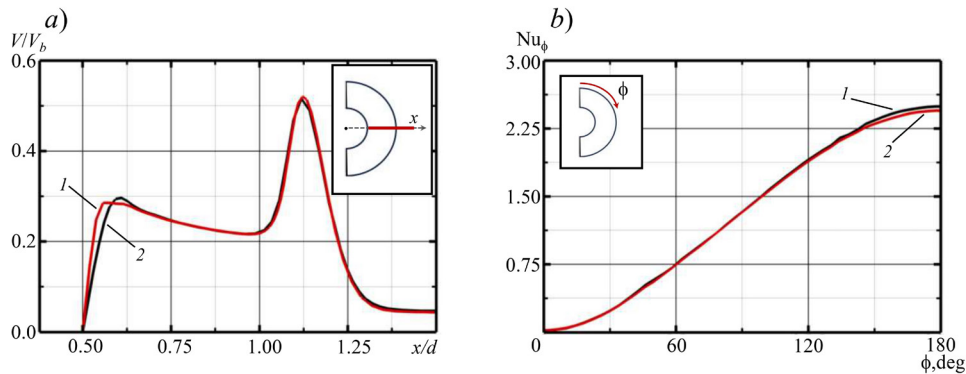


Рис. 2. Результаты оценки чувствительности полученного решения к выбору сетки, используемой в расчетах: *a* – профили безразмерной скорости V/V_b ; *b* – распределения числа Нуссельта Nu_ϕ вдоль окружного направления (вариант $\varepsilon_T = 0,72$; $d = d_{base}$).

Расчетные данные получены на сетках, состоящих из 33 тыс. (кривые 1) и 204 тыс. (кривые 2) ячеек

расчетах с использованием сеток размерностью в 33 тыс. и 204 тыс. ячеек. Соответствующее значение скорости плавучести $V_b = (g\varepsilon_T d)^{1/2}$ в этом случае составило 0,43 м/с. На рис. 2, *b* приведены данные о значениях числа Нуссельта

$$Nu_\phi = \langle q_w \rangle_\phi \cdot d / (\lambda_0 \Delta T),$$

где $\langle q_w \rangle_\phi$, Вт/м², – тепловой поток, осредненный по радиальному направлению; λ_0 – коэффициент теплопроводности, определенный по температуре окружающей среды, $\lambda_0 = 0,026$ Вт/(м·К).

Указанное число Нуссельта имеет значения, осредненные по радиальному направлению ребра.

Окружная координата, показанная на графике, отсчитывается по часовой стрелке от верхней (тыльной) части ребра, где $\phi = 0^\circ$. Видно, что решения, полученные на исходной сетке и сетке с числом ячеек, увеличенным в два раза по каждому направлению, различаются незначительно.

Структура течения и характеристики теплообмена при изменении шага ребер

Структура потока в межреберном пространстве, рассчитанного для различных значений шага ребер s/d при фиксированных значениях параметра плавучести $\varepsilon_T = 0,72$ и диаметра несущей трубы $d = d_{base}$, показана на рис. 3 (верхний ряд). Распределения модуля безразмерной скорости, отнесенной к скорости плавучести V_b , показаны в срединной плоскости межреберного пространства ($z = s/2$).

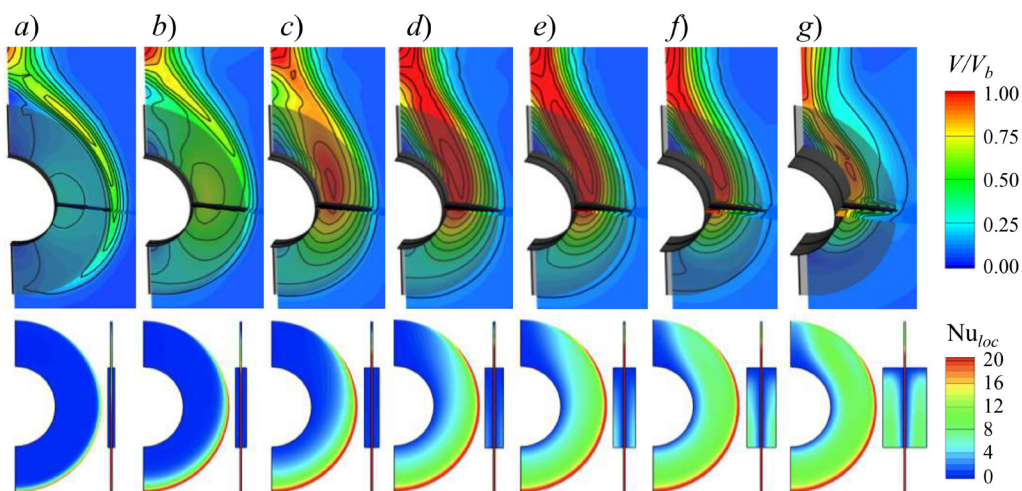


Рис. 3. Рассчитанные поля скорости в плоскости $z = s/2$ (верхний ряд) и локального числа Нуссельта на поверхностях ребра и основания трубы (нижний ряд) для различных значений шага s/d : 0,09 (*a*), 0,14 (*b*), 0,18 (*c*), 0,23 (*d*), 0,28 (*e*), 0,37 (*f*) и 0,55 (*g*); параметр плавучести $\varepsilon_T = 0,72$, диаметр несущей трубы $d = d_{base}$

Видно, что для всех рассмотренных вариантов реализуется подъемное вертикальное течение воздуха под действием сил плавучести. При наименьшем значении $s/d = 0,09$ течение воздуха в пространстве между ребрами характеризуется относительно низкими значениями скорости. Характерные значения скорости в этой области не превышают $0,27V_b$, что втрое меньше, чем значения скорости, наблюдаемые в области движения потока вблизи края ребра. По мере увеличения s/d , в пространство между ребрами проникает больше воздуха, характерные значения скорости возрастают и становятся близкими к V_b . Для вариантов со значением s/d свыше 0,28 характерные скорости в межреберном пространстве постепенно снижаются.

На рис. 3 (нижний ряд) приведены распределения значений локального числа Нуссельта

$$Nu_{loc} = q_{w,loc} d / (\lambda_0 \Delta T)$$

по поверхности ребра и основания трубы для вариантов с разными значениями s/d . Анализ представленных распределений позволяет заключить, что при натекании холодного воздуха на нижнюю часть ребра, во всех случаях в этой области образуется локальный максимум Nu_{loc} . Кроме того, на основании данных на рис. 3, *b* следует отметить низкую эффективность ребра для варианта трубы с шагом $s/d = 0,09$: теплосъем осуществляется в основном с периферии ребра. Для вариантов с увеличенными значениями шага s/d теплосъем с поверхности ребра возрастает. Вклад основания трубы в общий теплосъем увеличивается с ростом значения s/d и для шага $s/d = 0,55$ достигает 12%.

Для различных значений шага s/d на рис. 4 показаны профили безразмерного модуля скорости V/V_b и безразмерной температуры

$$\theta = (T - T_0) / (T_w - T_0)$$

вдоль линии $y = 0$, расположенной в центральном сечении межреберного пространства $z = s/2$. Видно, что максимальные значения скорости в межреберном пространстве достигаются при значении $s/d = 0,23$. Температура θ в межреберном пространстве для варианта с минимальным значением $s/d = 0,09$ близка к температуре основания трубы. По мере увеличения шага ребер s/d температура в межреберном пространстве снижается.

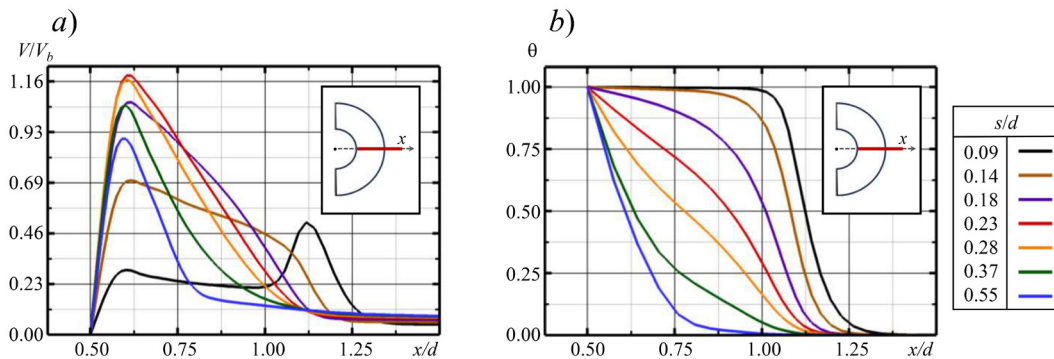


Рис. 4. Расчетные профили безразмерной скорости V/V_b (a) и температуры θ (b) в межреберном пространстве для различных значений шага s/d

На рис. 5, *a* показаны распределения локального числа Нуссельта Nu_{loc} вдоль вертикального направления при значении окружной координаты $\phi = 180^\circ$. На графиках используется безразмерная координата

$$y' = 2(D/2 + y) / (D - d),$$

которая отсчитывается от края ребра ($y' = 0$) до места сочленения ребра и несущей трубы ($y' = 1$). Для вариантов с шагами ребер $s/d = 0,09$ и $0,14$ существенный вклад в теплопередачу вносит нижняя часть ребра. Так, для варианта задачи с шагом $s/d = 0,09$ только 20% высоты ребра значительно отводит тепло, а для варианта с $s/d = 0,14$ – менее 50% от высоты ребра. При больших значениях s/d наблюдается слабая зависимость числа Nu от шага ребра. Для этих вариантов область ребра с наиболее эффективной теплоотдачей составляет 10% от высоты ребра.

На рис. 5, *b* показаны распределения вдоль окружного направления числа Нуссельта Nu_ϕ . Видно, что для всех вариантов верхняя часть ребра ($\phi < 60^\circ$) малоэффективна и в данной области осуществляется низкий теплосъем. Значения числа Нуссельта максимальны в нижней части ребра, при $\phi > 60^\circ$. С увеличением значений s/d локальные значения Нуссельта возрастают, и при шаге ребер $s/d = 0,37$ значения Nu слабо изменяются при дальнейшем увеличении величины s/d .

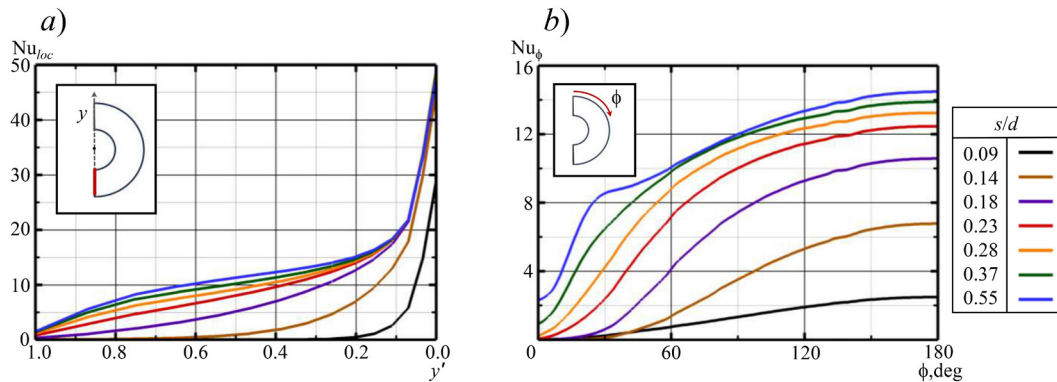


Рис. 5. Распределения локального числа Нуссельта Nu_{loc} вдоль радиального направления при $\phi = 180^\circ$ (a) и числа Нуссельта Nu_ϕ вдоль окружного направления (число осреднено по радиальному направлению ребра) (b)

На рис. 6, a показана зависимость эффективности ребра η_f от шага ребер s/d , полученная при значении параметра плавучести $\epsilon_T = 0,72$. Величина η_f определена как отношение интегральных тепловых потоков $Q/Q_{T=const}$, снимаемых с теплоотводящей поверхности трубы, полученных в сопряженной постановке (величина Q) и несопряженной ($Q_{T=const}$). Для вариантов с различными значениями s/d эффективность ребра остается на высоком уровне и составляет не менее 96%. Отметим, что по результатам расчетов при меньших значениях числа Рэлея наблюдается аналогичная картина. В целом же, решения, полученные в сопряженной и в несопряженной постановках, близки.

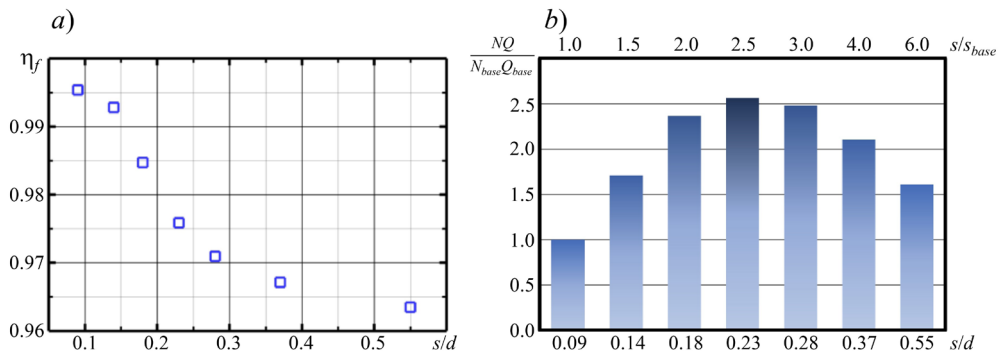


Рис. 6. Расчетные зависимости эффективности ребра (a) и эффективной теплоотдачи с трубы единичной длины (b) от шага ребер s/d ($\epsilon_T = 0,72$)

Таблица 1

Расчетная зависимость теплосъема с трубы конечной длины от шага ребер

s/d	0,09	0,14	0,18	0,23	0,28	0,37	0,55
N	411	273	205	164	137	102	68
Q , кВт	0,45	0,78	1,07	1,16	1,12	0,96	0,73

Обозначения: Q – интегральный тепловой поток, снимаемый с трубы длиной 1 м; N , s/d – количество и шаг ребер.

В табл. 1 для вариантов с различными значениями s/d представлена величина тепло-съемы (интегральный тепловой поток), снимаемая с оребренной трубы, длина которой составляет 1 м. Также на рис. 6, b показана оценка эффективной теплоотдачи для вариантов с разными межреберными шагами s/d . Здесь N_{base} , Q_{base} , s_{base} – количество ребер, интегральный тепловой поток и шаг ребер, полученные для базовой конфигурации трубы с минимальным значением $s/d = 0,09$.

Анализ данных табл. 1 и рис. 6, b позволяет заключить, что оптимальным (из рассмотренных) значением шага ребер оказалось $s/d = 0,23$; при нем достигается наибольший теплосъем с рассматриваемой трубы. Что же касается конфигурации трубы с наименьшим значением шага $s/d = 0,09$, то эффективная теплоотдача при $s/d = 0,23$ увеличилась в 2,5 раза. При этом конструкция трубы включает меньшее число ребер (164 : 411). Полученное оптимальное значение межреберного шага близко к приведенному в работах [7, 11 – 13], где для схожих геометрических параметров оребренной трубы (D/d лежит в интервале от 1,41 до 5,02) полученные оптимальные значения s/d находятся в диапазоне от 0,20 до 0,35.

Теплоотдача с поверхности труб при различных значениях числа Рэлея

Как отмечалось выше, изменение значений числа Рэлея можно осуществлять либо путем изменения параметра плавучести ϵ_T , либо путем изменения линейного масштаба задачи d . При значениях параметра плавучести ϵ_T свыше 0,1, для получения достаточно точных результатов следует учитывать зависимость теплофизических свойств среды от температуры. Выбор температуры среды T_{ref} , при которой определяются ее свойства для вычисления определяющих и определяемых параметров задачи (чисел подобия), – неоднозначен. В табл. 2 (см. первые три строки) приведены различные варианты определения величины T_{ref} , использованные разными авторами. Относительно часто (см., например, работы [6, 7]) в качестве T_{ref} выбирается среднеарифметическое значение температуры между окружающей средой и нагретой поверхностью (вторая строка табл. 2). В работе [8], применительно к оребренным трубам, в качестве T_{ref} автор статьи использовал более сложную величину (третья строка табл. 2), которая с несколько большим весом учитывает температуру нагретой поверхности. В статьях [9, 10], при представлении обобщающих данных о теплоотдаче с поверхности оребренных труб, для оценки теплофизических свойств воздуха использовалась температура окружающей среды T_0 . В настоящей же работе, кроме того, рассмотрен предельный случай, когда T_{ref} полагается равным T_w (последняя строка табл. 2), с учетом того, что значения температуры близки к T_w почти во всем межреберном пространстве (см. рис. 3, b).

Таблица 2

Варианты выбора температуры среды T_{ref} разными авторами для определения теплофизических свойств этой среды

Температура T_{ref}	Источник
T_0	[9, 10] (I)
$0,5(T_0 + T_w)$	[6, 7] (II)
$T_w - 0,38(T_w - T_0)$	[8] (III)
T_w	Наша работа (IV)

Обозначения: T_0 , T_w – температуры окружающей среды и нагретой поверхности, соответственно.

Примечание. В данном исследовании были протестированы все представленные здесь варианты (I – IV).

В настоящей работе расчетные данные по среднему тепловому потоку $\langle q_w \rangle$, полученные для базовой конфигурации трубы $d = d_{base}$ с фиксированным шагом $s/d = 0,09$, были обработаны с использованием всех известных оценок T_{ref} (см. табл. 2), применяемых в ходе определения теплофизических параметров (ρ , μ , λ , C_p), которые необходимы для вычисления числа Рэлея и среднего числа Нуссельта.

На рис. 7 представлены четыре расчетные зависимости числа Нуссельта

$$Nu = \langle q_w \rangle d / (\lambda \Delta T)$$

от числа Рэлея Ra , где были использованы все варианты оценок величины T_{ref} (см. табл. 2). Анализ графика позволяет заключить, что выбор T_{ref} существенно влияет как на диапазон изменения оцениваемых значений числа Ra (расширяет его в 12 раз), так и на диапазон изменения числа Нуссельта Nu (в 3 раза).

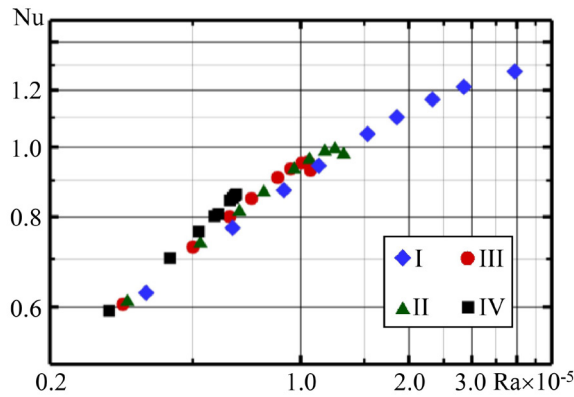


Рис. 7. Зависимости интегрального числа Нуссельта Nu от числа Рэлея Ra , построенные для базовой конфигурации трубы при вычислении физических параметров среды с использованием разных оценок температуры T_{ref} (см. табл. 2)

Описанные выше данные по интегральному числу Нуссельта, полученные для базовой конфигурации трубы $d = d_{base}$ при варьировании перепада температур, далее сопоставляются с результатами решения аналогичной задачи с изменением диаметра несущей трубы d от $1,0d_{base}$ до $1,5d_{base}$ при фиксированном значении параметра плавучести $\epsilon_T = 0,07$; при таком значении ϵ_T теплофизические свойства среды в области исследуемого течения не претерпевают существенных изменений. Для данной серии расчетов шаг ребра s/d полагали равным 0,09 или 0,23. Расчетные сетки создавались путем простого линейного масштабирования исходной сетки. Анализ полученных решений показал, что структура течения вблизи трубы и такие характеристики теплообмена, как распределения скорости, температуры и локальной теплоотдачи в безразмерном виде, аналогичны представленным выше результатам (см. рис. 2 – 5 и их обсуждение).

Ниже представлены и обсуждаются лишь наиболее интересные результаты сопоставления интегральных параметров теплоотдачи.

На рис. 8 показаны зависимости интегрального числа Нуссельта Nu от числа Рэлея Ra , значение которого изменяется как вследствие варьирования ϵ_T (при фиксированном $d = d_{base}$), так и при варьировании линейного размера задачи (при фиксированном $\epsilon_T = 0,07$).

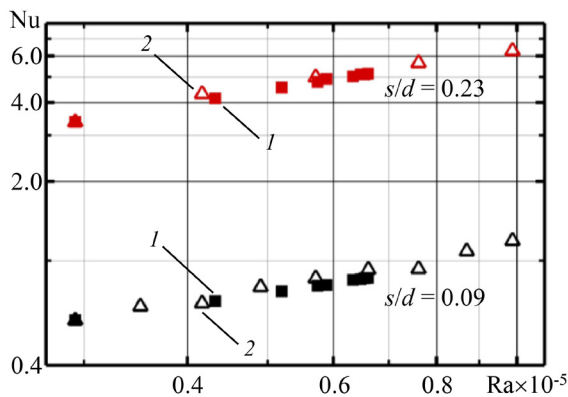


Рис. 8. Зависимости интегрального числа Нуссельта Nu от числа Рэлея Ra (при $T_{ref} = T_w$) для вариантов трубы со значениями шага ребра s/d , равными 0,09 и 0,23.

Значения Ra разнятся вследствие варьирования параметра плавучести ϵ_T при $d = d_{base}$ (символы 1) и диаметра несущей трубы d при $\epsilon_T = 0,07$ (символы 2)

В данном случае в качестве T_{ref} всегда принималась температура поверхности несущей трубы T_w . На графиках можно видеть, что при обоих значениях шага ребра зависимости числа Nu от числа Ra практически совпадают. Это говорит о целесообразности использования величины T_w (температура поверхности несущей трубы) в качестве T_{ref} при обработке данных, полученных для оребренных труб с малым шагом установки ребер.

На рис. 9 показано изменение интегрального числа Нуссельта, рассчитанного для расширенного диапазона значений числа Рэлея (до $2 \cdot 10^7$) при задании оптимального шага ребер $s/d = 0,23$ и $\epsilon_T = 0,07$. Изменение числа Рэлея достигалось путем варьирования диаметра несущей трубы d от $1,0d_{base}$ до $9,2d_{base}$. Видно, что в диапазоне значений числа Ra от $1 \cdot 10^5$ до $2 \cdot 10^7$ значения числа Nu изменяются по степенному закону

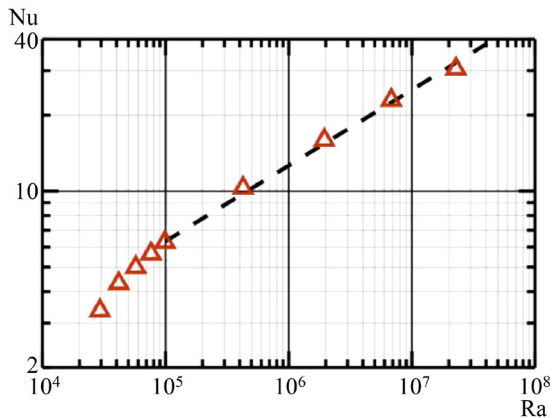


Рис. 9. Зависимость интегрального числа Нуссельта Nu от числа Рэлея Ra при шаге ребер $s/d = 0,23$. Значения Ra разнятся вследствие изменения линейного масштаба задачи. Параметр плавучести $\varepsilon_T = 0,07$. Зависимость аппроксимируется функцией (1) (показана штриховой линией)

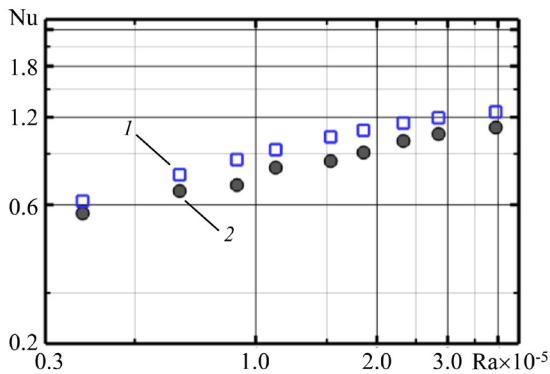


Рис. 10. Сопоставление наших расчетных результатов (символы 1) с экспериментальными данными из статей [9, 10] (символы 2) по зависимостям интегрального числа Нуссельта Nu от числа Рэлея Ra при $s/d = 0,09$ и при условии $T_{ref} = T_0$

$$Nu = A Ra^n, \quad (1)$$

где $n = 0,3$ и $A = 0,2$ (соответствующая кривая отмечена на рис. 9 штриховой линией).

Сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными

Расчеты течения и теплообмена для базовой конфигурации трубы с наименьшим шагом ребер $s/d = 0,09$ учитывали условия экспериментов, проведенных в работах [9, 10] с использованием деревянной камеры в форме параллелепипеда ($0,8 \times 0,8 \times 1,0$ м), имеющего две открытые границы (нижняя и верхняя). В камеру помещалась оребренная труба с длиной теплоотдающей части, равной 300 мм; температуру трубы повышали электронагревателем мощностью от 10 до 220 Вт. На поверхности трубы температура T_w измерялась с помощью термопар. В статьях [9, 10] приведены экспериментальные зависимости интегрального числа Нуссельта от числа Рэлея, полученные при $T_{ref} = T_0$, т.е. при выборе температуры окружающей среды T_0 в качестве величины T_{ref} .

На рис. 10 сопоставляются экспериментальные (из статей [9, 10]) и расчетные значения числа Нуссельта. Расчетные данные нами также обрабатывались при условии $T_{ref} = T_0$. Приведенное на рис. 10 сопоставление позволяет заключить, что в целом достигнуто хорошее соответствие расчетных данных с экспериментальными: расхождение не превышает 13%. Различия могут быть связаны как с упрощенной конфигурацией расчетной области (она не учитывала бокового подтекания воздушной среды с торцевых частей трубы), так и с погрешностью экспериментальных данных.

Заключение

В работе численно исследовано свободноконвективное течение воздуха около одиночной горизонтальной оребренной трубы. Рассмотрены варианты задач со значениями числа Рэлея $2 \cdot 10^7$ и ниже.

Установлено, что увеличение шага ребер, отнесенного к диаметру несущей трубы (s/d) от 0,09 до 0,55, приводит к существенной интенсификации течения воздуха в межреберном пространстве. Определено межреберное расстояние, при котором наблюдается максимальная теплоотдача: оптимальное значение величины s/d составило 0,23.

Для диапазона значений числа Рэлея, изменяющихся на порядок (до $7 \cdot 10^4$), показана целесообразность использования температуры поверхности несущей трубы T_w в качестве T_{ref} при обработке данных для оребренных труб с малым шагом установки ребер. В этом случае зависимости числа Нуссельта от числа Рэлея, полученные при варьировании либо параметра плавучести в широком диапазоне, либо линейного масштаба задачи, практически совпадают.

Показана хорошая согласованность расчетных результатов с доступными в литературе экспериментальными данными как по значению оптимального межреберного расстояния, так и по интегральным значениям числа Нуссельта в рассмотренном диапазоне чисел Рэлея.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Elenbaas W.** Heat dissipation of parallel plates by free convection // *Physica*. 1942. Vol. 9. No. 1. Pp. 1–28.
2. **Levy E. K.** Optimum plate spacings for laminar natural convection heat transfer from parallel vertical isothermal flat plates // *Journal of Heat Transfer*. 1971. Vol. 93. No. 4. Pp. 463–465.
3. **Kim T. H., Do K. H., Kim D.-K.** Closed form correlations for thermal optimization of plate-fin heat sinks under natural convection // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2011. Vol. 54. No. 5–6. Pp. 1210–1216.
4. **Zamora B., Kaiser A. S.** Optimum wall-to-wall spacing in solar chimney shaped channels in natural convection by numerical investigation // *Applied Thermal Engineering*. 2009. Vol. 29. No. 4. Pp. 762–769.
5. **Sparrow E. M., Bahrami P. A.** Experiments on natural convection heat transfer on the fins of a finned horizontal tube // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 1980. Vol. 23. No. 11. Pp. 1555–1560.
6. **Hahne E., Zhu D.** Natural convection heat transfer on finned tubes in air // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 1994. Vol. 37. No. 1. Pp. 59–63.
7. **Yildiz Ş., Yüncü H.** An experimental investigation on performance of annular fins on a horizontal cylinder in free convection heat transfer // *Heat and Mass Transfer*. 2004. Vol. 40. No. 3–4. Pp. 239–251.
8. **Kayansayan N.** Thermal characteristics of fin-and-tube heat exchanger cooled by natural convection // *Experimental Thermal and Fluid Science*. 1993. Vol. 7. No. 3. Pp. 177–188.
9. **Сухоцкий А. Б., Фарафонов В. Н., Филатов С. О., Сидорик Г. С.** Разработка стенда и исследование свободной конвекции одиночной оребренной трубы при различных углах наклона // *Труды БГТУ (Белорусского государственного технического университета)*. 2017. Серия 1. № 1 (192). С. 169–175.
10. **Сухоцкий А. Б., Сидорик Г. С.** Интенсификация свободной конвекции в однорядном оребренном пучке в аппаратах воздушного охлаждения // *Труды БГТУ*. 2017. Серия 2. № 1 (193). С. 68–74.
11. **Dogan A., Akkus S., Baskaya Ş.** Numerical analysis of natural convection heat transfer from annular fins on a horizontal cylinder // *Isı Bilimi ve Tekniği Dergisi / Journal of Thermal Science and Technology*. 2012. Vol. 32. No. 2. Pp. 31–41.
12. **Wong S.-C., Lee W.-Y.** Numerical study on the natural convection from horizontal finned tubes with small and large fin temperature variations // *International Journal of Thermal Sciences*. 2019. Vol. 138. April. Pp. 116–123.
13. **Senapati J. R., Dash S. K., Roy S.** Numerical investigation of natural convection heat transfer over annular finned horizontal cylinder // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2016. Vol. 96. May. Pp. 330–345.

REFERENCES

1. **Elenbaas W.**, Heat dissipation of parallel plates by free convection, *Physica*. 9 (1) (1942) 1–28.
2. **Levy E. K.**, Optimum plate spacings for laminar natural convection heat transfer from parallel vertical isothermal flat plates, *J. Heat Transf.* 93 (4) (1971) 463–465.
3. **Kim T. H., Do K. H., Kim D.-K.**, Closed form correlations for thermal optimization of plate-fin heat sinks under natural convection, *Int. J. Heat Mass Transf.* 54 (5–6) (2011) 1210–1216.
4. **Zamora B., Kaiser A. S.**, Optimum wall-to-wall spacing in solar chimney shaped channels in natural convection by numerical investigation, *Appl. Therm. Eng.* 29 (4) (2009) 762–769.
5. **Sparrow E. M., Bahrami P. A.**, Experiments on natural convection heat transfer on the fins of a finned horizontal tube, *Int. J. Heat Mass Transf.* 23 (11) (1980) 1555–1560.

6. Hahne E., Zhu D., Natural convection heat transfer on finned tubes in air, *Int. J. Heat Mass Transf.* 37 (1) (1994) 59–63.
7. Yildiz Ş., Yüncü H., An experimental investigation on performance of annular fins on a horizontal cylinder in free convection heat transfer, *Heat Mass Transf.* 40 (3–4) (2004) 239–251.
8. Kayansayan N., Thermal characteristics of fin-and-tube heat exchanger cooled by natural convection, *Exp. Therm. Fluid Sci.* 7 (3) (1993) 177–188.
9. Sukhotskiy A. B., Farafontov V. N., Filatov S. O., Sidorik G. S., Stand development and research of free convection for single finned tube for different rake angle, *Proc. BSTU. Ser. 1 (1(192))* (2017) 169–175 (in Russian).
10. Sukhotskii A. B., Sidorik G. S., Intensification of free convection in a single row finned bunch in air cooler heat exchangers, *Proc. BSTU. Ser. 2 (1(193))* (2017) 68–74 (in Russian).
11. Dogan A., Akkus S., Baskaya Ş., Numerical analysis of natural convection heat transfer from annular fins on a horizontal cylinder, *Isı Bilimi ve Tekniği Dergisi / J. Therm. Sci. Technol.* 32 (2) (2012) 31–41.
12. Wong S.-C., Lee W.-Y., Numerical study on the natural convection from horizontal finned tubes with small and large fin temperature variations, *Int. J. Therm. Sci.* 138 (April) (2019) 116–123.
13. Senapati J. R., Dash S. K., Roy S., Numerical investigation of natural convection heat transfer over annular finned horizontal cylinder, *Int. J. Heat Mass Transf.* 96 (May) (2016) 330–345.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АГЕЕВ Даниил Эдуардович – студент Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ageev2de@gmail.com

ЗАСИМОВА Марина Александровна – 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
zasimova_ma@mail.ru
ORCID: 0000-0002-4103-6574

THE AUTHORS

AGEEV Daniil E.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ageev2de@gmail.com

ZASIMOVA Marina A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
zasimova_ma@mail.ru
ORCID: 0000-0002-4103-6574

Статья поступила в редакцию 17.08.2025. Одобрена после рецензирования 20.10.2025. Принята 20.10.2025.

Received 17.08.2025. Approved after reviewing 20.10.2025. Accepted 20.10.2025.

Краткое сообщение
УДК 535.3, 004.353.254.5
DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19107>

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЭКСТРАКЦИИ СВЕТА ИЗ НИТЕВИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ ФОСФИДА ГАЛЛИЯ, ИНТЕГРИРОВАННЫХ С ЗОЛОТОЙ НАНОЧАСТИЦЕЙ

К. Н. Новикова^{1,2} , А. С. Фунтикова^{1,2},
А. М. Можаров¹, И. С. Мухин^{1,2}

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

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

 novikova_k@spbau.ru

Аннотация. С целью развития технологии изготовления нитевидных нанокристаллов GaP (ННК GaP), интегрированных с Au-наночастицами, перспективных для создания микросветодиодов красного диапазона, проанализирована эффективность экстракции света из ННК GaP как с золотой наночастицей, так и без нее. Кроме того, была исследована связь указанной эффективности с расположением активной области в светодиодной гетероструктуре «ядро-оболочка». При этом применялось полноволновое оптическое численное моделирование распространения света с помощью пакета «COMSOL Multiphysics» в модуле «Wave Optics». Исследованная система состояла из кремниевой подложки в воздушной среде и прикрепленного к ней ННК с Au-наночастицей. В качестве источника излучения была использована имитация оптического точечного диполя. Показано, что наличие Au-наночастицы приводит к существенному (примерно на 12%) повышению эффективности экстракции света вследствие локализованного плазмонного резонанса и усиления ближнего электрического поля в области контакта частицы с нанокристаллом.

Ключевые слова: фосфид галлия, GaAsPN, наночастица золота, гибридная наноструктура, эффективность экстракции света

Финансирование: Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования (грант государственного задания FSEG-2024-0017).


Для цитирования: Новикова К. Н., Фунтикова А. С., Можаров А. М., Мухин И. С., Численное исследование эффективности экстракции света из нитевидных нанокристаллов фосфида галлия, интегрированных с золотой наночастицей // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 83–90. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19107>

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

Brief communication

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19107>

NUMERICAL STUDY OF THE LIGHT EXTRACTION EFFICIENCY FROM GALLIUM PHOSPHIDE NANOWIRES INTEGRATED WITH A GOLD NANOPARTICLE

К. Н. Novikova^{1,2} , А. С. Funtikova^{1,2},
А. М. Mozharov¹, I. S. Mukhin^{1,2}

¹ Alferov University of RAS, St. Petersburg, Russia;

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

 novikova_k@spbau.ru

Abstract. In order to develop the fabrication technology of GaP nanowires (NWs) integrated with Au nanoparticles (NPs), i.e., of an object promising for creating red-range micro-LEDs, its light extraction efficiency has been analyzed both with and without the Au NP. Moreover, the relationship between this efficiency and the position of the active region within the core-shell LED heterostructure was investigated. In this case the full-wave optical numerical simulation of light propagation using the "COMSOL Multiphysics" software package, specifically the "Wave Optics" module, was performed. The system under study included a silicon substrate in the aerial environment with the object (GaP NW + Au NP) clamped to. An imitation of an optical point dipole was taken as a radiation source. The presence of the Au nanoparticle was shown to lead to a significant increase (of approximately 12%) in light extraction efficiency due to localized surface plasmon resonance and the enhancement of the near electric field in the contact area of the Au particle with the nanocrystal.

Keywords: gallium phosphide, GaAsPN, gold nanoparticle, hybrid nanostructure, light extraction efficiency

Funding: The reported study was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (State Assignment Grant No. FSEG-2024-0017).

For citation: Novikova K. N., Funtikova A. S., Mozharov A. M., Mukhin I. S., Numerical study of the light extraction efficiency from gallium phosphide nanowires integrated with a gold nanoparticle, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (1) (2026) 83–90. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19107>

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

Введение

Проведение синтеза фосфида галлия на кремниевых подложках позволяет создавать недорогие оптические устройства, совместимые с хорошо освоенными кремниевыми технологиями. Благодаря высокому показателю преломления фосфид галлия может выступать в качестве волновода для видимого излучения, а возможность синтеза прямозонных твердых растворов GaAsPN делает этот материал перспективным для создания светоизлучающих устройств.

Нитевидные нанокристаллы (ННК) вызывают особый практический интерес, ввиду эффективной релаксации в них упругих напряжений, не сопровождаемых образованием структурных дефектов; эта их особенность позволяет сохранять высокое кристаллическое качество синтезированных структур. В связи с этим развивается с нарастающей силой синтез ННК фосфида галлия методом молекулярно-пучковой эпитаксии, который относится к подходам «снизу-вверх». Такие подходы подразумевают сборку наноструктур из атомов или молекул. Метод молекулярно-пучковой эпитаксии позволяет выращивать нано- и микроструктуры необходимой геометрии и состава на разных подложках, в том числе и рассогласованных по параметру кристаллической решетки с синтезируемой структурой. Как было показано в статье [1], указанный подход позволяет создавать структуры «ядро-оболочка» с разным типом легирования. Такие особенности позволяют перейти к созданию микросветодиодов нового поколения на основе ННК фосфида галлия GaP. Микросветодиоды перспективны как с практической, так и с чисто научной точки зрения. Требования к размерам светодиодов различны и зависят от их назначения. В частности, для носимой электроники и дисплеев телефонов актуальны размеры порядка 5 – 50 мкм [2 – 4]; при том, что для высокого разрешения в системах виртуальной/дополненной реальности пользуются спросом светодиоды размером 1 – 5 мкм. При миниатюризации планарных устройств по технологии «сверху-вниз», которая заключается в травлении полупроводниковых слоев, происходит возникновение дефектов в активной области светодиода, что ведет к снижению внешней квантовой эффективности. Такого снижения можно избежать, если использовать ННК с гетероструктурой типа «ядро-оболочка», обладающей активной областью, закрытой от внешнего воздействия. В этом случае наноразмерное разрешение светодиода достигается благодаря естественной

геометрии ННК, формируемой в процессе роста. На рис. 1, *a* представлено схематическое изображение *p-i-n*-гетероструктуры ядро-оболочка на основе ННК GaP/GaAsPN/GaP.

Известно, что наличие локализованного плазмонного резонанса, связанного с наночастицами благородных металлов, и его чувствительность к окружающей среде, форме и размерам наночастиц находят широкое применение в сенсорике и медицине. При этом локальное усиление электрического поля в наночастице на частоте локализованного плазмонного резонанса способствует повышению уровня оптической накачки и ускорению излучательной рекомбинации исходной полупроводниковой структуры; а плазмон-индуцированная генерация горячих электронов в металлических наночастицах обеспечивает дополнительный транспорт и накопление носителей заряда в полупроводнике. Таким образом, интеграция металлических наночастиц с полупроводниковыми соединениями

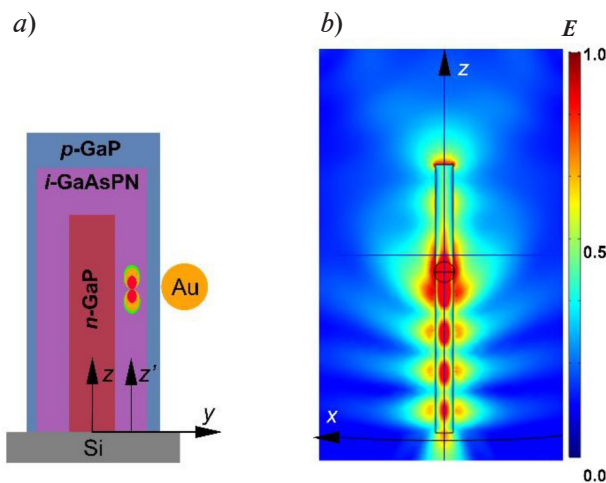


Рис. 1. Графическое представление сечений объекта исследования в двух плоскостях: *a* – схематическое изображение ННК структуры GaP/GaAsPN/GaP с закрепленной золотой частицей (показано примерное расположения диполя в расчете); *b* – распределение напряженности электрического поля по исследуемой системе (в нормированных единицах)

позволяет повысить эффективность устройств на их основе [5, 6]. Однако светодиоды на основе ННК GaP со структурой ядро-оболочка, интегрированные с наночастицами золота Au, и их оптические свойства на сегодняшний день остаются практически неизученными и пробуждают особый интерес для множества приложений.

Цели настоящей работы – анализ зависимости эффективности экстракции света (Light Extraction Efficiency (LEE)) из микросветодиодов на основе нитевидных нанокристаллов фосфида галлия при модернизации их поверхности наночастицами Au, а также выявление связи LEE с расположением активной области светодиодной гетероструктуры ядро-оболочка на основе ННК GaP/GaAsPN/GaP.

Для достижения поставленных целей было проведено численное моделирование изучаемой системы с помощью пакета “COMSOL Multiphysics”.

Материалы и методы

Для оценки изменения эффективности экстракции света при наличии наночастицы золота на поверхности светодиода было проведено полноволновое оптическое моделирование распространения света с помощью пакета “COMSOL Multiphysics” в модуле “Wave Optics”. Исследуемая система состояла из кремниевой подложки в воздушной среде и прикрепленного к ней ННК с наночастицей золота.

В качестве источника излучения был использован оптический точечный диполь, который представляет собой стандартную (и хорошо себя зарекомендовавшую) модель для имитации локального электрического диполя, возникающего при излучательной рекомбинации электронно-дырочной пары в квантовой яме или активной области полупроводника. Ориентация и положение диполя варьировались в ходе расчета. Необходимость варьирования угла поляризации диполя обусловлена тем, что в реальной активной области ориентация дипольного момента рекомбинирующих пар может оказаться случайной. Расчет же для разных ориентаций позволяет усреднить результаты и получить тем самым наиболее реалистичный вариант.

Схематическое изображение системы в сечении *zy* представлено на рис. 1, *a*. В качестве аналога активной области в структуре типа ядро-оболочка брался оптический точечный диполь, расположенный на оси *z'*, смещенной по оси *y*. Под активной областью светодиода в данном исследовании подразумевается нелегированный слой структуры *i*-GaAsPN

в составе $p-i-n$ -гетероструктуры ядро-оболочка. Эта активная область служит потенциальной ямой для носителей заряда, где происходит их излучательная рекомбинация с испусканием фотонов. Поскольку реальная толщина i -го слоя в нанокристалле мала, его влияние на оптические свойства структуры моделировалось с использованием точечного электрического диполя (это стандартный подход при численном анализе излучения в наноразмерных полупроводниковых структурах). Перемещение активной области в процессе численного моделирования соответствовало смещению позиции диполя вдоль оси y , что имитировало расположение i -го слоя ближе или дальше от боковой поверхности ННК. Такое смещение реализуется технологически путем регулировки момента осаждения материала активной области при выращивании нанокристалла методом молекулярно-пучковой эпитаксии.

Длина и диаметр ННК были фиксированными и составляли 3,0 и 0,2 мкм, соответственно; выбор основывался на результатах, полученных нами в предыдущих работах [7, 8] и опубликованных экспериментальных данных. Диэлектрическая проницаемость кремния, фосфида галлия и золота была взята из статей [9 – 11]. Для подавления нефизических отражений от границ расчетной области и имитации бесконечного открытого пространства со всех сторон, кроме границы с подложкой, был использован идеально согласованный слой (*англ.* Perfectly Matched Layer (PML)).

Моделирование заключалось в решении уравнений Максвелла в частотной области для длины волны 650 нм, которая не только характерна для красных светодиодов, но и соответствует предполагаемой ширине запрещенной зоны для твердого раствора GaAsPN [12, 13]. Эффективность LEE определялась как отношение мощности потока вектора Пойнтинга через верхнюю контрольную поверхность (расположена над структурой) к полной мощности, излучаемой диполем.

Важно отметить, что результаты данного расчета, выполненного для фосфида галлия, можно экстраполировать на структуры с GaAsPN, поскольку качественное поведение системы должно быть аналогичным благодаря близости оптических параметров этих материалов. Ключевой же волноводный эффект в ННК обеспечивается контрастом между высоким значением показателя преломления всего кристалла ($n_{\text{GaP}} \approx 3,4$) и воздушной окружающей средой ($n_{\text{air}} \approx 1,0$).

Результаты и их обсуждение

В результате полноволнового оптического моделирования распределения света были получены следующие данные: нормированное распределение напряженности электрического поля в исследуемой системе, а также зависимость эффективности экстракции света от радиуса наночастицы. Кроме того, было найдено оптимальное смещение положения точечного диполя относительно частицы. В расчетах варьировался угол поляризации диполя для каждой геометрической конфигурации и определялась доля мощности электромагнитной волны, излучаемой диполем, поступившая в верхнюю плоскость исследуемой системы. Типичное распределение амплитуды напряженности электрического поля при фиксированной конфигурации диполя и позиции золотой наночастицы показано на рис. 1, *b*. Это распределение дает представление об увеличении локализации электрического поля вокруг наночастицы, а также о преимущественном выводе излучения через верхнюю грань ННК.

В результате численного моделирования была определена зависимость эффективности экстракции света в вертикальном направлении от радиуса НЧ золота в диапазоне от 25 до 200 нм (рис. 2, *a*) при смещении диполя по оси y на 50 нм. Нулевая точка на графике соответствует числовому расчету в отсутствие Au-наночастицы при положении диполя, смещенного по оси y . Позиция диполя по оси z' была выбрана в максимуме нормы напряженности электрического поля (см. нашу работу [7]). Немонотонная зависимость эффективности LEE от радиуса наночастицы (см. рис. 2, *a*) типична для плазмонных систем и обусловлена резонансным характером взаимодействия.

При определенном размере наночастицы золота частота ее локализованного плазмонного резонанса согласуется наилучшим образом с рабочей длиной волны диполя (650 нм). Такое оптимальное согласование способствует максимальному усилению ближнего поля и, как следствие, повышению эффективности переизлучения энергии в дальнее поле.

Таким образом, установлено, что наличие частицы золота радиусом около 175 нм приводит к увеличению эффективности экстракции света из ННК в верхнюю плоскость на 12%, по сравнению со структурой в отсутствие частицы.

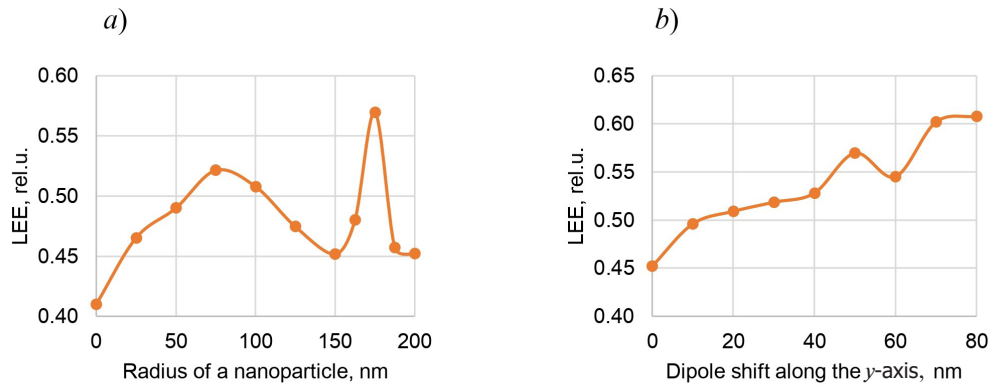


Рис. 2. Графики зависимости эффективности LEE от радиуса Au-наночастицы при сдвиге диполя на 50 нм по оси y (a) и от сдвига диполя по оси y при оптимальном радиусе наночастицы около 175 нм (b)

Для оценки оптимального положения активной области светодиода было проведено численное моделирование эффективности экстракции света в зависимости от положения диполя по оси y (рис. 2, b), причем такой расчет эквивалентен оценке необходимой толщины эмиттерного «ядра» и положения «оболочки» активной области. Из данных рис. 2, b следует, что эффективность экстракции света (LEE) монотонно растет по мере приближения диполя к наночастице (смещения по оси y). Полученные зависимости показывают, что эффективность экстракции света возрастает при приближении активной области к Au-наночастице и достигает максимума при смещении диполя примерно на 80 нм. Однако дальнейшее укорочение расстояния между активной областью и наночастицей затруднено технологически, поскольку при этом верхний p -слой GaP становится чересчур тонким и теряет необходимую электропроводность. Другими словами, полностью приближать активную область к поверхности нанокристалла оказывается нецелесообразным. Исходя из этого, оптимальное смещение составляет примерно 70 нм. При таком значении смещения сохраняется баланс между повышенной эффективностью экстракции света и толщиной p -области, которая достаточна, чтобы обеспечить стабильный токоперенос и надежную работу светодиодной структуры.

Заключение

Проведено численное моделирование структуры типа ядро-оболочка на основе нитевидных нанокристаллов GaP/GaAsPN с точечным излучающим источником, смещенным относительно оси нанокристалла и декорированной наночастицей золота.

Показано, что наличие золотой наночастицы приводит к существенному повышению эффективности экстракции света (LEE) вследствие локализованного плазмонного резонанса и усиления ближнего электрического поля в области контакта Au-наночастицы с нанокристаллом GaP/GaAsPN. Оптимальный радиус наночастицы составляет около 175 нм для длины волны 650 нм (рабочая длина волны диполя); при этом значении радиуса наблюдается максимальное усиление вывода излучения в верхнее полупространство.

Установлено также, что эффективность экстракции света возрастает при смещении активной области светодиодной структуры в сторону Au-наночастицы. Однако на приближение активной области к поверхности нанокристалла накладывается технологическое ограничение, связанное с утончением верхнего p -слоя, приводящее к ухудшению его электропроводности. На основе результатов моделирования найдено оптимальное смещение активной области (около 70 нм) от оси нанокристалла, обеспечивающее наилучший баланс между эффективностью оптического вывода и электрическими свойствами структуры.

Полученные результаты позволяют определять оптимальные параметры светодиодных гетероструктур на основе НК GaP/GaAsPN/GaP, интегрированных с наночастицами золота, и могут быть использованы при разработке высокоэффективных микросветодиодов нового поколения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sharov V., Novikova K., Mozharov A., Fedorov V., Kirilenko D., Alekseev P., Mukhin I. Highly-doped MBE-grown GaP nanowires: Synthesis, electrical study and modeling // Scripta Materialia. 2024. Vol. 248. 15 July. P. 116128.
2. Wu T., Sher Ch.-W., Lin Y., et al. Mini-LED and micro-LED: promising candidates for the next generation display technology // Applied Sciences. 2018. Vol. 8. No. 9. P. 1557.
3. Chen Z., Yan S., Danesh C. MicroLED technologies and applications: characteristics, fabrication, progress, and challenges // Journal of Physics D: Applied Physics. 2021. Vol. 54. No. 12. P. 123001.
4. Anwar A. R., Sajjad M. T., Johar M. A., Hernández-Gutiérrez C. A., Usman M., Lepkowski S. P. Recent progress in micro-LED-based display technologies // Laser & Photonics Reviews. 2022. Vol. 16. No. 6. P. 2100427.
5. Shin D.-Y., Kim T., Akuyz O., Demir H. V., Lee I.-H. Ag@SiO₂-embedded InGaN/GaN nanorod array white light-emitting diode with perovskite nanocrystal films // Journal of Alloys and Compounds. 2022. Vol. 898. 25 March. P. 162974.
6. Chen R., Li D., Hu H., et al. Tailoring optical properties of silicon nanowires by Au nanostructure decorations: Enhanced Raman scattering and photodetection // The Journal of Physical Chemistry C. 2012. Vol. 116. No. 7. Pp. 4416–4422.
7. Novikova K. N., Funtikova A. S., Mozharov A. M., Mukhin I. S. Numerical investigation of influence GaP nanowire geometry to light extraction efficiency of red light-emitting diode // St. Petersburg Polytechnic University Journal. Physics and Mathematics. 2024. Vol. 17. No. 3.2. Pp. 84–87.
8. Funtikova A. S., Mozharov A. M., Fedorov V. V., Sharov V. A., Mukhin I. S. Numerical modal analysis of GaP optical microcavity // St. Petersburg Polytechnic University Journal: Physics and Mathematics. 2024. Vol. 17. No. 3.1. Pp. 115–119.
9. Adachi S. Optical dispersion relations for GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb, Al_xGa_{1-x}As, and In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y} // Journal of Applied Physics. 1989. Vol. 66. No. 12. Pp. 6030–6040.
10. Green M. A. Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300 K including temperature coefficients // Solar Energy Materials and Solar Cells. 2008. Vol. 92. No. 11. Pp. 1305–1310.
11. McPeak K. M., Jayanti S. V., Kress S. J. P., Meyer S., Iotti S., Rossinelli A., Norris D. J. Plasmonic films can easily be better: Rules and recipes // ACS Photonics. 2015. Vol. 2. No. 3. Pp. 326–333.
12. Fedorov V. V., Dvoretckaia L. N., Mozharov A. M., Fedina S. V., Kirilenko D. A., Berezovskaya T. N., Faleev N. N., Yunin P. A., Drozdov M. N., Mukhin I. S. Dual-functional light-emitting and photo-detecting GaAsPN heterostructures on silicon // Materials Science in Semiconductor Processing. 2023. Vol. 168. December. P. 107867.
13. Можаров А. М., Кудряшов Д. А., Большаков А. Д., Цырлин Г. Э., Гудовских А. С., Мухин И. С. Численное моделирование характеристик солнечных элементов на основе GaPNAs/Si гетероструктур и GaN нитевидных нанокристаллов // Физика и техника полупроводников. 2016. Т. 50. № 11. С. 1543–1547.

REFERENCES

1. Sharov V., Novikova K., Mozharov A., et al., Highly-doped MBE-grown GaP nanowires: Synthesis, electrical study and modeling, Scr. Mater. 248 (15 July) (2024) 116128.
2. Wu T., Sher Ch.-W., Lin Y., et al., Mini-LED and micro-LED: promising candidates for the next generation display technology, Appl. Sci. 8 (9) (2018) 1557.
3. Chen Z., Yan S., Danesh C., MicroLED technologies and applications: characteristics, fabrication, progress, and challenges, J. Phys. D. Appl. Phys. 54 (12) (2021) 123001.
4. Anwar A. R., Sajjad M. T., Johar M. A., et al., Recent progress in micro-LED-based display technologies, Laser Photon. Rev. 16 (6) (2022) 2100427.

5. Shin D.-Y., Kim T., Akuyz O., et al., Ag@SiO₂-embedded InGaN/GaN nanorod array white light-emitting diode with perovskite nanocrystal films, *J. Alloys Compd.* 898 (25 March) (2022) 162974.
6. Chen R., Li D., Hu H., et al., Tailoring optical properties of silicon nanowires by Au nanostructure decorations: Enhanced Raman scattering and photodetection, *J. Phys. Chem. C.* 116 (7) (2012) 4416–4422.
7. Novikova K. N., Funtikova A. S., Mozharov A. M., Mukhin I. S., Numerical investigation of influence GaP nanowire geometry to light extraction efficiency of red light-emitting diode, *St. Petersburg Polytechnic University Journal. Physics and Mathematics.* 17 (3.2) (2024) 84–87.
8. Funtikova A. S., Mozharov A. M., Fedorov V. V., et al., Numerical modal analysis of GaP optical microcavity // *St. Petersburg Polytechnic University Journal: Physics and Mathematics.* 17 (3.1) (2024) 115–119.
9. Adachi S., Optical dispersion relations for GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb, Al_xGa_{1-x}As, and In_{1-x}Ga_xAsP_{1-y}, *J. Appl. Phys.* 66 (12) (1989) 6030–6040.
10. Green M. A., Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300 K including temperature coefficients, *Sol. Energ. Mater. Sol. Cells.* 92 (11) (2008) 1305–1310.
11. McPeak K. M., Jayanti S. V., Kress S. J. P., et al., Plasmonic films can easily be better: Rules and recipes, *ACS Photonics.* 2 (3) (2015) 326–333.
12. Fedorov V. V., Dvoretckaja L. N., Mozharov A. M., et al., Dual-functional light-emitting and photo-detecting GaAsPN heterostructures on silicon, *Mater. Sci. Semicond. Process.* 168 (Dec) (2023) 107867.
13. Mozharov A. M., Kudryashov D. A., Bolshakov A. D., et al., Numerical simulation of the properties of solar cells based on GaPNAs/Si heterostructures and GaN nanowires, *Semicond.* 50 (11) (2016) 1521–1525.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

НОВИКОВА Кристина Николаевна – лаборант лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета имени Ж. И. Алфёрова РАН, инженер-исследователь научно-исследовательской лаборатории эпитаксиальных наноструктур соединений A³B⁵ на кремнии Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
 novikova_k@spbau.ru
 ORCID: 0000-0001-8440-494X

ФУНТИКОВА Анастасия Сергеевна – аспирантка Академического университета имени Ж. И. Алфёрова РАН, инженер-исследователь научно-исследовательской лаборатории эпитаксиальных наноструктур соединений A³B⁵ на кремнии Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
 n.fn@mail.ru
 ORCID: 0009-0000-3147-6974

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

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

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

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

imukhin@yandex.ru

ORCID: 0000-0001-9792-045X

THE AUTHORS

NOVIKOVA Kristina N.

Alferov University of RAS

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

novikova_k@spbau.ru

ORCID: 0000-0001-8440-494X

FUNTIKOVA Anastasiia S.

Alferov University of RAS

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

n.fn@mail.ru

ORCID: 0009-0000-3147-6974

MOZHAROV Alexey M.

Alferov University of RAS

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

mozharov@spbau.ru

ORCID: 0000-0002-8661-4083

MUKHIN Ivan S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,

Alferov University of RAS

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

imukhin@yandex.ru

ORCID: 0000-0001-9792-045X

*Статья поступила в редакцию 17.10.2025. Одобрена после рецензирования 10.11.2025.
Принята 10.11.2025.*

Received 17.10.2025. Approved after reviewing 10.11.2025. Accepted 10.11.2025.

Atom physics and physics of clusters and nanostructures

Original article

UDC 536.423

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19108>

SIZE-DEPENDENT ADSORPTION AND ELECTRONIC MODULATION OF PYRENE NANOSTRUCTURES TOWARD TOXIC GAS DETECTION: A DFT STUDY

R. H. Khalaf [□], M. L. Jabbar

University of Thi-Qar, An Nasiriyah, Republic of Iraq

[□] rihab.khalaf@utq.edu.iq

Abstract. The DFT-study at the B3LYP/6-31G level has been conducted to analyze the interactions of pyrene-based graphene fragments with toxic gases F₂, AsH₃, PH₃, and HF. Three diamond-shaped *n*-pyrene clusters (*n* = 3, C₃₀H₁₄; *n* = 4, C₄₈H₁₈; *n* = 5, C₇₀H₂₂) were systematically optimized, and their adsorption behavior was investigated through the total and adsorption energies, frontier molecular orbital (HOMO – LUMO) distributions, and energy gaps. The results revealed that gas adsorption induces significant modifications in the electronic structure of the pyrene clusters, with variations depending on both the cluster size and gas nature. The calculated adsorption energies demonstrated a size-dependent trend, indicating that increasing the number of zigzag edges in pyrene enhances surface reactivity toward certain analytes. These findings highlight the potential of pyrene-based graphene nanostructures as selective and efficient sensors for hazardous gases.

Keywords: graphene, pyrene, toxic gas, adsorption, DFT, cluster size, molecular orbital, energy gap, gas detection

For citation: Khalaf R. H., Jabbar M. L., Size-dependent adsorption and electronic modulation of pyrene nanostructures toward toxic gas detection: a DFT study, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (1) (2026) 91–105. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19108>

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

Научная статья

УДК 536.423

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19108>

АДСОРБЦИЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ МОДУЛЯЦИЯ НАНОСТРУКТУР ПИРЕНА, ДЕТЕКТИРУЮЩИХ ТОКСИЧНЫЕ ГАЗЫ: ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТЕЙ ЭТИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОТ РАЗМЕРА КЛАСТЕРОВ ПИРЕНА МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Р. Х. Халаф [□], М. Л. Джаббар

Университет Ди-Кар, г. Эн-Насирия, Республика Ирак

[□] rihab.khalaf@utq.edu.iq

Аннотация. В проведенном теоретическом исследовании использована теория функционала плотности (DFT) на уровне B3LYP/6-31G для изучения взаимодействия наноструктур на основе графена (с базой из пирена) с такими токсичными газами, как газообразный фтор, арсин, фосфин и фтороводород (F₂, AsH₃, PH₃ и HF, соответственно). Нами систематически оптимизированы три ромбовидных кластера пирена с

разными значениями их размера n и проанализированы их адсорбционные и электронные свойства: общая энергия, энергия адсорбции, распределение молекулярных орбиталей и энергетические зазоры НОМО – LUMO. Установлено, что в результате адсорбции газа кластеры пирена претерпевают значительные изменения электронной структуры, зависящие как от размера кластера, так и от природы газа. Рассчитанные значения энергии адсорбции зависят от размера n , что указывает на повышение реакционной способности поверхности к анализируемым токсичным газам при увеличении количества зигзагообразных краев в пирене. Полученные результаты подтверждают высокий потенциал графеновых наноструктур на основе пирена в качестве селективных и эффективных чувствительных элементов опасных газов для создания устройств.

Ключевые слова: графен, пирен, ядовитый газ, адсорбция, метод функционала плотности, размер кластера, молекулярная орбиталь, энергетический зазор

Для цитирования: Халаф Р. Х., Джаббар М. Л. Адсорбция и электронная модуляция наноструктур пирена, детектирующих токсичные газы: исследование зависимостей этих характеристик от размера кластеров пирена методом функционала плотности // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 91–105. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19108>

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

Introduction

Graphene nanoflakes (GNFs) exhibit diverse structural properties influenced by their shape, size [1], and edge terminations. Among these, the diamond-shaped graphene (i.e. rhomboid-shaped or pyrene) structures are of particular interest making them promising candidates for applications in nanoelectronics [2], spintronics, and quantum computing. Despite extensive interest, research on diamond-shaped GNRs formed by fusing triangular graphene units remains limited. Recent advances have highlighted the need to further explore the electronic and magnetic characteristics of such novel GNR architectures, but they remain insufficiently explored [3 – 5]. Recent studies have focused on diamond-shaped GNFs formed from fused benzenoid rings, exploring their tunable electronic behavior [6]. Notably, configurations like zigzag-edged and triangular GNFs show potential for magnetism and unique electronic responses.

Graphene, with its well-defined sp^2 -hybridized carbon lattice [7, 8], a two-dimensional material with a hexagonal lattice structure [9], carbon-based nanomaterials [10], including graphene [11], carbon nanotubes, and fullerenes, have gained significant attention for their outstanding physicochemical properties and wide applicability in energy storage, gas adsorption, and electronic devices [12, 13]. Graphene displays edge-dependent phenomena influenced by geometry and confinement effects. These nanoribbons, typically with zigzag or armchair edges, show tunable electronic, magnetic, and optical properties, making them attractive for nanoscale [14] device applications [15]. However, its lack of an intrinsic bandgap limits its use in transistor-based devices. A practical solution is to divide graphene into nanoscale fragments, known as graphene nanoflakes (GNFs), whose properties are highly dependent on their geometry and edge configuration [16]. Among graphene-derived structures [17], graphene nanoribbons (GNRs) offer tunable electronic behavior due to their reduced dimensionality and edge effects [18], with zigzag-edged GNRs showing strong potential for enabling spintronic and electronic device functionality [19], where graphene-related materials (GRMs) offer high sensitivity and selectivity for detecting hazardous gases [20 – 22]. Due to their unique structure and reactivity, GRMs are considered as promising candidates for next-generation gas sensors in environmental and workplace safety monitoring [23].

The aim of this study is to design n -pyrene as sensors for highly toxic gases (such as F_2 , AsH_3 , PH_3 , and HF) that are harmful to living organisms in general (and humans in particular) by studying the electronic properties; for instance, energy gap, ionization potential, electron affinity, hardness, and softness, as well as adsorption energy, and then predicting the possibility of applying them in sensor devices.

Computational details

All quantum calculations were carried out within Kohn – Sham density-functional theory using the hybrid B3LYP functional [24]. The model system was a diamond-shaped graphene nanoflake (pyrene) constructed from sp^2 carbon atoms; all edge carbons were hydrogen-terminated to remove dangling bonds. Unless noted otherwise, calculations were performed with the 6-31G valence-split basis on all atoms (H, C). For better numerical stability, geometries were fully optimized without symmetry constraints using Geo-Opt until the force reached the lowest minimum energy. Harmonic frequency analyses at the same level confirmed that all stationary points were true minima (no imaginary frequencies) and provided zero-point energies and thermochemical corrections at 298 K and 1 atm.

Electronic properties were evaluated on the optimized structures. Frontier orbital energies (HOMO/LUMO) and the energy gap were taken directly from the orbital eigenvalues. Density of states (DOS) was obtained by Gauss Sum according to the eigenvalue of the spectrum. Charge analysis was performed through Mulliken and Hirshfeld schemes, and global electronic properties and dipole moments were extracted from the analytic derivatives. For physisorption studies on the GNF surface, adsorbates were placed at several initial sites.

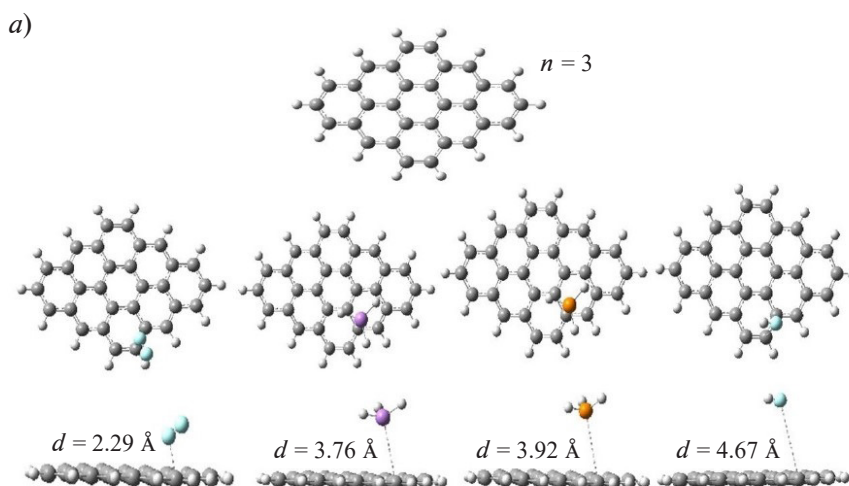
Results and discussion

Molecular structure. The n -pyrene structures were modeled by systematically varying the number of zigzag edges, with $n = 3, 4,$ and $5,$ corresponding to chemical formulas $C_{30}H_{14}, C_{48}H_{18},$ and $C_{70}H_{22},$ respectively. These variations enabled a controlled study of edge effects on the adsorption properties. To probe the interaction of graphene with hazardous pollutants, four toxic gas molecules: fluorine (F_2), arsine (AsH_3), phosphine (PH_3), and hydrogen fluoride (HF) were selected as adsorbates due to their industrial relevance and high toxicity.

Each gas molecule was initially placed near the most chemically active regions of the graphene surface, allowing for multiple adsorption configurations to be considered. All systems underwent full geometric optimization using density functional theory (DFT) within the B3LYP functional and 6-31G basis set, ensuring the identification of stable configurations without imaginary frequencies. Subsequent analyses included adsorption energy calculations, frontier molecular orbital (FMO) analysis, and evaluation of dipole moment changes to elucidate the impact of gas adsorption on the electronic structure of diamond-shaped graphene.

The optimized configurations in Fig. 1, *a, b,* and *c* illustrate the interaction between diamond-shaped graphene nanoflakes ($n = 3, 4,$ and 5 respectively) and four toxic gas molecules: gaseous fluorine (F_2), arsine (AsH_3), phosphine (PH_3) and hydrogen fluoride (HF). The calculated equilibrium distances indicate the strength and nature of adsorption.

For $n = 3,$ F_2 gas exhibits the shortest adsorption distance (2.29 Å), suggesting strong physisorption with potential partial charge transfer to the graphene π -system. HF gas shows a moderately strong interaction at 4.67 Å, consistent with hydrogen bonding or weak electrostatic attraction. AsH_3 and PH_3 gases display larger separations (3.76 Å and 3.92 Å), implying weaker



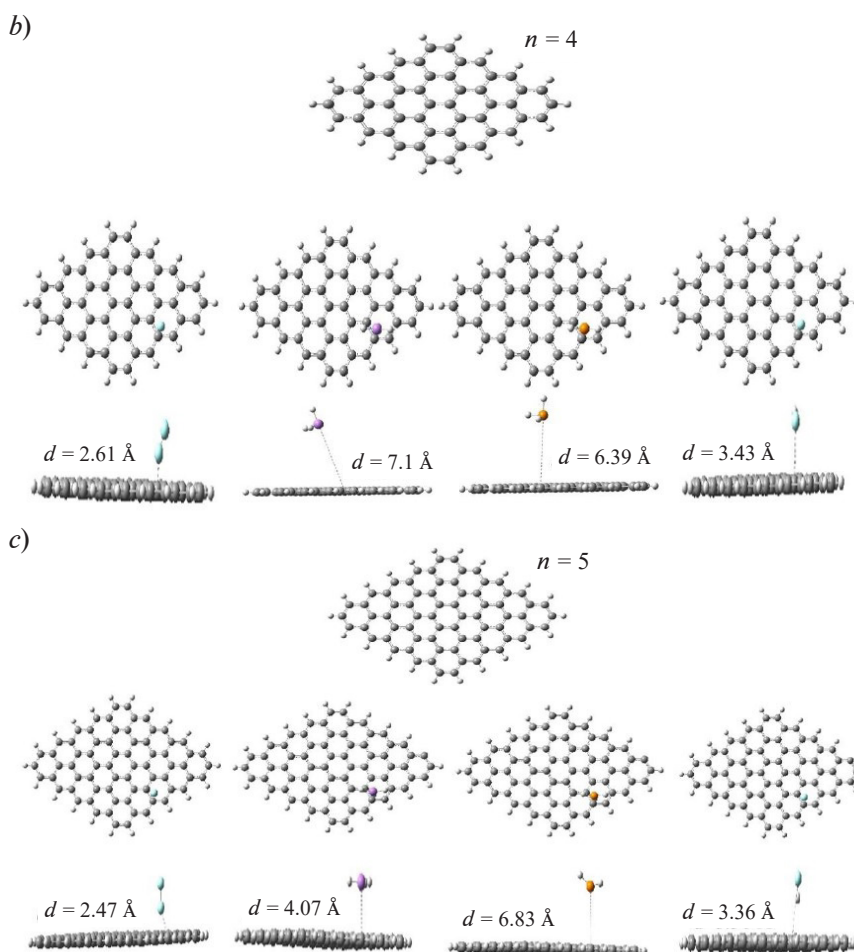


Fig. 1. Structure types of pristine n -pyrene molecules with different n values. The molecules have adsorbed high toxic gases (F_2 , AsH_3 , PH_3 , and HF). $n = 3$ (a), 4 (b), 5 (c); d is the calculated equilibrium adsorption distance

Van der Waals forces dominating the adsorption mechanism. For $n = 4$, notable variations in interaction distances are observed, particularly with AsH_3 (7.10 Å) and PH_3 (6.39 Å), which indicate minimal adsorption and a likely repulsive interaction regime. In contrast, HF adsorption shortens to 3.43 Å, while F_2 slightly increases to 2.61 Å, reflecting size and edge effects on surface reactivity.

The increased flake size ($n = 4$) introduces a more extended π -system, which can delocalize charge density over a broader area, thereby reducing localized binding strengths for certain gases. For $n = 5$, the adsorption distance also illustrates the shorter length than that for $n = 4$ except for the structure interaction with PH_3 gas. These indicate the greatest adsorption and a likely attractive interaction regime. Overall, the results highlight that adsorption strength is highly sensitive to all the edge configurations (n value) and the chemical nature of the adsorbate, with F_2 and HF showing the highest affinities across each structure, while AsH_3 and PH_3 exhibit weak physisorption, particularly for large flakes. These findings suggest that tuning the graphene flake size can selectively enhance sensing capabilities toward specific toxic gases.

Density of states. The density of states (DOS), which offers a straightforward method of characterizing intricate electronic structures, is arguably the most crucial idea for comprehending the physical characteristics of materials. The band gap is one of the important parameters that the DOS makes visual and characterizes the electrical and optical properties of materials. The capacity to analyze and adjust different material properties is significantly enhanced by the computation of a high-quality DOS that accurately represents a material's electronic structure. The availability and simplicity of Density Functional Theory (DFT) calculations have made DOS calculations commonplace today [25 – 27].

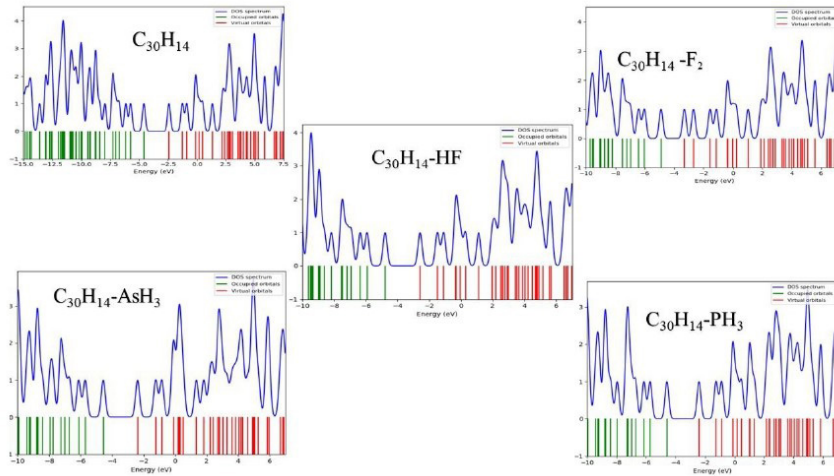


Fig. 2. DOS for pristine 3-pyrene ($C_{30}H_{14}$) adsorbed high toxic gases (F_2 , AsH_3 , PH_3 and HF)

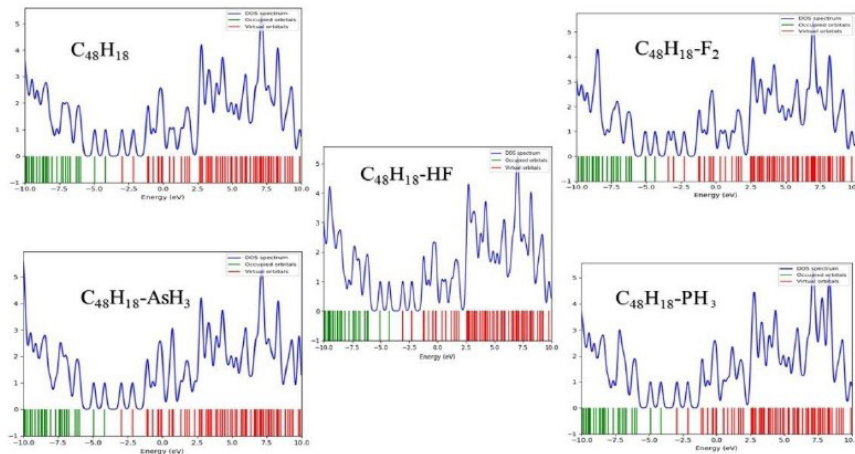


Fig. 3. DOS for pristine 4-pyrene ($C_{48}H_{18}$) adsorbed the same high toxic gases

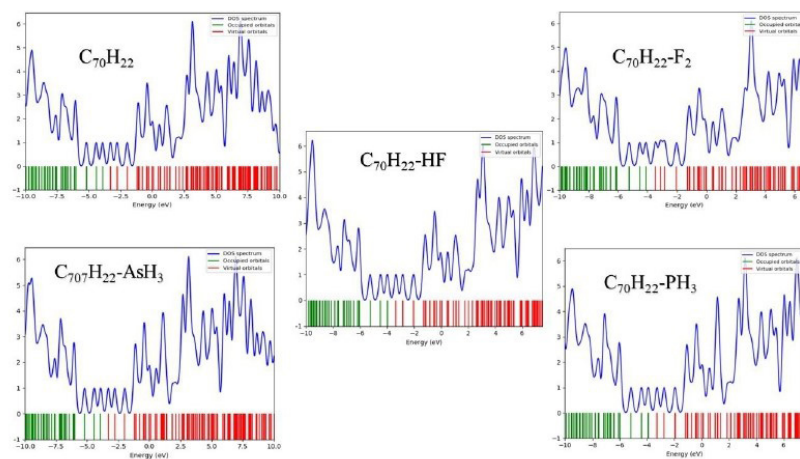


Fig. 4. DOS for pristine 5-pyrene ($C_{70}H_{22}$) adsorbed the same high toxic gases (F_2 , AsH_3 , PH_3 and HF)

Table 1

Extracted DOS parameters for pyrene nanostructures under toxic gas adsorption

Structure	Parameter value, eV		DOS Intensity, a.u.
	$E_{peak}(VB)$	$E_{peak}(CB)$	
<i>3-pyrene (3P)</i>			
Pristine 3P	-1.20	1.10	–
3P-F ₂	-0.90	0.68	0.45
3P-AsH ₃	-1.15	1.04	0.22
3P-PH ₃	-1.14	1.05	0.20
3P-HF	-1.05	1.09	0.33
<i>4-pyrene (4P)</i>			
Pristine 4P	-0.63	0.59	–
4P-F ₂	-0.49	0.44	0.41
4P-AsH ₃	-0.61	0.60	0.15
4P-PH ₃	-0.59		0.14
4P-HF	-0.57	0.64	0.29
<i>5-pyrene (5P)</i>			
Pristine 5P	-0.34	0.29	–
5P-F ₂	-0.33	0.30	0.25
5P-AsH ₃			0.17
5P-PH ₃			0.15
5P-HF			0.22

Notations: $E_{peak}(VB)$, $E_{peak}(CB)$ are peak positions of valence and conduction bands, relatively.

Footnotes: the Fermi energy is set $E_F = 0$ eV in all cases; the DOS intensity is given relative to pristine pyrene.

The density of states (DOS) profiles for pristine pyrene nanoflakes ($C_{30}H_{14}$, $C_{48}H_{18}$, and $C_{70}H_{22}$) and their complexes with high-toxic gases (F₂, AsH₃, PH₃, and HF) reveal significant alterations in electronic structure upon adsorption (see Figs. 2 – 4). For pristine pyrene (diamond-shaped (GNF)), the DOS spectrum exhibits a well-defined $\pi - \pi^*$ separation, corresponding to the intrinsic band gap.

The introduction of toxic gas molecules induces notable modifications in the DOS near the Fermi level, indicating charge transfer and hybridization effects between the adsorbates and surface of the graphene framework (see Table 1). In structure $C_{30}H_{14}$, the adsorption of F₂ and HF results in a pronounced increase in DOS intensity near the conduction band edge, signifying enhanced electron-accepting characteristics, consistent with the high electronegativity of fluorine. Conversely, AsH₃ and PH₃ introduce localized states within the band gap, likely due to weaker orbital overlap, suggesting physisorption with partial charge redistribution. While, for the larger nanoflakes ($C_{48}H_{18}$ and $C_{70}H_{22}$), the DOS spectra demonstrate more delocalized π -electron interactions and reduced bandgaps upon gas adsorption, highlighting stronger electronic coupling.

In particular, the gas of HF adsorption shows substantial DOS broadening near the Fermi level, which could enhance electrical conductivity and sensor sensitivity. The variation in DOS responses with flake size suggests that quantum confinement effects diminish with increasing system size, allowing greater charge delocalization. As a result of the DOS modifications carried out, the potential of the diamond-shaped graphene nanoflakes is confirmed as selective and

size-tunable sensing platforms for detecting toxic gases, where the nature of interaction chemisorption versus physisorption can be inferred from the degree of DOS perturbation and gap narrowing.

Frontier energy. The energy gap represents the conductive and insulating properties of material, defined as the energy difference between the highest occupied molecular orbital (HOMO) and the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) [28 – 30].

The values of HOMO, LUMO energies, an energy gap of pristine pyrene ($n = 3 - 5$), and that with toxic gases

System	Energy, eV		
	E_{HOMO}	E_{LUMO}	E_{gap}
3-pyrene (3P)			
Pristine 3P	-4.596	-2.313	2.283
3P-F ₂	-4.890	-3.312	1.578
3P-AsH ₃	-4.569	-2.381	2.187
3P-PH ₃	-4.593	-2.406	
3P-HF	-4.778	-2.588	2.190
4-pyrene (4P)			
Pristine 4P	-4.171	-2.952	1.219
4P-F ₂	-4.347	-3.413	0.934
4P-AsH ₃	-4.169	-2.951	1.218
4P-PH ₃	-4.134	-2.937	1.197
4P-HF	-4.256	-3.055	1.200
5-pyrene (5P)			
Pristine 5P	-3.919	-3.289	0.630
5P-F ₂	-4.107	-3.479	0.628
5P-AsH ₃	-3.925	-3.295	0.630
5P-PH ₃	-3.904	-3.274	
5P-HF	-3.977	-3.345	0.633

small band gap (0.630 eV), which is suitable for highly sensitive sensing applications. Adsorption with all gases results in very small changes in the band gap ($\sim 0.628 - 0.633$ eV), indicating that the large size reduces the sensitivity of the band gap to changes due to adsorption, although changes in the E_{HOMO} and E_{LUMO} positions can be observed, reflecting charge redistribution at the surface.

The results of data analysis. The achieved results are in good agreement with previous density functional theory investigations on graphene-based nanostructures used for gas sensing [3, 31], revealed that adsorption of small toxic molecules on diamond-shaped graphene nanoflakes leads to a noticeable reduction in the HOMO – LUMO energy gap, typically within 0.5 – 1.0 eV, consistent with our finding that F₂ adsorption decreases the gap from 2.28 to 1.57 eV for the $n = 3$ pyrene system. Similarly, the calculated adsorption energies for AsH₃ (–2.09 eV) and PH₃ (–1.30 eV) fall within the range reported in earlier studies on gas – graphene interactions, confirming the strong donor-acceptor character of these systems.

Furthermore, the observed increase in electron affinity and softness after adsorption agrees with trends reported for other sp^2 carbon materials, where enhanced charge transfer improves sensing sensitivity. These consistencies with literature data validate the reliability of the present

The results listed in Table 2 show that the E_{HOMO} and E_{LUMO} values represent the energy of the highest fully occupied orbital and the energy of the lowest empty orbital respectively, which are related to the ionization potential, and electron affinity respectively. Subsequently, this relationship between E_{HOMO} , E_{LUMO} , and E_{gap} provides a direct understanding of the effect of adsorption on electronic properties and the potential for designing sensitive materials tailored to specific gas species. An analysis of the data in Table 1 and Fig. 5, allows us to note that the energy gap of 3-pyrene structure (2.283 eV) decreases significantly upon adsorption of F₂ (1.578 eV), indicating a strong interaction and charge transfer from pyrene to the adsorbed molecule due to the high electronegativity of fluorine, which increases conductivity. Meanwhile, AsH₃, PH₃, and HF gases exhibit similar energy gaps (from ~ 2.187 to 2.190 eV), suggesting relatively weaker interactions and closer to a physical nature (physisorption). For 4-pyrene ($n = 4$), the energy gap of the pure surface is smaller (1.219 eV), reflecting increased conductivity due to the increased volume and reduced quantum confinement effect. Adsorption with F₂ reduces the gap to 0.934 eV, indicating a strong chemical interaction that increases the electron density near the Fermi level. Such gases as AsH₃, PH₃, and HF maintain the band gap in the range from ~ 1.197 to 1.218 eV, indicating limited electronic influence compared to that of F₂. In 5-pyrene, the surface exhibits a very

Table 2

computational approach (B3LYP/6-31G) and emphasize that the size-dependent modulation of electronic properties plays a dominant role in determining the adsorption behavior of pyrene nanostructures. Hence, the theoretical predictions of this work are supported by prior studies [3], strengthening the conclusion that larger pyrene clusters offer improved sensing performance for highly toxic gases.

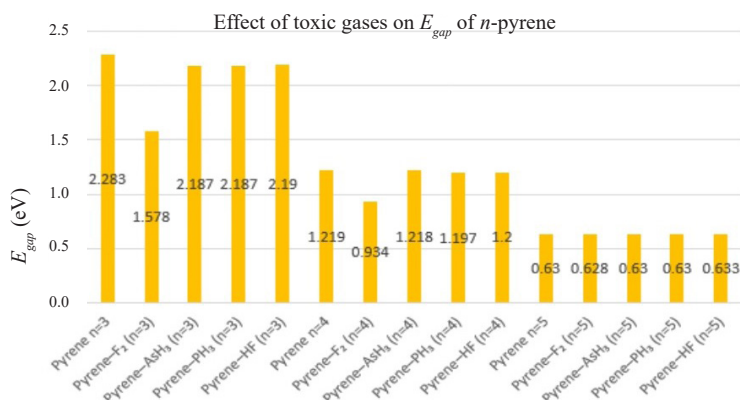


Fig. 5. The change of energy gap (E_{gap}) of n -pyrene upon adsorption of toxic gases of different nature

Table 3

Calculated characteristics of the electronic properties of pristine pyrene ($n = 3 - 5$) and the pyrene with high toxic gases adsorbed

System	Parameter value, eV			σ , 1/eV
	IP	EA	η	
<i>3-pyrene (3P)</i>				
Pristine 3P	4.596	2.313	1.142	0.438
3P-F ₂	4.891	3.312	0.789	0.634
3P-AsH ₃	4.569	2.381	1.094	0.457
3P-PH ₃	4.593	2.406		
3P-HF	4.778	2.588	1.095	0.456
<i>4-pyrene (4P)</i>				
Pristine 4P	4.171	2.952	0.610	0.820
4P-F ₂	4.347	3.413	0.467	1.071
4P-AsH ₃	4.169	2.951	0.609	0.821
4P-PH ₃	4.134	2.937	0.598	0.836
4P-HF	4.256	3.055	0.600	0.833
<i>5-pyrene (5P)</i>				
Pristine 5P	3.919	3.289	0.315	1.588
5P-F ₂	4.107	3.480	0.314	1.593
5P-AsH ₃	3.925	3.295	0.315	1.587
5P-PH ₃	3.905	3.274		
5P-HF	3.977	3.345	0.316	1.581

Notations: IP is the ionization potential, EA is the electron affinity; η , σ are chemical hardness and softness, relatively.

Global reactivity descriptors. The electronic properties ionization potential (IP), electron affinity (EA), electronegativity and electrophilicity classified as global merits [32]. The ionization potential is the lowest energy required to remove an electron from an atom. It can be measured for each electron of the atom (according to Koopmans theorem).

Table 3 presents the ionization potential (IP), electron affinity (EA), chemical hardness (η), and softness (σ) of pyrene nanostructures of different sizes ($n = 3 - 5$) functionalized with toxic gases (F₂, AsH₃, PH₃, and HF). These descriptors provide further insight into the electronic stability and reactivity of the adsorption complexes. The pristine pyrene nanostructures exhibit relatively high IP values:

$$4.59 \text{ eV for } n = 3; 4.17 \text{ eV for } n = 4; \text{ and } 3.92 \text{ eV for } n = 5,$$

which decrease slightly with the system sizes.

This result reflects a decrease in the energy required to remove an electron as the π -system becomes more delocalized. Upon adsorption, IP values vary depending on the gas nature; such as F₂ and HF generally increase IP slightly, suggesting stabilization of the electronic structure, while AsH₃ and PH₃ tend to lower IP values, making the system more prone to electron donation, which is favorable for sensory applications [33].

This result reflects a decrease in the energy required to remove an electron because the π -system becomes more delocalized. Upon

adsorption, IP values vary depending on the gas nature; such as F_2 and HF generally increase IP slightly, suggesting stabilization of the electronic structure, while AsH_3 and PH_3 tend to lower IP values, making the system more sensitive to electron donation, which is favorable for sensory applications [33]. The electron affinity also increases significantly upon adsorption of all gases, particularly for F_2 and HF (up to 3.34 eV). This points out an enhanced tendency of the system to accept electrons, consistent with a charge transfer from the adsorbates to the pyrene structure. The elevated EA values highlight the potential for improved sensitivity in electron-mediated detection mechanisms.

Hardness η decreases markedly upon adsorption. For instance, pristine pyrene has $\eta \approx 1.14$ eV for $n = 3$, while adsorption of AsH_3 or F_2 reduces it below 0.6 eV in some cases. A lower hardness value corresponds to increased chemical reactivity and reduced electronic stability. Conversely, the softness value increases significantly upon adsorption, especially for larger systems (for instance, $\sigma > 1.5$ (eV) $^{-1}$ at $n = 5$). This shift toward higher softness indicates enhanced polarizability and stronger electronic responsiveness, being desirable characteristics for sensing materials.

Table 4

**Electronegativity, electrophilicity, polarizability,
and dipole moment for pristine n -pyrene ($n = 3 - 5$)
and those with high toxic gases**

System	Parameter value			
	χ , eV	ω , eV	α , a.u.	μ , D
<i>3-pyrene (3P)</i>				
Pristine 3P	-3.454	5.227	399.144	$1.1 \cdot 10^{-6}$
3P- F_2	-4.101	10.659	431.956	4.984
3P- AsH_3	-3.475	5.521	429.817	0.746
3P- PH_3	-3.500	5.600	421.206	1.210
3P-HF	-3.683	6.192	402.349	3.085
<i>4-pyrene (4P)</i>				
Pristine 4P	-3.561	10.407	819.759	$6.2 \cdot 10^{-5}$
4P- F_2	-3.880	16.116	845.641	4.370
4P- AsH_3	-3.560	10.402	839.140	0.475
4P- PH_3	-3.535	10.444	836.159	1.142
4P-HF	-3.656	11.130	821.186	2.220
<i>5-pyrene (5P)</i>				
Pristine 5P	-3.604	20.621	1468.848	$8.7 \cdot 10^{-5}$
5P- F_2	-3.793	22.925	1485.465	4.933
5P- AsH_3	-3.610	20.682	1485.778	0.251
5P- PH_3	-3.590	20.446	1483.693	1.137
5P-HF	-3.661	21.186	1470.188	2.072

Notations: χ is the electronegativity, ω is the electrophilicity, α is the polarizability, μ is the dipole moment.

Based on the results presented in Table 4, the highest electronegativity values are observed in the following systems:

System	χ , eV
3-pyrene-F ₂	- 4.10
4-pyrene-F ₂	-3.88
5-pyrene-F ₂	-3.793.

The adsorption or interaction of fluorine gas leads to an increase in the electronegativity of the compound, which enhances its ability to attract electrons which is an important factor in chemical reactivity.

As for polarizability, we observe the following high values:

System	α , a.u.
5-pyrene-HF	1470.18
5-pyrene-PH ₃	1483.69
5-pyrene-AsH ₃	1485.77

Polarizability increases at the $n = 5$ graphene-diamond surface, and its interaction with gases makes the surface electronically polarized. This fact is beneficial for applications in sensitive devices and conductivity. Regarding electrophilicity, it increases significantly at $n = 5$, with values ranging between ~ 20.446 and 22.92 eV, indicating higher chemical reactivity and a stronger tendency to accept electrons. As for the dipole moment μ , it reflects the asymmetry in charge distribution. High values of the dipole moments are seen in systems such as 3-pyrene-F₂ ($\mu = 4.984$ D), indicating a strong charge asymmetry and an ability to interact with external electric fields. On the other hand, the lowest values are observed in the pristine pyrene systems with $n = 3, 4$, and 5 , reflecting a highly symmetric and electronically stable configuration.

Table 5 **The total energy and adsorption energy**

Total and adsorption energies for pristine pyrene ($n = 3 - 5$) and pyrene with toxic gases adsorbed

System	Energy parameter value		
	E_{tot} , a.u. (Hartree)	E_{ads}	
		eV	kJ/mol
<i>3-pyrene (3P)</i>			
Pristine 3P	-1151.49	-	
3P-F ₂	-1350.98	-0.4009	-38.6867
3P-AsH ₃	-3386.84	-2.0925	-201.900
3P-PH ₃	-1494.59	-1.3019	-125.617
3P-HF	-1251.9	-0.1499	-14.4665
<i>4-pyrene (4P)</i>			
Pristine 4P	-1839.76	-	
4P-F ₂	-2039.25	-0.2975	-28.7098
4P-AsH ₃	-4075.10	-1.8411	-177.647
4P-PH ₃	-2182.87	-1.2497	-120.584
4P-HF	-1940.17	-0.1358	-13.1065
<i>5-pyrene (5P)</i>			
Pristine 5P	-2680.47	-	
5P-F ₂	-2879.96	-0.3469	-33.4725
5P-AsH ₃	-4915.81	-1.9253	-185.773
5P-PH ₃	-3023.57	-1.2603	-121.608
5P-HF	-2780.88	-0.1209	-11.6651

The total energy is calculated as the sum of the kinetic energy of the electrons, the nucleus-electrons interaction energy, and the electron-electron repulsion energy, while represents the exchange-correlation term [34, 35].

The data in Table 5 demonstrates the calculated total and adsorption energies in both electronvolts (eV) and kilojoules per mole (kJ/mol) for pyrene nanostructures of different sizes ($n = 3 - 5$) upon functionalization with F₂, AsH₃, PH₃, and HF. The total energy becomes progressively more negative as the pyrene size increases

(-1151.49, -1839.76, and -2680.47 a.u. for $n = 3, 4$, and 5 , respectively),

consistent with the stabilization gained from an extended π -conjugated system.

This trend confirms that larger pyrene nanostructures provide more thermodynamically favorable adsorption surfaces. The adsorption energies reveal a clear distinction between strong and weak interactions. In this way, the chemisorption occurs for PH₃ and AsH₃, particularly AsH₃, which exhibits very high adsorption energies (up to 5.35 eV, or 516 kJ/mol at $n = 5$). Such large values indicate the significant orbital hybridization and charge redistribution

between the toxic gas and the pyrene surface. At the same time, the weak physisorption is observed for F_2 and HF, with adsorption energies ranging from -0.12 to -0.40 eV (from -11.6 to -38.7 kJ/mol). These values are comparable to Van der Waals interactions, suggesting minimal charge transfer. For instance, the AsH_3 consistently shows the strongest binding over all pyrene sizes, reflecting its high chemical reactivity and strong donor-acceptor interactions with the π -framework, whereas the PH_3 adsorption is also substantial:

from -1.26 to -1.30 eV (or -121 to -126 kJ/mol),

although weaker than that of AsH_3 .

On the other hand, both F_2 and HF remain weakly bound, highlighting their role as stabilizing modifiers rather than strong dopants.

Summing up, from an application perspective, the strong chemisorption of AsH_3 and PH_3 makes pyrene derivatives highly promising for toxic gas detection and capture technologies, as the adsorption is both energetically favorable and electronically disruptive. Conversely, the weaker physisorption of F_2 and HF suggests potential utility in situations where reversible adsorption is desirable, such as catalytic cycles or reusable sensors.

Conclusions

The findings of this study have shown that molecular adsorption of toxic gases induces significant modifications in the electronic structure of the host systems, governed by both the chemical nature of the adsorbate and the dimensional scale of the molecular substrate. Among the investigated species, F_2 and HF emerge as the most effective candidates for electronic detection, exhibiting marked alterations in conductivity upon interaction. This behavior is particularly enhanced in extended π -conjugated frameworks such as $C_{70}H_{22}$, highlighting the potential of large-scale organic systems in the development of nanoscale gas sensors with high sensitivity and selectivity toward hazardous gaseous environments. As the pyrene size increases, the descriptors shift toward greater reactivity (lower IP and η values, higher EA and σ values). This suggests that larger pyrene nanostructures are more chemically active and more sensitive to adsorption-induced perturbations, making them better candidates for real-world sensing applications.

Acknowledgments

The authors express their gratitude to the leadership of the Department of Physics and College of Science (University of Thi-Qar) for assistance in fulfilling a part of the requirements for obtaining a Master's degree.

REFERENCES

1. Kumar Y., Sahoo S., Chakraborty A. K., Mechanical properties of graphene, defective graphene, multilayer graphene and SiC-graphene composites: A molecular dynamics study, *Phys. B: Cond. Matter*, 620 (1 Nov) (2021) 413250.
2. Elmghabar Z., Elidrysy A., Harir S., Drissi L., Magnetic properties and magnetocaloric effect of diamond-shaped graphene bilayer quantum dots doped with magnetic impurities: A Monte Carlo study, *J. Magn. Magn. Mater.* 608 (15 Oct) (2024) 172443.
3. Huang H.-J., Seenithurai S., Chai J.-D., TAO-DFT study on the electronic properties of diamond-shaped graphene nanoflakes, *Nanomaterials*. 10 (6) (2020) 1236.
4. Omeer T. A., Mohammed M. H., Tuning the band gap in graphene nanoflakes via various impurities, *Nano-Struct. Nano-Objs.* 35 (July) (2023) 101009.
5. Batool D. B., Fallah H. H., Alwan A. S., Geometrical optimization and some physical properties for sodium on copper clusters, *IOSR J. Appl. Phys.* 7 (3-Ver. II) (2015) 30–37.
6. Aldulajjan S., Ajeebi A. M., Jedidi A., et al., Surface modification of graphene with functionalized carbenes and their applications in the sensing of toxic gases: a DFT study, *RSC Adv.* 13 (28) (2023) 19607–19616.
7. Jabbar M. L., Al-Shejairy K. J., A new fractal geometry doping for graphene nanoribbon and the optimization of crystal: A density functional theory (DFT) study, *Per. Tchê Quím.* 17 (35) (2020) 1148–1158.

8. **Jabbar M. L., Kadhim K. J.**, Linear & nonlinear optical properties of undoped & doped graphene nanoribbon via TD-DFT study, *AIP Conf. Proc.* 2292 (1) (2020) 030011.
9. **Benítez-Martínez S., Valcárcel M.**, Graphene quantum dots in analytical science, *Trends Anal. Chem.* 72 (Oct) (2015) 93–113.
10. **Bao Q., Yang Z., Lu Z., He X.**, Effects of graphene thickness and length distribution on the mechanical properties of graphene networks: A coarse-grained molecular dynamics simulation, *Appl. Surf. Sci.* 570 (30 Dec) (2021) 151023.
11. **Leenaerts O., Partoens B., Peeters F. M.**, Adsorption of small molecules on graphene, *Microelectron. J.* 40 (4–5) (2009) 860–862.
12. **Guerra T., Araujo L., Azevedo S.**, Magnetic and electronic properties of diamond-shaped graphene-boron nitride nanoribbons and nanoflakes, *J. Phys. Chem. Solids.* 135 (Dec) (2019) 109085.
13. **Yang J., Zhang Y., Kim D. Y.**, Electrochemical sensing performance of nanodiamond-derived carbon nano-onions: Comparison with multiwalled carbon nanotubes, graphite nanoflakes, and glassy carbon, *Carbon.* 98 (March) (2016) 74–82.
14. **Lahiani M. H., Chen J., Irin F., et al.**, Interaction of carbon nanohorns with plants: Uptake and biological effects, *Carbon.* 81 (Jan) (2015) 607–619.
15. **Zhang X., Rajaraman B. R., Liu H., Ramakrishna S.**, Graphene's potential in materials science and engineering, *RSC Adv.* 4 (55) (2014) 28987–29011.
16. **Deng Q., Chai J.-D.**, Electronic properties of triangle-shaped graphene nanoflakes from TAO-DFT, *ACS Omega.* 4 (10) (2019) 14202–14210.
17. **Thu P. T., Mai N. T., Lien P. T., Tung N. T.**, Magnetism in diamond graphene nanoflakes, *Vietnam J. Sci. Technol.* 61 (1) (2023) 64–71.
18. **Jabbar M. L., Kadhim K. J.**, Electronic properties of doped graphene nanoribbon and the electron distribution contours: A DFT study, *Russ. J. Phys. Chem. B.* 15 (1) (2021) 46–52.
19. **Sarmada A., Pupon S.**, The external electric field effect to hydrogen storage on BN co-doped graphene surface decorated by metal atoms: A DFT study, *J. Phys. Sci. Eng.* 4 (2) (2020) 74–83.
20. **Xiang C., Li A., Yang S., Lan Z.**, Enhanced hydrogen storage performance of graphene nanoflakes doped with Cr atoms: a DFT study, *RSC Adv.* 9 (44) (2019) 25690–25696.
21. **Kishnani V., Yadav A., Mondal K., Gupta A.**, Palladium-functionalized graphene for hydrogen sensing performance: theoretical studies, *Energies.* 14 (18) (2021) 5738.
22. **Cruz-Martínez H., García-Hilerio B., Montejo-Alvaro F., et al.**, Density functional theory-based approaches to improving hydrogen storage in graphene-based materials, *Molecules.* 29 (2) (2024) 436.
23. **Cruz-Martínez H., Rojas-Chávez H., Montejo-Alvaro F., et al.**, Recent developments in graphene-based toxic gas sensors: a theoretical overview, *Sensors.* 21 (6) (2021) 1992.
24. **Alwan A. S., Talib S. H.**, Quantum computational study of the electronic properties of the interactions between 3THF and some metallic linear molecules using DFT, *J. Educ. Pure Sci.* 11 (2) (2021) 53–67.
25. **Toriyama M. A., Ganose A. M., Dylla M., Anand S.**, How to analyze a density of states, *Mater. Today Electron.* 1 (May) (2022) 100002.
26. **Aqeel S., Shwya A.**, Molecular geometry and electronic characteristics of zirconium and (zirconium-Ge, Si, Sn) utilizing density functional theory (DFT) codes at 3-21G basis set, *NeuroQuantology.* 20 (8) (2022) 2767–2778.
27. **Ahmed A. B.**, Studying the electronic characteristics and physisorption of OTS on the pure silver surfaces (Ag_{10}), (Ag_{15}) and (Ag_{18}), *Univ. Thi-Qar J. Sci.* 10 (2) (2023) 151–159.
28. **Alwan A. Sh., Ajeel S. Kh., Jabbar M. L.**, Theoretical study for Coronene and Coronene-Al, B, C, Ga, In and Coronene-O interactions by using Density Functional Theory, *Univ. Thi-Qar J.* 14 (4) (2019) 80–94.
29. **Salih F. T., Alwan A. Sh.**, Charge transfer and physisorption mechanism between tosylate, pyrimidine and the surfaces of nanocopper (Cu) and (Cu) utilizing algorithms of (DFT), *J. Educ. Pure Sci.* 13 (4) (2023) 74–96.
30. **Talib S. H., Alwan A. Sh.**, Geometrical optimization and some electronic properties for pyrrole-metal interactions using DFT, B3LYP basis sets, *J. Optoelectron. Laser.* 41 (7) (2022) 1300–1312.
31. **Sengul O., Völkle J., Valli A., Stadler R.**, Enhancing the sensitivity and selectivity of pyrene-based sensors for detection of small gaseous molecules via destructive quantum interference, *Phys. Rev. B.* 105 (16) (2022) 165428.

32. **Muhsen H. O., Kadhim B. B., Almayyali A. O. M.**, Electronic properties of InPNT drug carrier, *J. Chem. Pharm. Sci.* 10 (3) (2017) 1414–1418.
33. **Nasri A., Petrissans M., Fierro V., Celzard A.**, Gas sensing based on organic composite materials: Review of sensor types, progresses and challenges, *Mater. Sci. Semicond. Proc.* 128 (15 June) (2021) 105744.
34. **Haken H., Wolf H. C.**, *Molecular physics and elements of quantum chemistry: Introduction to experiments and theory*. 2nd ed. (Book Ser. “Advanced Texts in Physics (ADTP)”), Springer Science & Business Media, Berlin, Heidelberg, 2004.
35. **Thierfelder C., Witte M., Blankenburg S., et al.**, Methane adsorption on graphene from first principles including dispersion interaction, *Surf. Sci.* 605 (7–8) (2011) 746–749.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Kumar Y., Sahoo S., Chakraborty A. K.** Mechanical properties of graphene, defective graphene, multilayer graphene and SiC-graphene composites: A molecular dynamics study // *Physica B: Condensed Matter*. 2021. Vol. 620. 1 November. P. 413250.
2. **Elmghabar Z., Elidrysy A., Harir S., Drissi L.** Magnetic properties and magnetocaloric effect of diamond-shaped graphene bilayer quantum dots doped with magnetic impurities: A Monte Carlo study // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2024. Vol. 608. 15 October. P. 172443.
3. **Huang H.-J., Seenithurai S., Chai J.-D.** TAO-DFT study on the electronic properties of diamond-shaped graphene nanoflakes // *Nanomaterials*. 2020. Vol. 10. No. 6. P. 1236.
4. **Omeer T. A., Mohammed M. H.** Tuning the band gap in graphene nanoflakes via various impurities // *Nano-Structures & Nano-Objects*. 2023. Vol. 35. July. P. 101009.
5. **Batool D. B., Fallah H. H., Alwan A. S.** Geometrical optimization and some physical properties for sodium on copper clusters // *IOSR Journal of Applied Physics*. 2015. Vol. 7. No. 3 (Version II). Pp. 30–37.
6. **Aldulajjan S., Ajeebi A. M., Jedidi A., Messaoudi S., Raouafi N., Dhouib A.** Surface modification of graphene with functionalized carbenes and their applications in the sensing of toxic gases: a DFT study // *RSC (The Royal Society of Chemistry) Advances*. 2023. Vol. 13. No. 28. Pp. 19607–19616.
7. **Jabbar M. L., Al-Shejairy K. J.** A new fractal geometry doping for graphene nanofibers and crystal optimization: A study of functional density theory (FDD) // *Periydico Tchê Química*. 2020. Vol. 17. No. 35. Pp. 1148–1158.
8. **Jabbar M. L., Kadhim K. J.** Linear & nonlinear optical properties of undoped & doped graphene nanoribbon via TD-DFT study // *AIP Conference Proceedings*. 2020. Vol. 2292. No. 1. P. 030011.
9. **Benítez-Martínez S., Valcárcel M.** Graphene quantum dots in analytical science // *Trends in Analytical Chemistry*. 2015. Vol. 72. October. Pp. 193–113.
10. **Bao Q., Yang Z., Lu Z., He X.** Effects of graphene thickness and length distribution on the mechanical properties of graphene networks: A coarse-grained molecular dynamics simulation // *Applied Surface Science*. 2021. Vol. 570. 30 December. P. 151023.
11. **Leenaerts O., Partoens B., Peeters F. M.** Adsorption of small molecules on graphene // *Microelectronics Journal*. 2009. Vol. 40. No. 4–5. Pp. 860–862.
12. **Guerra T., Araujo L., Azevedo S.** Magnetic and electronic properties of diamond-shaped graphene-boron nitride nanoribbons and nanoflakes // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2019. Vol. 135. December. P. 109085.
13. **Yang J., Zhang Y., Kim D. Y.** Electrochemical sensing performance of nanodiamond-derived carbon nano-onions: Comparison with multiwalled carbon nanotubes, graphite nanoflakes, and glassy carbon // *Carbon*. 2016. Vol. 98. March. Pp. 74–82.
14. **Lahiani M. H., Chen J., Irin F., Poretzky A. A., Green M. J., Khodakovskaya M. V.** Interaction of carbon nanohorns with plants: uptake and biological effects // *Carbon*. 2015. Vol. 81. January. Pp. 607–619.
15. **Zhang X., Rajaraman B. R., Liu H., Ramakrishna S.** Graphene's potential in materials science and engineering // *RSC Advances*. 2014. Vol. 4. No. 55. Pp. 28987–29011.
16. **Deng Q., Chai J.-D.** Electronic properties of triangle-shaped graphene nanoflakes from TAO-DFT // *ACS Omega*. 2019. Vol. 4. No. 10. Pp. 14202–14210.
17. **Thu P. T., Mai N. T., Lien P. T., Tung N. T.** Magnetism in diamond graphene nanoflakes // *Vietnam Journal of Science and Technology*. 2023. Vol. 61. No. 1. Pp. 64–71.

18. **Jabbar M. L., Kadhim K. J.** Electronic properties of doped graphene nanoribbon and the electron distribution contours: A DFT study// *Russian Journal of Physical Chemistry B*. 2021. Vol. 15. No. 1. Pp. 46–52.
19. **Sarmada A., Pupon S.** The external electric field effect to hydrogen storage on BN co-doped graphene surface decorated by metal atoms: A DFT study // *Journal of Physical Science and Engineering*. 2020. Vol. 4. No. 2. Pp. 74–83.
20. **Xiang C., Li A., Yang S., Lan Z.** Enhanced hydrogen storage performance of graphene nanoflakes doped with Cr atoms: A DFT study// *RSC Advances*. 2019. Vol. 9. No. 44. Pp. 25690–25696.
21. **Kishnani V., Yadav A., Mondal K., Gupta A.** Palladium-functionalized graphene for hydrogen sensing performance: theoretical studies // *Energies*. 2021. Vol. 14. No. 18. P. 5738.
22. **Cruz-Martínez H., García-Hilerio B., Montejó-Alvaro F., Gazga-Villalobos A., Rojas-Chávez H., Sánchez-Rodríguez E. P.** Density functional theory-based approaches to improving hydrogen storage in graphene-based materials // *Molecules*. 2024. Vol. 29. No. 2. P. 436.
23. **Cruz-Martínez H., Rojas-Chávez H., Montejó-Alvaro F., Peca-Castaceda Y. A., Matadamas-Ortiz P. T., Medina D. I.** Recent developments in graphene-based toxic gas sensors: a theoretical overview // *Sensors*. 2021. Vol. 21. No. 6. P. 1992.
24. **Alwan A. S., Talib S. H.** Quantum computational study of the electronic properties of the interactions between 3THF and some metallic linear molecules using DFT // *Journal of Education for Pure Science*. 2021. Vol. 11. No. 2. Pp. 53–67.
25. **Toriyama M. A., Ganose A. M., Dylla M., Anand S.** How to analyze a density of states // *Materials Today Electronics*. 2022. Vol. 1. May. P. 100002.
26. **Aqeel S., Shwya A.** Molecular geometry and electronic characteristics of zirconium and (zirconium-Ge, Si, Sn) utilizing density functional theory (DFT) codes at 3-21G basis set // *NeuroQuantology*. 2022. Vol. 20. No. 8. Pp. 2767–2778.
27. **Ahmed A. B.** Studying the electronic characteristics and physisorption of OTS on the pure silver surfaces (Ag_{10}), (Ag_{15}) and (Ag_{18}) // *University of Thi-Qar Journal of Science*. 2023. Vol. 10. No. 2. Pp. 151–159.
28. **Alwan A. Sh., Ajeel S. Kh., Jabbar M. L.** Theoretical study for Coronene and Coronene-Al, B, C, Ga, In and Coronene-O interactions by using Density Functional Theory // *University of Thi-Qar Journal*. 2019. Vol. 14. No. 4. Pp. 80–94.
29. **Salih F. T., Alwan A. Sh.** Charge transfer and physisorption mechanism between tosylate, pyrimidine and the surfaces of nanocopper (Cu) and (Cu) utilizing algorithms of (DFT) // *Journal of Education for Pure Science*. 2023. Vol. 13. No. 4. Pp. 74–96.
30. **Talib S. H., Alwan A. Sh.** Geometrical optimization and some electronical properties for pyrrole-metal interactions using DFT, B3LYP basis sets // *Journal of Optoelectronics Laser*. 2022. Vol. 41. No. 7. Pp. 1300–1312.
31. **Sengul O., Völkle J., Valli A., Stadler R.** Enhancing the sensitivity and selectivity of pyrene-based sensors for detection of small gaseous molecules via destructive quantum interference // *Physical Review B*. 2022. Vol. 105. No. 16. P. 165428.
32. **Muhsen H. O., Kadhim B. B., Almayyali A. O. M.** Electronic properties of InPNT drug carrier // *Journal of Chemical and Pharmaceutical Sciences*. 2017. Vol. 10. No. 3. Pp. 1414–1418.
33. **Nasri A., Petrisans M., Fierro V., Celzard A.** Gas sensing based on organic composite materials: Review of sensor types, progresses and challenges // *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2021. Vol. 128. 15 June. P. 105744.
34. **Haken H., Wolf H. C.** Molecular physics and elements of quantum chemistry: Introduction to experiments and theory. 2nd edition (Book Series “Advanced Texts in Physics (ADTP)”). Berlin, Heidelberg: Springer Science & Business Media, 2004. 596 p.
35. **Thierfelder C., Witte M., Blankenburg S., Rauls E., Schmidt W.** Methane adsorption on graphene from first principles including dispersion interaction // *Surface Science*. 2011. Vol. 605. No. 7–8. Pp. 746–749.

THE AUTHORS

KHALAF Rihab H.

University of Thi-Qar, Department of Physics, College of Science

University of Thi-Qar 362C+65R, An Nasiriyah, Thi-Qar Governorate, 64001, Republic of Iraq.

rihab.khalaf@utq.edu.iq

JABBAR Mohammed L.

University of Thi-Qar, Department of Physics, College of Science

University of Thi-Qar, 362C+65R, An Nasiriyah, Thi-Qar Governorate, 64001, Republic of Iraq.

mohammed25382@gmail.com

ORCID: 0009-0003-4737-7008

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ХАЛАФ Рихаб Х. – магистр наук, сотрудник кафедры физики Научного колледжа Университета Ди-Кар, г. Эн-Насирия, Республика Ирак.

362C+65R, Republic of Iraq, Thi-Qar Governorate, An Nasiriyah, University of Thi-Qar.

rihab.khalaf@utq.edu.iq

ДЖАББАР Мохаммед Л. – PhD, доцент кафедры физики Научного колледжа Университета Ди-Кар, г. Эн-Насирия, Республика Ирак.

362C+65R, Republic of Iraq, Thi-Qar Governorate, Nasiriyah, University of Thi-Qar.

mohammed25382@gmail.com

ORCID: 0009-0003-4737-7008

Received 02.09.2025. Approved after reviewing 05.11.2025. Accepted 07.11.2025.

Статья поступила в редакцию 02.09.2025. Одобрена после рецензирования 05.11.2025. Принята 07.11.2025.

Научная статья

УДК 541.64:544.77:532.77:620.186

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19109>


СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОДЕГРАДАЦИИ РАСТВОРОВ СВОБОДНОГО И СВЯЗАННОГО РАДАХЛОРИНА

С. В. Валуева^{1,2} , П. Ю. Морозова^{1,2}, М. Э. Вылегжанина¹,

Л. М. Чернова¹, Л. Н. Боровикова¹

¹ Филиал НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИВС, Санкт-Петербург, Россия;

² Национальный медицинский исследовательский центр онкологии имени Н. Н. Петрова,
Санкт-Петербург, Россия;

 svalu67@mail.ru

Аннотация. Методами УФ/видимой спектроскопии, атомно-силовой микроскопии и люминесценции проведены сравнительные исследования фотодеградации свободного фотосенсибилизатора – радахлорина и радахлорина в составе трехкомпонентной селенсодержащей наносистемы (ФС-2) на основе амфифильной молекулярной щетки (АМЩ) с целлюлозной основной цепью и боковыми цепями полиметакриловой кислоты (связанного радахлорина). Установлено влияние длительности светового облучения на оптическую плотность и интенсивность люминесценции радахлорина в обоих состояниях. Обнаружено, что АМЩ препятствуют ассоциации наночастиц селена в растворе, образуя до облучения дискретные сферические наноструктуры. После облучения в течение 60 мин наноструктуры приобретают эллипсоидальную форму; кроме того, наблюдается тенденция к их ассоциации. На основании спектральных данных для ФС-2 до и после облучения рассчитаны значения ширины запрещенной зоны и диаметра наночастиц селена.

Ключевые слова: селенсодержащая наносистема, радахлорин, фотодеградация, наночастица, наноструктура, морфология, ширина запрещенной зоны

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-25-00413 «Разработка новых селенсодержащих противоопухолевых препаратов для фотодинамической терапии»).

Для цитирования: Валуева С. В., Морозова П. Ю., Вылегжанина М. Э., Чернова Л. М., Боровикова Л. Н. Сравнительное исследование фотодеградации растворов свободного и связанного радахлорина // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 106–120. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19109>

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.19109>


THE PHOTODEGRADATION OF THE FREE AND BOUND RADACHLORIN SOLUTIONS: A COMPARATIVE STUDY

S. V. Valueva^{1,2} , P. Yu. Morozova^{1,2}, M. E. Vylegzhanina¹,

L. M. Chernova¹, L. N. Borovikova¹

¹ NRC “Kurchatov Institute” – PNPI – IMC, St. Petersburg, Russia;

² National Medical Research Center of Oncology named after N. N. Petrov,
St. Petersburg, Russia;

 svalu67@mail.ru

Abstract. The comparative photodegradation studies of a free photosensitizer Radachlorine and Radachlorine being a part of the triple selenium-containing nanosystem (PS-2) based on the amphiphilic molecular brush (AMB) with a cellulose backbone and side chains of polymethacrylic acid (bound Radachlorine) have been performed using UV/visible spectroscopy, atomic force microscopy, and luminescence. The effect of the light exposure time on the optical density and luminescence intensity of Radachlorine in both states was established. The AMBs were found to hinder the association of selenium nanoparticles in the solution forming discrete spherical nanostructures before irradiation. But the nanostructures acquired an ellipsoidal shape after 60 min exposure; in addition, there was a tendency towards their association. On the basis of the UV/visible spectroscopy data for the PS-2 obtained before and after irradiation, the values of the band gap energy and diameter of the selenium nanoparticles were calculated.

Keywords: selenium-containing nanosystem, Radachlorine, photodegradation, nanoparticle, nanostructure, morphology, band gap energy

Funding: The work was supported by the Russian Science Foundation (Grant No. 24-25-00413 “Development of new selenium-containing anticancer drugs for photodynamic therapy”).

For citation: Valueva S. V., Morozova P. Yu., Vylegzhaniina M. E., Chernova L. M., Borovikova L. N., The photodegradation of the free and bound Radachlorin solutions: A comparative study, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (1) (2026) 106–120. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19109>

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

Введение

Фотодинамическая терапия – это перспективный малоинвазивный метод лечения доброкачественных и злокачественных опухолей. Применение этого метода в сочетании с химиотерапией, ионизирующим излучением или хирургическим вмешательством позволяет повысить эффективность лечения болезней онкологического профиля. В отличие от радиотерапии и хирургического вмешательства, фотодинамическую терапию можно проводить многократно, причем на одном и том же участке тела пациента [1 – 5]. Этот метод основан на накоплении фотосенсибилизатора (ФС) в злокачественной ткани после его введения [5 – 7]. ФС поглощает световую энергию и индуцирует выработку активных форм кислорода в среде опухоли, которые убивают опухолевые клетки [1 – 4, 8]. Еще с 1998 года ФС первого поколения – фотогем разрешен Министерством здравоохранения Российской Федерации для медицинского применения [9]. Однако ряд проблем, связанных с использованием этого ФС, таких как повышенная светочувствительность кожи и плохое поглощение красного света, которое должно проникать в ткани, привели к разработке новых ФС с более благоприятными свойствами. ФС второго поколения характеризуются более короткими периодами фотосенсибилизации, более длинными волнами активации (и, следовательно, активируются в более глубоких тканях), более высокими значениями выхода синглетного кислорода и селективностью к опухолям.

Представителями ФС второго поколения, производимыми в России, являются радахлорин и фотодитазин (фармацевтические компании «Рада-Фарма» и «Вета-Гранд», соответственно). В России указанные препараты используют в клинических исследованиях фотодинамической терапии при злокачественных опухолях кожи, полости рта, гортани, желудка, бронхов, пищевода, вульвы и других [10, 11]. Однако большинство ФС не обладают фотостабильностью [2, 12]. В растворах ФС обнаруживают деградацию под действием света, что можно регистрировать по снижению их начального оптического поглощения и интенсивности люминесценции [2, 13]. При этом активным элементом, разрушающим молекулы ФС при световом облучении, выступает синглетный кислород, и в этом случае речь идет о корреляции процесса фотодегradации с эффективностью генерации синглетного кислорода; другими словами, чем выше выработка синглетного

кислорода, тем интенсивнее протекает процесс окисления ФС, способствующий ускорению фотодеградаци.

В качестве ФС в настоящей работе использовался радахлорин – многокомпонентный препарат хлоринового ряда (русский препарат, широко применяемый в медицине в противоопухолевой терапии).

Радахлорин имеет следующий процентный состав [14, 15]:

Соединение	Содержание, %
хлорин е6	80 – 90
пурпурин 5	5 – 20
пурпурин 18	0 – 15
хлорин р6	0 – 15

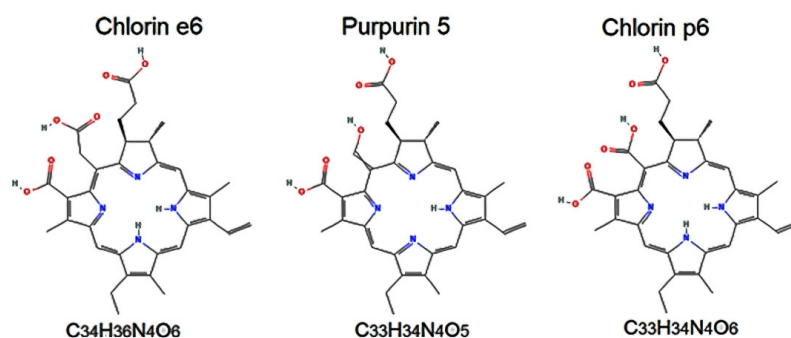


Рис. 1. Структурные и химические формулы солей, входящих в состав радахлорина

Химические и структурные формулы солей, входящих в состав радахлорина, представлены на рис. 1. В качестве дополнительного ингредиента использовали гидрофобные наночастицы селена Se^0 . Физико-химические свойства селена становятся особенно полезными при уменьшении размера частиц селена до наноуровня, в диапазоне от 1 до 100 нм. В указанном диапазоне значение отношения поверхности наночастицы к ее объему делается большим, увеличиваются ее поверхностная энергия и пространственные ограничения, что повышает эффективность ее физико-химического и медико-биологического действия, по сравнению с объемными материалами [16]. Так, например, селен проявляет высокую противоопухолевую активность [17 – 20]. Следует, помимо этого, отметить, что наноконпозиты селена, полученные разными способами и исследованные на данный момент, по всей видимости, отвечают критериям, необходимым для биомедицинских приложений *in vitro* и *in vivo*, являясь биосовместимыми, биоразлагаемыми и фотостабильными [21], тогда как прочие органические флуоресцентные соединения лишь частично удовлетворяют указанным требованиям [22]. В связи с этим особый интерес для стабилизации наночастиц селена (с целью решения задачи модификации ФС) и изучения оптических/фотолюминесцентных свойств селенсодержащих наносистем представляют амфифильные молекулярные щетки, которые имеют в своем составе функциональные группы с различным сродством к полярным и неполярным растворителям [21 – 25]. В данном случае можно предвидеть, что используемые полимерные стабилизаторы повлияют на размерные характеристики и оптические свойства селенсодержащих наносистем.

В качестве полимерного стабилизатора в данной работе использовалась амфифильная молекулярная щетка с гидрофобной основной целлюлозной цепью и гидрофильными боковыми цепями полиметакриловой кислоты [26], с молекулярной массой, равной 36400 Да и плотностью прививки боковых цепей, составляющей 100%. Этот полимерный стабилизатор сохраняет свои характеристики при комнатной температуре, обладает свойствами полиамфолита и имеет двойственную природу; при значительном количестве боковых цепей и высокой частоте прививки он способен включать медикаментозные вещества в зону, непроницаемую для воды, благодаря гидрофобным взаимодействиям. Такие полимерные стабилизаторы целесообразно использовать для адресной доставки гидрофобных лекарственных препаратов [26 – 28]. Применение полимерных стабилизаторов

с высокой степенью прививки боковых групп для фиксации наночастиц позволяет расширить набор физических, химических, а также медицинских и биологических характеристик полученных нанобъектов, а также внести разнообразие в этот набор.

Целью данной работы были анализ морфологии и сравнение спектров поглощения/люминесценции как свободного радахлорина (ФС-1), так и радахлорина, входящего в состав трехкомпонентной селенсодержащей наносистемы (ФС-2), для выяснения влияния структуры этого фотосенсибилизатора на процесс его фотодеградаци.

Экспериментальная часть

Световое облучение образцов. В качестве меры фотодеградаци мы использовали изменение спектров оптического поглощения и люминесценции. Для этого экспериментального исследования было собрано специальное осветительное устройство с использованием светоизлучающего диода (рис. 2). Количество поглощенных фотонов, необходимое для преобразования фиксированного количества сенсибилизатора, выступает важным параметром для сравнения различных фотосенсибилизаторов, ввиду их фотодинамической эффективности [29, 30].

Растворы фотосенсибилизаторов облучали светодиодной матрицей 3 с длиной волны 405 нм и мощностью 1,8 Вт. Фотография и схема установки, используемой при облучении исследуемых растворов, представлена на рис. 2. Образцы жидкости заливали в кварцевые кюветы 2 (10 × 10 × 10 мм), которые после облучения помещали в измерительные отсеки приборов для измерения спектров оптического поглощения раствора и его спектров люминесценции.

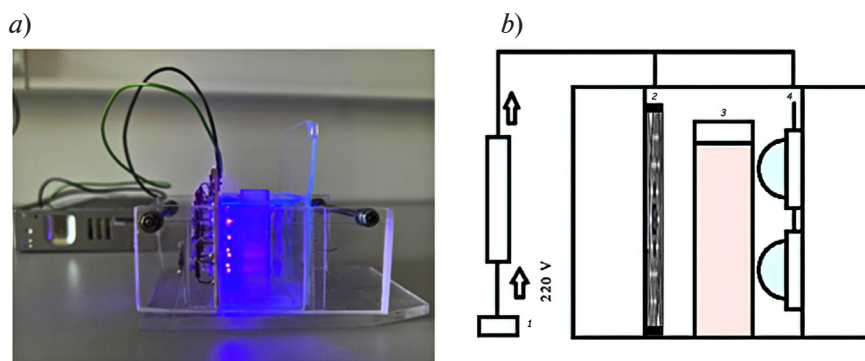


Рис. 2. Фотография (а) и принципиальная схема (b) установки для облучения растворов: 1 – источник питания; 2 – алюминиевое зеркало, 3 – кварцевая кювета с раствором, 4 – светодиодная матрица, составленная из 10 светодиодов марки BL-L522VC (длина волны 405 нм, суммарная мощность 1,8 Вт)

Синтез трехкомпонентной селенсодержащей наносистемы. Указанный синтез фотосенсибилизатора проводили в стерильных условиях, которые обеспечивали асептичность полученных систем. Вся использованная посуда предварительно была автоклавирована при 121°C и 1,1 атм (автоклав фирмы “Mocom”, Италия). В качестве растворителя для приготовления всех ингредиентов использовалась вода для инъекций буфус (фармкомпания “Renewal”, Россия).

Первый этап синтеза. В реакционную колбу емкостью 20 мл наливали 5 мл раствора полимерного стабилизатора – молекулярной щетки с целлюлозной основной цепью и боковыми цепями полиметакриловой кислоты, с начальной концентрацией 0,2 масс.%, затем добавляли 3 мл воды и 1 мл раствора селенистой кислоты H_2SeO_3 с концентрацией 1,64 мг/мл. После перемешивания полученного раствора с помощью магнитной мешалки (в течение 10 мин), в реакционную колбу добавляли 1 мл восстановителя – аскорбиновой кислоты $C_6H_8O_6$ с концентрацией 4,47 мг/мл и оставляли эту жидкость при комнатной температуре на 24 часа (рис. 3). Общий объем полученного раствора был равен 10 мл. Концентрация наночастиц селена Se^0 составляла $c_{Se^0} = 0,01$ масс.%, а полимерного стабилизатора – $c_{PS} = 0,1$ масс.%, т.е. отношение $v = c_{Se^0}/c_{PS} = 0,1$.

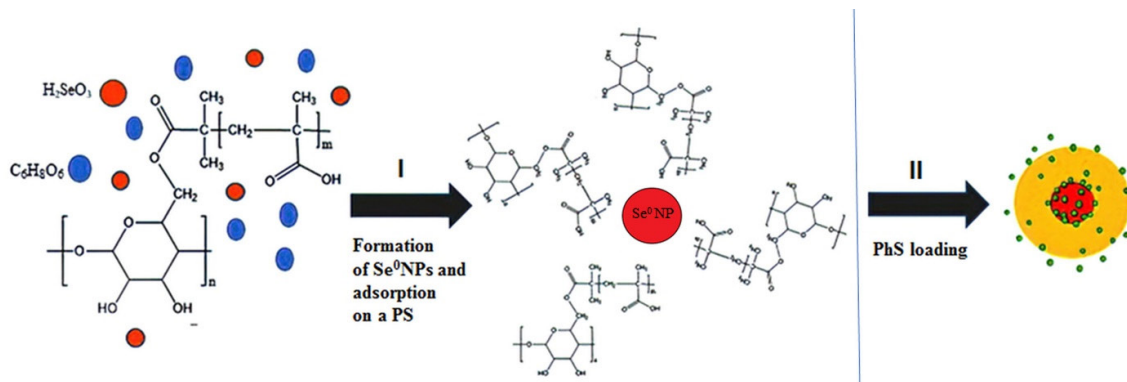


Рис. 3. Схема двухстадийного (I и II) синтеза трехкомпонентной селенсодержащей наносистемы (ФС-2):

NPs – наночастицы, PhS – фотосенсибилизатор, PS – полимерный стабилизатор

Второй этап синтеза. Через сутки в полученный водный раствор наночастиц Se⁰ с полимерным стабилизатором добавляли раствор радахлорина Rd (стандартный концентрат для приготовления раствора для инфузий – 0,35 %) и выдерживали еще сутки. В итоге концентрация фотосенсибилизатора составляла $c_{Rd} = 3,5 \cdot 10^{-3}$ мг/мл (см. рис. 3). Полученная система не подвергалась дополнительной химической очистке, так как в результате реакции получения наночастиц селена Se⁰ образуются вода и следовые количества дегидроаскорбиновой кислоты.

Регистрация спектров оптического поглощения. Измерения временной динамики оптической плотности D растворов ФС-1 и ФС-2 проводили на спектрофотометре Shimadzu UV-1900 (Япония) в диапазоне длин волн 220 – 800 нм, в кварцевых кюветках размерами 1 × 1 см (условия стандартные). Относительная суммарная погрешность при регистрации спектров не превышала 2%.

Регистрация спектров люминесценции. Спектры получали с помощью спектрофлуориметра Shimadzu RF 6000 (Япония) с шириной щели канала возбуждения и испускания 3 × 3 нм в диапазоне длин волн 200 – 900 нм. Измерения образцов проводились в кварцевых кюветках 1 × 1 см (условия стандартные).

Применение метода атомно-силовой микроскопии (АСМ). Исследования морфологии ФС-2 (до и после облучения) проводили на атомно-силовом микроскопе NanotopNT-206 (ОДО «Микротестмашины», Беларусь). Жидкостный образец наносили на поверхность свежего скола слюды. Измерения выполняли в атмосферных условиях, в контактном режиме, с использованием кремниевых кантилеверов FMG01, имеющих коэффициент жесткости $k = 3,0$ Н/м и радиус кривизны кончика острия 10 нм. Экспериментальные данные обрабатывали с помощью программы Surface Explorer, при этом рассчитывали среднеарифметическое отклонение профиля R_a и среднеквадратичное отклонение профиля R_q для отображаемого участка поверхности (ГОСТ 25142-82. Шероховатость поверхности. Термины и определения. (СТ СЭВ 1156-78). Дата введения 1983-01-01).

Основные результаты и их обсуждение

На рис. 4 представлены спектры оптического поглощения – зависимости величины оптической плотности образцов растворов ФС-1 и ФС-2 от длины волны при их облучении светом с длиной волны $\lambda_{exc} = 405$ нм для разных времен экспозиции t . Сразу обращает на себя внимание существенное изменение величины максимума оптической плотности и формы кривой оптического поглощения полосы Core ($\lambda = 350 - 430$ нм), что может быть связано со встраиванием наночастиц селена в образце ФС-2 [31]. Для образца ФС-1 также наблюдается заметное снижение значений оптической плотности в области полосы Core. Тенденция к понижению величины D в области полосы Core наблюдается и для ФС-2.

Любопытная картина имеет место в Q -области ($\lambda = 620 - 700$ нм): если для раствора ФС-1 при увеличении времени экспозиции t происходит практически монотонное снижение величины оптической плотности, то для ФС-2 этот спад сопровождается bathochromным сдвигом Q -полосы после 20 мин облучения растворов светом с длиной волны $\lambda_{exc} = 405$ нм.

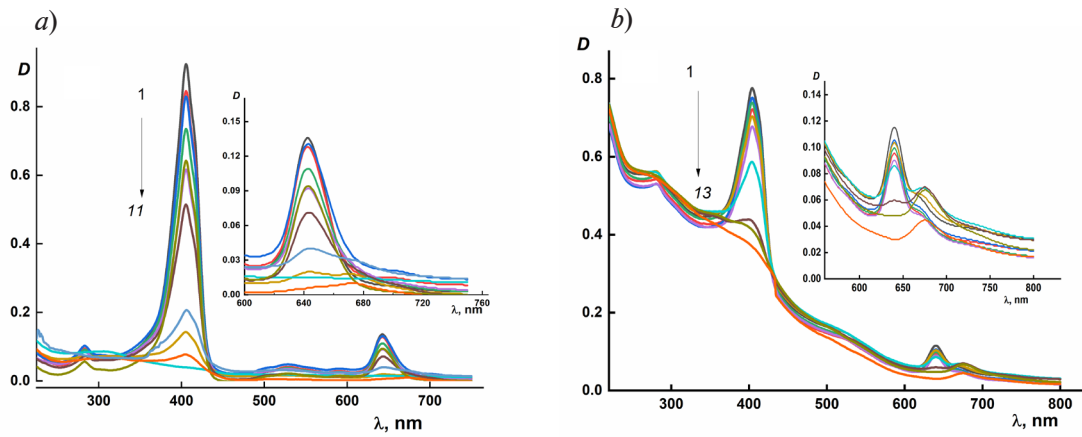


Рис. 4. Зависимости величины оптической плотности растворов ФС-1 (a) и ФС-2 (b) от длины волны при их разной экспозиции t светом с длиной волны $\lambda_{exc} = 405$ нм (мощность 1,8 Вт).
 Времена экспозиции t , мин: 0 (черные кривые 1), 0,5 (красные 2), 1,0 (синие 3), 2,0 (зеленые 4), 3,0 (салатные 5), 5,0 (серые 6), 10 (голубые 7), 15 (желтые 8), 20 (бордовые 9), 30 (розовые 10), 60 (оранжевые 11), 90 – 180 (фиолетовые 12–14)

Более детально картина изменений величины оптической плотности в максимумах полос поглощения от времени облучения для образцов ФС-1 и ФС-2 представлена на рис. 5. Так, при $\lambda_{max} = 405, 640$ и 675 нм для ФС-1 наблюдается резкий спад величины оптической плотности практически до $D_{max} = 0$, тогда как для ФС-2 за все время эксперимента (180 мин) таких масштабных изменений величины D_{max} не наблюдалось. Это, скорее всего, обусловлено «фиксацией» наночастицами селена порфиринового кольца радахлорина [26, 31] и изменением морфологии наноструктур.

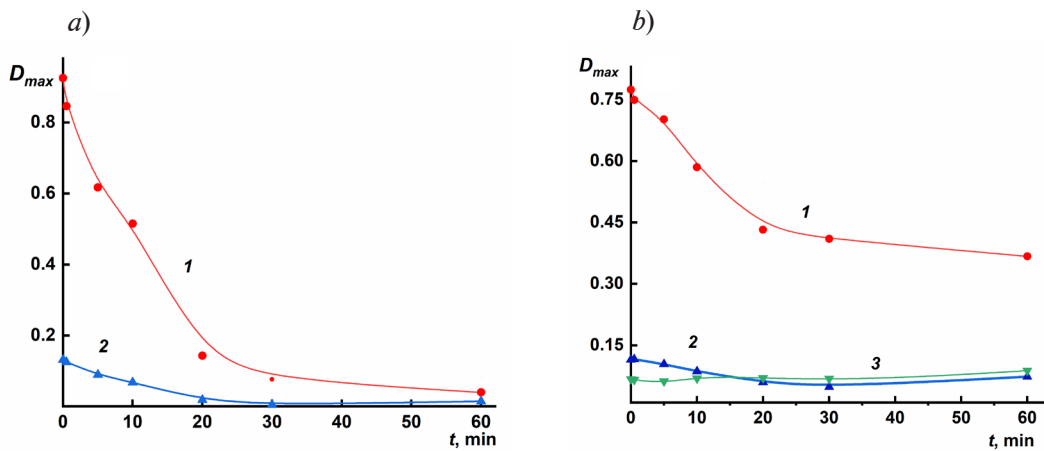


Рис. 5. Зависимости максимальной величины оптической плотности D_{max} образцов ФС-1 (a) и ФС-2 (b) от времени экспозиции t светом длиной волны $\lambda_{exc} = 405$ нм (мощность 1,8 Вт) на соответствующих значениях длины волны λ_{max} , нм: 405 (красные кривые 1), 640 (синие кривые 2), 675 (зеленая кривая 3)

Ширина запрещенной зоны E_g (минимальная энергия, необходимая для перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости) была рассчитана для ФС-2 на основании данных, представленных на рис. 4. Расчет E_g был выполнен для спектральной области вблизи края полосы спектра поглощения по следующему уравнению:

$$Dh\nu = (h\nu - E_g)n,$$

где D – оптическая плотность; h , Дж·с, – постоянная Планка; ν , Гц, – частота фотонов; n – параметр, связанный с различными типами электронных переходов. Этот параметр может принимать значения 1/2, 2,0, 3/2 или 3,0 [32] (в нашем случае было принято $n = 1/2$).

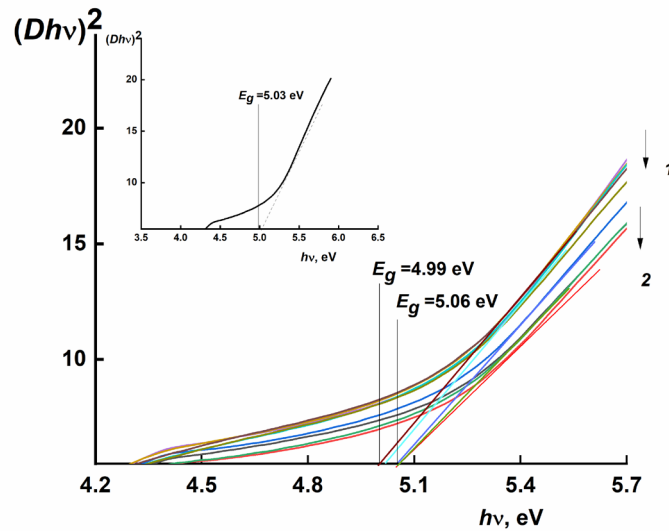


Рис. 6. Графики для расчета энергии запрещенной зоны, включающие две группы кривых, которые различаются длительностью экспозиции t (в мин).
 I группа: $t = 5$ (сиреневая кривая 5), 10 (бордовая 6), 20 (голубая), 30 (салатная), 60 (розовая);
 II группа: $t = 0,5$ (темно-серая кривая 1), 1,0 (красная 2), 2,0 (синяя 3), 3,0 (зеленая 4).
 На вставке: отдельный график для $t = 0,5$

На основании полученных зависимостей были рассчитаны значения E_g (см. таблицу) для раствора ФС-2 до и после облучения. Ширина запрещенной зоны для красного аморфного селена составляет 2,03 эВ [32]. Таким образом, наночастицы селена Se^0 в отсутствие полимерного стабилизатора быстро агрегируют, образуя агрегаты достаточно большого размера (порядка нескольких сотен нанометров); следовательно, полимерный стабилизатор образует экранирующую оболочку, которая препятствует агрегации, и размер наночастицы Se^0 становится намного меньше. В связи с этим, согласно результатам статей [33, 34], «эффект квантового ограничения» приводит к увеличению ширины запрещенной зоны (квантовое ограничение возникает, когда размеры наночастиц становятся сопоставимыми с длиной волны электронов или других частиц; при этом проявляются квантовые эффекты, влияющие на их свойства).

Увеличение величины E_g при переходе от красного аморфного селена к тройной селенсодержащей наносистеме ФС-2 можно объяснить размерными эффектами в этой наносистеме. Энергия первого экситонного максимума (энергия ширины запрещенной зоны) определяется размером наночастицы и описывается (без учета малых электростатических поправок) следующей формулой:

$$E_g = E_0 + 2\pi\hbar^2/\mu d^2 = \text{const}/d^2 \quad (1)$$

где E_0 , эВ, – ширина запрещенной зоны аморфного селена; d , нм, – диаметр наночастицы [33].

Параметр μ следует выражению

$$1/\mu = 1/m_e + 1/m_h,$$

где m_e , m_h , кг, – эффективные массы электрона и дырки, $m_e = 0,25m_0$, $m_h = 1,5m_0$ (m_0 – масса электрона).

Как видно из данных таблицы, значения параметров E_g и d не зависят от времени облучения. Такой результат может свидетельствовать о хорошей экранировке селенового ядра полимерным стабилизатором (процесс фотодеградации не затрагивает внутреннюю структуру ФС-2).

Спектры люминесценции образцов ФС-1 и ФС-2 при длине волны возбуждения $\lambda = 405$ нм в диапазоне длин волн $\lambda = 650 - 750$ нм представлены на рис. 7. Видно, что в указанном диапазоне, на различных временах облучения образцов t , формируются четко выраженные полосы люминесценции, одинаковые по форме, но резко различные по

Таблица

Зависимость расчетных значений параметров трехкомпонентной селенсодержащей наносистемы ФС-2 от времени световой экспозиции

Экспозиция t , мин	Ширина запрещенной зоны E_g , эВ	Диаметр d наночастицы Se^0 , нм
0	5,0	5,4
< 10	5,1	5,4
> 10	5,0	5,5

Примечание. Представлены усредненные значения параметров.

уровню интенсивности, причем для образца ФС-2 интенсивность эмиссии ниже, чем для ФС-1 на протяжении всего эксперимента. Следует также указать на незначительный сдвиг максимума полосы люминесценции у раствора ФС-2, по сравнению с ФС-1 (с 654 до 648 нм).

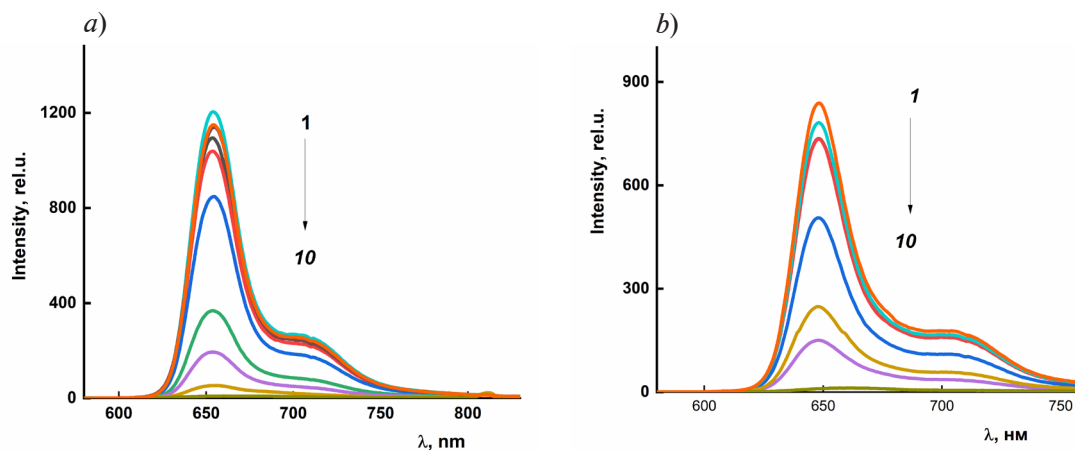


Рис. 7. Спектры люминесценции образцов ФС-1 (а) и ФС-2 (б) при ее возбуждении светом с длиной волны 405 нм для различных времен экспозиции t на той же длине волны (405 нм).

Для обоих образцов значения t , мин: 0 (кривая 1), 0,5 (2), 1,0 (3), 3,0 (4), 5,0 (5), 10 (6), 15 (7), 20 (8), 30 (9), 60 (10)

На рис. 8 представлена зависимость интенсивности люминесценции от времени облучения t в точке максимума. Четко прослеживается разница между временными периодами экспозиции, соответствующими полной фотодеградации радахлорина в свободном и связанном состояниях: для ФС-1 это время составило 21 мин, а для ФС-2 – 15 мин. Учет равенства концентрации фотосенсибилизатора в исследованных образцах позволяет заключить, что образование комплекса способствует более быстрой фотодеградации радахлорина. Это, кроме того, свидетельствует о том, что в случае ФС-2 большее количество активного кислорода вырабатывается за меньшее время, чем в случае ФС-1. Таким образом, факт превышения величины оптической плотности образца ФС-2 над аналогичной величиной для ФС-1 (см. рис. 4) свидетельствует о том, что процесс фотодеградации не затрагивает внутреннюю структуру ФС-2, а наночастицы селена играют роль инициаторов процесса фотодеградации образца.

На рис. 9 представлены АСМ-изображения (3D и топография) поверхности тонких пленок, отлитых из водных растворов трехкомпонентной селенсодержащей наносистемы ФС-2; изображения были получены до облучения (а) и после него (б). Время экспозиции составляло 60 мин, т.е. соотносилось с полной фотодеградацией (см. кривую 10 на рис. 7) По АСМ-снимкам обнаружено, что до облучения полимерный стабилизатор препятствовал ассоциации наночастиц селена в растворе: видны дискретные сферические

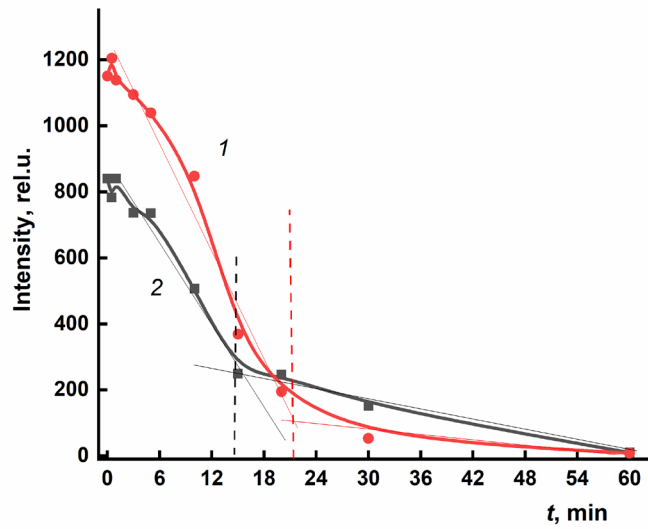


Рис. 8. Временная динамика уровня интенсивности флуоресценции образцов ФС-1 (кривая 1) и ФС-2 (кривая 2): прямые линии – касательные к кривым интенсивности, точки их пересечения для моментов t_1 и t_2 отмечены вертикальными пунктирными линиями

наноструктуры диаметром $D_{AFM} = 100 - 250$ нм. После же облучения, в течение 60 мин, наблюдалось изменение формы наноструктур (сферы трансформировались в эллипсоиды); кроме того, наблюдалась тенденция к их ассоциации.

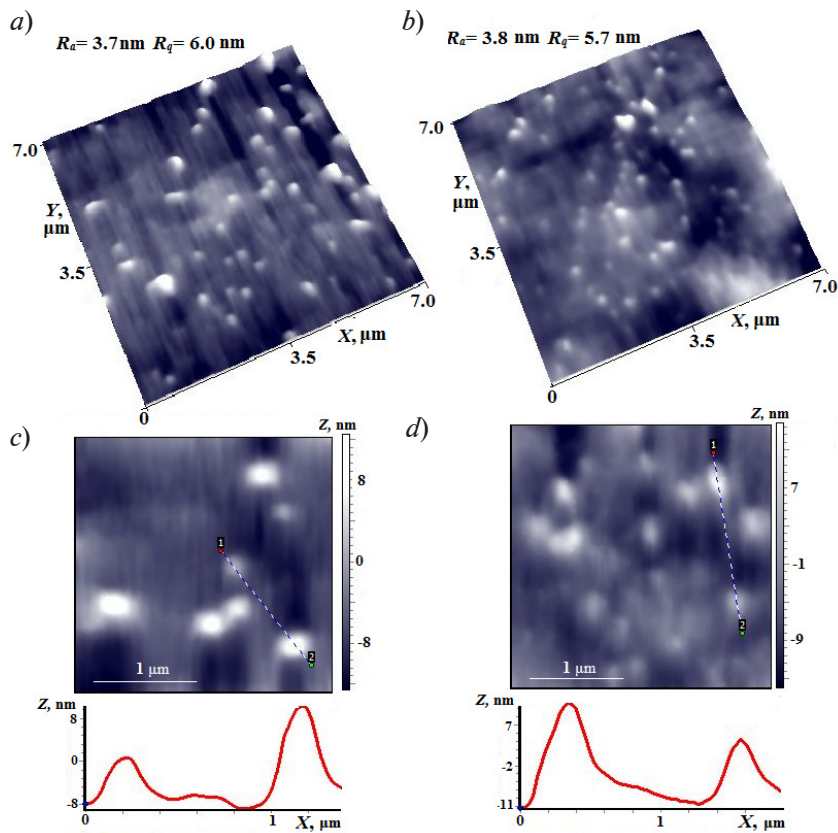


Рис. 9. АСМ-изображения поверхности тонкой пленки наносистемы ФС-2, полученной на поверхности скола слюды, до облучения светом (а) и после него ($t = 60$ мин) (b), а также соответствующие профили выделенных участков поверхности (отрезки 1...2) (c, d) с расчетными параметрами отклонения профиля R_a и R_q



Возможное следствие такого изменения формы наноструктур фотосенсибилизатора — это нарушение симметрии электронного облака его молекул, что неизбежно приводит к снижению устойчивости фотосенсибилизатора к внешним воздействиям, в том числе и к облучению светом. Указанное снижение, в частности, находит отражение в ускоренной фотодеградациии фотосенсибилизатора.

Заключение

Сравнительные исследования фотодеградациии свободного и связанного радахлорина (последний входил в состав тройной селенсодержащей наносистемы), проведенные методами УФ/видимой спектроскопии и люминесценции, показали влияние длительности фиолетового излучения (длина волны — 405 нм) на оптическую плотность и интенсивность люминесценции свободного и связанного соединений, а также на темпы изменения этих величин в зависимости от состава фотосенсибилизатора.

Методом атомно-силовой микроскопии обнаружено, что полимерный стабилизатор до воздействия излучения на образец ФС-2 препятствует ассоциации наночастиц селена в растворе, способствуя формированию дискретных сферических наноструктур. После облучения в течение 60 мин наноструктуры ФС-2 приобретают эллипсоидальную форму вместо исходной сферической. Следствием такой трансформации наноструктур фотосенсибилизатора является, скорее всего, нарушение симметрии электронного облака молекул ФС, что неизбежно приводит к снижению устойчивости ФС к внешним воздействиям, в том числе и к световому излучению.

Рассчитанные на основании данных УФ/видимой спектроскопии значения энергии запрещенной зоны E_g и диаметра наночастиц селена d для образца ФС-2 (до и после облучения) показали отсутствие влияния облучения на указанные параметры, что может свидетельствовать о надежном экранировании селенового ядра полимерным стабилизатором. Другими словами, процесс фотодеградациии не затрагивает внутреннюю структуру тройной селенсодержащей наносистемы ФС-2 (связанного радахлорина).

Благодарность

Коллектив авторов статьи выражает благодарность ведущему инженеру лаборатории №13 Филиала НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ — ИВС Кутину Александру Александровичу за разработку и сборку прибора для проведения экспериментов по облучению образцов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Brown S. B., Brown E. A., Walker I.** The present and future role of photodynamic therapy in cancer treatment // *The Lancet Oncology*. 2004. Vol. 5. No. 8. Pp. 497–508.
2. **Correia J. H., Rodrigues J. A., Pimenta S., Dong T., Yang Zh.** Photodynamic therapy review: Principles, photosensitizers, applications, and future directions // *Pharmaceutics*. 2021. Vol. 13. No. 9. P. 1332.
3. **Jiang W., Liang M., Lei Q., Li G., Wu S.** The current status of photodynamic therapy in cancer treatment // *Cancers (Basel)*. 2023. Vol. 15. No. 3. Pp. 585.
4. **Aebisher D., Serafin I., Batóg-Szczęch K., Dynarowicz K., Chodurek E., Kawczyk-Krupka A., Bartusik-Aebisher D.** Photodynamic therapy in the treatment of cancer — The selection of synthetic photosensitizers // *Pharmaceutics*. 2024. Vol. 17. No. 7. Pp. 932–957.
5. **Aebisher D., Czech S., Dynarowicz K., Misiolek M., Komosińska-Vassev K., Kawczyk-Krupka A., Bartusik-Aebisher D.** Photodynamic therapy: Past, current, and future // *International Journal of Molecular Sciences*. 2024. Vol. 25. No. 20. P. 11325.
6. **Bienia A., Wiecheć-Cudak O., Murzyn A. A., Krzykawska-Serda M.** Photodynamic therapy and hyperthermia in combination treatment — Neglected forces in the fight against cancer // *Pharmaceutics*. 2021. Vol. 13. No. 8. P. 1147.
7. **Baskaran R., Lee J., Yang S.-G.** Clinical development of photodynamic agents and therapeutic applications // *Biomaterials Research*. 2018. Vol. 22. 26 September. P. 25.

8. **Gonçalves de Faria C. M., Inada N. M., Kurachi C., Bagnato V. S.** Determination of the threshold dose distribution in photodynamic action from *in vitro* experiments // *Journal of Photochemistry and Photobiology*. 2016. Vol. 162. September. Pp. 168–175.

9. **Menezes P. F. C., Melo C. A. S., Bagnato V. S., Imasato H., Perussi J. R.** Influence of pH on the phototransformation process of photogem // *Lazer Methods in Chemistry, Biology, and Medicine*. 2009. Vol. 19. No. 7. Pp. 435–442.

10. **Dadeko A. V., Lilge L., Kaspler P., Murav'eva T. D., Starodubtcev A. M., Kiselev V. M., Zarubaev V. V., Ponomarev G. V.** Photophysical properties and *in vitro* photocytotoxicity of disodium salt 2.4-di (alpha-methoxyethyl)-deuteroporphyrin-IX (Dimegine) // *Photodiagnosis and Photodynamic Therapy*. 2019. Vol. 25. March. Pp. 35–42.

11. **Муравьева Т. Д., Дадеко А. В., Киселев В. М., Крисько Т. К., Кисляков И. М., Крисько А. В., Стародубцев А. М., Багров И. В., Белоусова И. М., Пономарев Г. В.** Сравнительное изучение фотофизических свойств низкотоксичных фотосенсибилизаторов на основе эндогенных порфиринов // *Оптический журнал*. 2018. Т. 85. № 11. С. 65–80.

12. **Rotomskis R., Bagdonas S., Streckyte G., Wendenburg R., Dietel W., Didziapetriene J., Ibelhauptaite A., Staciokiene L.** Phototransformation of sensitizers: 3. Implications for clinical dosimetry // *Lasers in Medical Science*. 1998. Vol. 13. No. 4. Pp. 271–278.

13. **Fróes Sebbe-Santos Pr., Miquilini P., Pinto J. G., Campos de Menezes Pr. F., Ferreira J.** Adverse effects of topical photodynamic therapy in rosacea // *Photodiagnosis and Photodynamic Therapy*. 2024. Vol. 45. February. P. 103871.

14. **Privalov V. A., Lappa A. V., Seliverstov O. V., Faizrakhmanov A. B., Yarovoy N. N., Kochneva E. V., Evnevich M. V.** Clinical trials of a new chlorin photosensitizer for photodynamic therapy of malignant tumors // Th. J. Dougherty (Ed.) *Optical methods for tumor treatment and detection: Mechanisms and techniques in photodynamic therapy XI. Proceedings of SPIE*. 2002. Vol. 4612. Pp. 178–190.

15. **Ильина А. Д., Глазов А. Л., Семенова И. В., Васютинский О. С.** Влияние параметров возбуждающего излучения на фотосенсибилизированную генерацию синглетного кислорода в воде // *Оптика и спектроскопия*. 2016. Т. 120. № 6. С. 935–940.

16. **Chaudhri M., Vohra A., Chakarvarti S. K.** A model for Cu-Se resonant tunneling diodes fabricated by negative template assisted electrodeposition technique // *Communications and Network*. 2010. Vol. 2. No. 1. Pp. 73–78.

17. **Валуева С. В., Вылегжанина М. Э., Митусова К. А., Волков А. Я., Мелешко Т. К., Иванов И. В., Якиманский А. В.** Селенсодержащие наносистемы на основе амфифильных молекулярных щеток с варьируемой степенью полимеризации боковых цепей в водных и органических средах // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2021. № 4. С. 3–11.

18. **Валуева С. В., Вылегжанина М. Э., Боровкова Л. Н., Иванов И. В., Якиманский А. В.** Влияние топологии молекулярной щетки на стабилизацию наночастиц серебра и селена в водных нанодисперсиях: спектральные и структурно-морфологические характеристики // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2023. № 12. С. 113–122.

19. **Bai S., Zhang M., Tang Sh., Li M., Wu R., Wan S., Chen L., Wei X., Feng Sh.** Effects and impact of selenium on human health. A Review // *Molecules*. 2025. Vol. 30. No. 1. P. 50.

20. **Валуева С. В., Боровикова Л. Н.** Самоорганизация, морфология и термодинамические характеристики селенсодержащих наноструктур на основе сильных поликислот // *Бутлеровские сообщения*. 2010. Т. 20. № 5. С. 52–61.

21. **Khalid A., Tran P. A., Norello R., Simpson D. A., O'Connor A. J., Tomljenovic-Hanic S.** Intrinsic fluorescence of selenium nanoparticles for cellular imaging applications // *Nanoscale*. 2016. Vol. 8. No. 6. Pp. 3376–3385.

22. **Akhmetzhan A., Myrzakhmetova N., Amangeldi N., Kuanyshova Zh., Akimbayeva N., Dosmaganbetova S., Toktarbay Zh., Longinos S. N.** A short review on the N,N-dimethylacrylamide-based hydrogels // *Gels*. 2021. Vol. 7. No. 4. P. 234.

23. **Piacenza E., Presentato A., Heyne B., Turner R. J.** Tunable photoluminescence properties of selenium nanoparticles: biogenic versus chemogenic synthesis // *Nanophotonics*. 2020. Vol. 9. No. 11. Pp. 3615–3628.

24. **Kavand A., Anton N., Vandamme Th., Serra Ch., Chan-Seng D.** Synthesis and functionalization of hyperbranched polymers for targeted drug delivery // *Journal of Controlled Release*. 2020. Vol. 321. 10 May. Pp. 285–311.
25. **Gray V. P., Amelung C. D., Duti I. J., Laudermilch E. G., Letteri R. A., Lampe K. J.** Biomaterials via peptide assembly: design, characterization, and application in tissue engineering // *Acta Biomaterialia*. 2022. Vol. 140. 1 March. Pp. 43–75.
26. **Валуева С. В., Боровикова Е. И., Краснопева Е. Л., Меленевская Е. Ю., Якиманский А. В.** Спектральные характеристики селенсодержащих гибридных нанокомплексов на основе фотодитазина и целлюлозного полимерного носителя // *Журнал прикладной спектроскопии*. 2024. Т. 91. № 4. С. 519–525.
27. **Валуева С. В., Вылегжанина М. Э., Митусова К. А., Безрукова М. А., Назарова О. В., Золотова Ю. И., Панарин Е. Ф.** Структурно-морфологические и спектральные характеристики гибридных биоактивных медь-, селен- и серебросодержащих наносистем на основе поли-4-акрилоилморфолина // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2021. № 2. С. 15–26.
28. **Валуева С. В., Суханова Т. Е., Вылегжанина М. Э., Мелешко Т. К.** Бинарные наносистемы на основе амфифильных молекулярных щеток, загруженных фотосенсибилизатором Радахлорином или наночастицами селена // *Журнал технической физики*. 2020. Т. 90. № 9. С. 1462–1470.
29. **Shojaeian Sh., Asnaashari M., Heidari A., Sadeghi M., Mechrabinia P.** Effect of photodynamic therapy with two different photosensitizers on the viability of human dental pulp stem cells // *Journal of Lasers in Medical Sciences*. 2024. Vol. 15. 1 January. P. e70.
30. **Phasupan P., Le T. D., Nguyen L. Th.** Assessing the photodynamic efficacy of different photosensitizer-light treatments against foodborne bacteria based on the number of absorbed photons. // *Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology*. 2021. Vol. 221. August. P. 112249.
31. **Valueva S. V., Krasnopeeva E. L., Borovikova L. N., Morozova P. Yu., Sokolova M. P., Melenevskaya E. Yu., Yakimansky A. V.** Triple nanosystems based on amphiphilic molecular brushes, selenium nanoparticles and photosensitizer: Synthesis, spectral and morphological characteristics // *Nanobiotechnology Reports*. 2024. Vol. 19. No. 1. Pp. 108–115.
32. **Lesnichayaa M. V., Shendrik R., Sukhov B. G.** Relation between excitation dependent luminescence and particle size distributions for the selenium nanoparticles in κ -carrageenan shell // *Journal of Luminescence*. 2019. Vol. 211. July. Pp. 305–313.
33. **Brus L.** Electronic wave functions in semiconductor clusters: Experiment and theory // *The Journal of Physical Chemistry*. 1986. Vol. 90. No. 12. Pp. 2555–2560.
34. **Васильев Р. Б., Дирин Д. Н., Гаськов А. М.** Коллоидные полупроводниковые нанокристаллы с пространственным разделением носителей заряда: рост и оптические свойства // *Успехи химии*. 2011. Т. 80. № 12. С. 1190–1210.

REFERENCES

1. **Brown S. B., Brown E. A., Walker I.,** The present and future role of photodynamic therapy in cancer treatment, *Lancet Oncol.* 5 (8) (2004) 497–508.
2. **Correia J. H., Rodrigues J. A., Pimenta S., et al.,** Photodynamic therapy review: Principles, photosensitizers, applications, and future directions, *Pharmaceutics*. 13 (9) (2021) 1332.
3. **Jiang W., Liang M., Lei Q., et al.,** The current status of photodynamic therapy in cancer treatment, *Cancers (Basel)*. 15 (3) (2023) 585.
4. **Aebisher D., Serafin I., Batóg-Szczęch K., et al.,** Photodynamic therapy in the treatment of cancer – The selection of synthetic photosensitizers, *Pharmaceutics*. 17 (7) (2024) 932–957.
5. **Aebisher D., Czech S., Dynarowicz K., et al.,** Photodynamic therapy: Past, current, and future, *Int. J. Mol. Sci.* 25 (20) (2024) 11325.
6. **Bienia A., Wiecheć-Cudak O., Murzyn A. A., Krzykawska-Serda M.,** Photodynamic therapy and hyperthermia in combination treatment – Neglected forces in the fight against cancer, *Pharmaceutics*. 13 (8) (2021) 1147.
7. **Baskaran R., Lee J., Yang S.-G.,** Clinical development of photodynamic agents and therapeutic applications, *Biomater. Res.* 22 (26 Sept) (2018) 25.

8. **Gonçalves de Faria C. M., Inada N. M., Kurachi C., Bagnato V. S.**, Determination of the threshold dose distribution in photodynamic action from in vitro experiments, *J. Photochem. Photobiol.* 162 (Sept) (2016) 168–175.
9. **Menezes P. F. C., Melo C. A. S., Bagnato V. S., et al.**, Influence of pH on the phototransformation process of photogem, *Laser Methods in Chem. Biol. Med.* 19 (7) (2009) 435–442.
10. **Dadoko A. V., Lilge L., Kaspler P., et al.**, Photophysical properties and in vitro photocytotoxicity of disodium salt 2.4-di (alpha-methoxyethyl)-deuteroporphyrin-IX (Dimegine), *Photodiagnosis. Photodyn. Ther.* 25 (March) (2019) 35–42.
11. **Murav'eva T. D., Dadoko A. V., Kiselev V. M., et al.**, Comparative study of the photophysical properties of low-toxicity photosensitizers based on endogenous porphyrins, *J. Opt. Technol.* 85 (11) (2018) 709–721.
12. **Rotomskis R., Bagdonas S., Streckyte G., et al.**, Phototransformation of sensitizers: 3. Implications for clinical dosimetry, *Lasers Med. Sci.* 13 (4) (1998) 271–278.
13. **Fryes Sebbe-Santos Pr., Miqullini P., Pinto J. G., et al.**, Adverse effects of topical photodynamic therapy in rosacea, *Photodiagnosis. Photodyn. Ther.* 45 (Febr) (2024) 103871.
14. **Privalov V. A., Lappa A. V., Seliverstov O. V., et al.**, Clinical trials of a new chlorin photosensitizer for photodynamic therapy of malignant tumors, In book: Th. J. Dougherty (Ed.) *Optical methods for tumor treatment and detection: Mechanisms and techniques in photodynamic therapy XI. Proceedings of SPIE.* 4612 (2002) 178–190.
15. **Il'ina A. D., Glazov A. L., Semenova I. V., Vasyutinskii O. S.**, The influence of excitation radiation parameters on photosensitized generation of singlet oxygen in water, *Opt. Spectrosc.* 120 (6) (2016) 876–880.
16. **Chaudhri S., Vohra A., Chakarvarti S. K.**, A model for Cu-Se resonant tunneling diodes fabricated by negative template assisted electrodeposition technique, *Comms. Netw.* 2 (1) (2010) 73–78.
17. **Valueva S. V., Vylegzhanina M. E., Mitusova K. A., et al.**, Selenium-containing nanosystems based on amphiphilic molecular brushes with a variable degree of polymerization of the side chains in aqueous and organic media, *J. Surf. Investig. X-ra.* 15 (2) (2021) 313–320.
18. **Valueva S. V., Vylegzhanina M. E., Borovikova L. N., et al.**, Effect of the topology of a molecular brush on the stabilization of silver and selenium nanoparticles in aqueous nanodispersions: Spectral and structural-morphological characteristics, *J. Surf. Investig. X-ra.* 17 (1) (2023) 150–158.
19. **Bai S., Zhang M., Tang Sh., et al.**, Effects and impact of selenium on human health. A review, *Molecules.* 30 (1) (2025) 50.
20. **Valuyeva S. V., Borovikova L. N.**, Self-organization, morphological and thermodynamic characteristics of the selenium-containing nanostructures on the basis of strong polyacids, *Butlerov Commun.* 20 (5) (2010) 52–61 (in Russian).
21. **Khalid A., Tran P. A., Norello R., et al.**, Intrinsic fluorescence of selenium nanoparticles for cellular imaging applications, *Nanoscale.* 8 (6) (2016) 3376–3385.
22. **Akhmetzhan A., Myrzakhmetova N., Amangeldi N., et al.**, A short review on the N,N-dimethylacrylamide-based hydrogels, *Gels.* 7(4) (2021) 234.
23. **Piacenza E., Presentato A., Heyne B., Turner R. J.**, Tunable photoluminescence properties of selenium nanoparticles: biogenic versus chemogenic synthesis, *Nanophotonics.* 9 (11) (2020) 3615–3628.
24. **Kavand A., Anton N., Vandamme Th., et al.**, Synthesis and functionalization of hyperbranched polymers for targeted drug delivery, *J. Control. Release.* 321 (10 May) (2020) 285–311.
25. **Gray V. P., Amelung C. D., Duti I. J., et al.**, Biomaterials via peptide assembly: design, characterization, and application in tissue engineering, *Acta Biomater.* 140 (1 March) (2022) 43–75.
26. **Valueva S. V., Borovikova L. N., Krasnopeeve E. L., et al.**, Spectral characteristics of selenium-containing hybrid nanocomplexes based on fotoditazine and cellulose polymer carrier, *J. Appl. Spectrosc.* 91 (4) (2024) 754–760.
27. **Valueva S. V., Vylegzhanina M. E., Mitusova K. A., et al.**, Structural, morphological, and spectral characteristics of hybrid bioactive copper-, selenium- and silver-containing nanosystems based on poly-4-acryloylmorpholine, *J. Surf. Investig. X-ra.* 15 (1) (2021) 110–120.
28. **Valuyeva S. V., Sukhanova T. E., Vylegzhanina M. E., Meleshko T. K.**, Binary nanosystems based on amphiphilic molecular brushes loaded with Radachlorine photosensitizer or selenium nanoparticles, *Tech. Phys.* 65 (9) (2020) 1403–1410.

29. **Shojaeian Sh., Asnaashari M., Heidari A., et al.**, Effect of photodynamic therapy with two different photosensitizers on the viability of human dental pulp stem cells, *J. Lasers Med. Sci.* 15 (1 Jan) (2024) e70.
30. **Phasupan P., Le T. D., Nguyen L. Th.**, Assessing the photodynamic efficacy of different photosensitizer-light treatments against foodborne bacteria based on the number of absorbed photons, *J. Photochem. Photobiol B.* 221 (Aug) (2021) 112249.
31. **Valueva S. V., Krasnopeeva E. L., Borovikova L. N., et al.**, Triple nanosystems based on amphiphilic molecular brushes, selenium nanoparticles and photosensitizer: Synthesis, spectral and morphological characteristics, *Nanobiotechnol. Rep.* 19 (1) (2024) 108–115.
32. **Lesnichayaa M. V., Shendrik R., Sukhov B. G.**, Relation between excitation dependent luminescence and particle size distributions for the selenium nanoparticles in κ -carrageenan shell, *J. Lumin.* 211 (July) (2019) 305–313.
33. **Brus L.**, Electronic wave functions in semiconductor clusters: Experiment and theory, *J. Phys. Chem.* 12 (90) (1986) 2555–2560.
34. **Vasiliev R. B., Dirin D. N., Gaskov A. M.**, Semiconductor nanoparticles with spatial separation on charge carriers: synthesis and optical properties, *Russ. Chem. Rev.* 80 (12) (2011) 1139–1158.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ВАЛУЕВА Светлана Валерьевна – кандидат физико-математических наук, руководитель лаборатории структуры и морфологии полимерных и композиционных систем Института высокомолекулярных соединений – филиала НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ; старший научный сотрудник Национального медицинского исследовательского центра онкологии имени Н. Н. Петрова, Санкт-Петербург, Россия.

199004, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В. О., 31

svalu67@mail.ru

ORCID: 0000-0001-9446-4233

МОРОЗОВА Полина Юрьевна – научный сотрудник лаборатории структуры и морфологии полимерных и композиционных систем Института высокомолекулярных соединений – филиала НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ; лаборант-исследователь Национального медицинского исследовательского центра онкологии имени Н. Н. Петрова, Санкт-Петербург, Россия.

199004, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В. О., 31

aravenko_polina@yahoo.com

ORCID: 0000-0003-3068-7838

ВЫЛЕГЖАНИНА Милана Эрнестовна – научный сотрудник лаборатории структуры и морфологии полимерных и композиционных систем Института высокомолекулярных соединений – филиала НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ; Санкт-Петербург, Россия.

199004, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В. О., 31

v.e.milana@gmail.com

ORCID: 0000-0002-4334-7595

ЧЕРНОВА Людмила Михайловна – старший лаборант лаборатории структуры и морфологии полимерных и композиционных систем Института высокомолекулярных соединений – филиала НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ; Санкт-Петербург, Россия.

199004, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В. О., 31

zenitik1993@gmail.com

ORCID: 0009-0006-3914-2307

БОРОВИКОВА Людмила Николаевна – научный сотрудник лаборатории структуры и морфологии полимерных и композиционных систем Института высокомолекулярных соединений – филиала НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ; Санкт-Петербург, Россия.

199004, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В. О., 31

svalu67@mail.ru

ORCID: 0000-0002-1034-6713

THE AUTHORS

VALUEVA Svetlana V.

Institute of Macromolecular Compounds – Branch of Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of National Research Centre “Kurchatov Institute”; Senior Researcher, National Medical Research Center of Oncology named after N. N. Petrov

31 Bolshoy Ave. V. O., St. Petersburg, 199004, Russia

svalu67@mail.ru

ORCID: 0000-0001-9446-4233

MOROZOVA Polina Yu.

Institute of Macromolecular Compounds – Branch of Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of National Research Centre “Kurchatov Institute”; laboratory assistant researcher, National Medical Research Center of Oncology named after N. N. Petrov

31 Bolshoy Ave. V. O., St. Petersburg, 199004, Russia

aravenko_polina@yahoo.com

ORCID: 0000-0003-3068-7838

VYLEGZHANINA Milana E.

Institute of Macromolecular Compounds – Branch of Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of National Research Centre “Kurchatov Institute”.

31 Bolshoy Ave. V. O., St. Petersburg, 199004, Russia

v.e.milana@gmail.com

ORCID: 0000-0002-4334-7595

CHERNOVA Lyudmila M.

Institute of Macromolecular Compounds – Branch of Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of National Research Centre “Kurchatov Institute”.

31 Bolshoy Ave. V. O., St. Petersburg, 199004, Russia

zenitik1993@gmail.com

ORCID: 0009-0006-3914-2307

BOROVIKOVA Lyudmila N.

Institute of Macromolecular Compounds – Branch of Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of National Research Centre “Kurchatov Institute”.

31 Bolshoy Ave. V. O., St. Petersburg, 199004, Russia

svalu67@mail.ru

ORCID: 0000-0002-1034-6713

Статья поступила в редакцию 26.05.2025. Одобрена после рецензирования 29.09.2025. Принята 29.09.2025.

Received 26.05.2025. Approved after reviewing 29.09.2025. Accepted 29.09.2025.


Приборы и техника физического эксперимента

Научная статья

УДК 535.14

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19110>

ИЗМЕРЕНИЕ ВРЕМЕННОГО ДЖИТТЕРА НИЗКОШУМЯЩЕГО ДЕТЕКТОРА ОДИНОЧНЫХ ФОТОНОВ

**А. А. Анисимов, А. А. Белов, А. С. Козлов, О. И. Котов, П. А. Кринский
А. В. Медведев, А. В. Петров, С. В. Розов, Н. А. Ушаков** 

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

 n.ushakoff@spbstu.ru

Аннотация. В статье представлена методика измерения временного джиттера детектора одиночных фотонов, не требующая быстродействующей электроники и коротких оптических импульсов. Предложенная методика предполагает экспериментальное измерение временных задержек срабатывания детектора одиночных фотонов на короткие слабые оптические импульсы переменной длительности, подаваемые на его вход. При этом длительность оптических импульсов может превышать величину измеряемого джиттера. Представлены также результаты измерения временного джиттера низкошумящего детектора одиночных фотонов, использующего лавинный фотодиод производства компании RMY Electronics, проведено сравнение с коммерчески доступным детектором ID Quantique IDQube-NIR-GAT-MMF-LN. Проведенные экспериментальные исследования доказали успешность предложенной методики измерения временного джиттера.

Ключевые слова: детектор одиночных фотонов, лавинный фотодиод, квантовое распределение ключа, временной джиттер

Финансирование: Исследования проведены при финансовой поддержке Открытого акционерного общества «Российские железные дороги» в рамках договора № 1301/ОКЭ-ДКСС/22/1/1/.

Для цитирования: Анисимов А. А., Белов А. А., Козлов А. С., Котов О. И., Кринский П. А., Медведев А. В., Петров А. В., Розов С. В., Ушаков Н. А. Измерение временного джиттера низкошумящего детектора одиночных фотонов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 121–132. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19110>

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.19110>

MEASUREMENT OF THE TIMING JITTER OF A LOW-NOISE SINGLE PHOTON DETECTOR

**A. A. Anisimov, A. A. Belov, A. S. Kozlov, O. I. Kotov, P. A. Krinskiy,
A. V. Medvedev, A. V. Petrov, S. V. Rozov, N. A. Ushakov** 

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

 n.ushakoff@spbstu.ru

Abstract. The article puts forward a technique for measuring the time jitter of a single photon detector (SPD). The proposed method does not require high-speed electronics and

short optical pulses. The procedure involves experimental measurement of the time delays of the SPD response to short weak optical pulses of variable duration applied to its input. In this case, the optical pulse duration may exceed the measured jitter value. The results of measuring the time jitter of a low-noise SPD using an avalanche photodiode (manufactured by RMY Electronics) have been presented and compared with a commercially available ID Quantique IDQube-NIR-GAT-MMF-LN detector. Our experimental studies have proved the success of the proposed time jitter measurement technique.

Keywords: single photon detector, avalanche photodiode, quantum key distribution, timing jitter

Funding: The reported study was funded by Joint Stock Company “Russian Railways” within the framework of Contract No. 1301/OKE-DKSS/22/1/1/.

For citation: Anisimov A. A., Belov A. A., Kozlov A. S., Kotov O. I., Krinskiy P. A., Medvedev A. V., Petrov A. V., Rozov S. V., Ushakov N. A., Measurement of the timing jitter of a low-noise single photon detector, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (1) (2026) 121–132. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19110>

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

Введение

Многие современные технологии базируются на измерении крайне слабых световых полей. Сюда можно отнести системы квантового распределения ключа, лидары, волоконно-оптические датчики, основанные на рассеянии излучения, оптические квантовые компьютеры и ряд других прорывных поисковых направлений. Активное внедрение этих технологий требует создания эффективных детекторов одиночных фотонов (*англ.* Single Photon Detector (SPD)) с низким уровнем шумов. В начале развития квантовых технологий [1, 2] в качестве детекторов SPDs использовались фотоэлектронные умножители, однако из-за стремления обеспечить работу на длинах волн ближнего ИК-диапазона, имеющих меньшее затухание в оптических волокнах, и ввиду малой эффективности фотоэлектронных умножителей в данном спектральном диапазоне, неизбежно последовал переход на полупроводниковые лавинные фотодетекторы (*англ.* Avalanche PhotoDetector (APD)) [3], имеющие высокую надежность и технологичность изготовления, а также обеспечивающие конкурентные характеристики.

Наиболее важными характеристиками SPDs выступают квантовая эффективность, частота темновых отсчетов и вероятность послелавинных срабатываний. Хотя наилучшие показатели на настоящий момент достигаются для SPDs на основе сверхпроводников [4], практическое применение таких детекторов в разработанных системах сопряжено со значительными трудностями из-за необходимости использования сложного криогенного оборудования. Поэтому на настоящий момент большое внимание уделяется улучшению характеристик SPDs на основе APDs.

Помимо шумовых параметров, важной характеристикой SPD является временная разрешающая способность, характеризуемая временным джиттером сигнала отклика на протектированный оптический импульс. Возможность измерения времени прихода одиночного фотона с разрешением порядка 100 – 200 пс востребована в системах квантового распределения ключа с кодированием кубитов при помощи спутанных временных отрезков (*англ.* time-bin entanglement), а также в лидарах и квантовых оптических датчиках. В первую очередь на временную разрешающую способность влияют собственные характеристики фотодиода, такие как время нарастания лавины, определяемое профилем легирования и геометрическими размерами, а также собственная емкость, зависящая также от конфигурации диода. Кроме того, как показано в статьях [5, 6], при повышении напряжения смещения на фотодиоде, временной джиттер снижается ввиду ускорения нарастания лавины в большем электрическом поле. Наряду с этим при понижении температуры диода увеличивается время жизни свободных носителей заряда, что увеличивает джиттер и снижает временную разрешающую способность.

Измерение характеристик SPD – это важная и нетривиальная задача, типовые методы требуют использования сложного лабораторного измерительного оборудования [7, 8].

В данной работе предложен метод измерения временного джиттера детектора одиночных фотонов (SPD) со сниженными требованиями к быстродействию измерительного оборудования.

Проведенный теоретический анализ показал, что оценку джиттера можно выполнять при длительности оптических импульсов, превышающих величину джиттера в 2-3 раза. Предложенный подход экспериментально проверен на изготовленном низкошумящем SPD, а также на коммерчески доступном детекторе ID Quantique IDQube-NIR-GAT-MMF-LN.

Описание реализованного детектора одиночных фотонов

Реализованный детектор одиночных фотонов (рис. 1) состоит из следующих компонентов: герметичного корпуса, системы охлаждения, источника питания, формирователя импульсов и платы питания и управления. Все элементы размещены на металлической пластине.

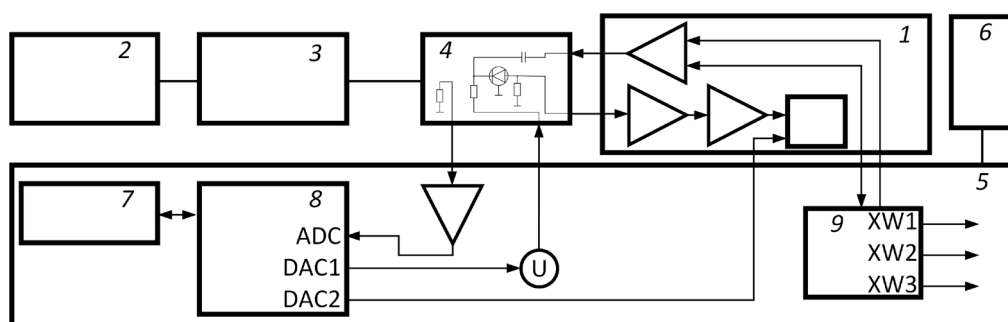


Рис. 1. Функциональная схема макета низкошумящего детектора одиночных фотонов: 1, 4, 5 – макеты платы формирователя импульсов, плат интерфейса, питания и управления, соответственно; 2, 6 – источники питания (24 и 12 В, соответственно); 3 – микрокриогенная система MKC500; 7 – интерфейс USB; 8 – микроконтроллер; 9 – программируемая логическая интегральная схема

Схема работает следующим образом: на лавинный фотодетектор (APD) подается напряжение, превышающее напряжение пробоя. После поглощения фотона возникает лавинный пробой, который вызывает падение напряжения на нагрузочном резисторе. Этот сигнал поступает на двухкаскадный усилитель и далее на быстродействующий компаратор. К выходу компаратора подключена ключевая схема, обеспечивающая подавление пробоя за счет снижения напряжения смещения на APD. Цепь обратной связи в схеме компаратора обеспечивает длительность импульса подавления около 50 нс. Далее с программируемой логической интегральной схемой (EPLD) поступает импульс, удерживающий напряжение на APD ниже напряжения пробоя в течение времени релаксации. Линии связи с APD выполнены в виде микрополосковых линий с волновым сопротивлением 50 Ом.

Установка рабочей точки APD обеспечивается цифроаналоговым преобразователем (англ. Digit-to-Analog Converter (DAC)) микроконтроллера, который выставляет напряжение смещения. Это значение устанавливается для заданной температуры (так как абсолютное значение напряжения пробоя уменьшается с понижением температуры) и заданной квантовой эффективности. Температура APD определяется измерительным преобразователем с датчиком стандарта Pt1000 и оцифровывается аналогово-цифровым преобразователем (далее – ADC) микроконтроллера. Также на входы ADC подаются питающие напряжения и сигнал, пропорциональный среднему току APD для контроля исправности.

Для корректного измерения характеристик SPD был проведен комплексный анализ процесса формирования отсчетов. В частности, при измерении джиттера SPD, целесообразно минимизировать все срабатывания, кроме целевых. При наличии полезного светового сигнала на входе детектора, срабатывания происходят за счет следующих механизмов:

целевые срабатывания на фотоны, поглощаемые APD (вероятность срабатывания на каждый поглощенный фотон равна квантовой эффективности детектора);

темновые срабатывания, происходящие за счет внутренних тепловых флуктуаций в APD;

послелавинные срабатывания (вызываемые как целевыми, так и темновыми срабатываниями).

Для упрощения методик измерения характеристик SPDs можно принять во внимание следующий ряд соотношений. Как было отмечено выше, при продлении мертвого времени, более эффективно происходит рассасывание свободных носителей заряда; в результате послелавинные срабатывания вносят меньший вклад в общее количество отсчетов. В связи с этим, при оценке джиттера и частоты темновых отсчетов целесообразно выбирать режим работы с настолько продолжительным мертвым временем, что послелавинные срабатывания будут вносить пренебрежимо малый вклад в общее количество отсчетов.

Измерение временного джиттера детектора одиночных фотонов

Традиционно измерение временного джиттера фотоприемных устройств производится путем подачи на их вход коротких оптических импульсов и многократного измерения задержки между моментами генерации импульса и моментами обнаружения отклика детектора. Однако при высоком временном разрешении тестируемого приемника реализация такого прямого метода может оказаться затруднительной ввиду необходимости использования коротких лазерных импульсов с высокой экстинкцией и высокой скважностью. Например, при значении измеряемого джиттера 100 пс длительность самого импульса должна быть не более 10 пс. Для однозначного корректного прямого контроля формы таких импульсов требуются фотоприемники и осциллографы с полосой частот, приближающейся к 100 ГГц, что накладывает серьезные ограничения на возможность тестирования быстродействующих SPDs простыми прямыми методами.

Будем считать, что импульс, поглощаемый детектором, содержит один фотон, вероятность обнаружения которого в заданный момент времени τ прямо пропорциональна огибающей импульса $p(\tau)$.

Тогда соответствующее квантовое состояние можно записать в форме

$$|p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p(\tau) d\tau |1\rangle. \quad (1)$$

В свою очередь, момент времени срабатывания детектора t_D можно записать следующим образом:

$$t_D = \tau + t_{ji} + t_H + t_{MEAS}, \quad (2)$$

где t_H – случайная задержка, вносимая прочим измерительным оборудованием (генератор электрических импульсов, устройство измерения временных задержек); t_{ji} – случайная задержка срабатывания SPD; t_{MEAS} – ошибка оценки времени регистрации сигнала срабатывания детектора.

Если принять, что все случайные факторы, влияющие на разброс значений t_H , t_{ji} и τ , независимы, то дисперсию времен срабатывания детектора (σ_D)² можно выразить как сумму дисперсий величин t_{ji} , t_H и τ . Таким образом, если определять временной джиттер SPD как среднее квадратическое отклонение величины t_{ji} , то джиттер можно найти экспериментально, через многократные измерения задержки срабатывания детектора относительно времени генерации однофотонного импульса, путем нахождения среднее квадратического отклонения и пересчета по следующей формуле:

$$\sigma_{ji} \approx \sqrt{\sigma_D^2 - \sigma_H^2 - \sigma_P^2 - \sigma_{MEAS}^2}, \quad (3)$$

где σ_H , σ_{MEAS} – среднее квадратические отклонения временной задержки, вносимой измерительным оборудованием, и оценки времени регистрации сигнала срабатывания детектора t_{MEAS} , соответственно; σ_P – среднее квадратическая длительность однофотонного импульса, определяемая формулой

$$\sigma_H^2 = \frac{1}{E} \int_{-\infty}^{\infty} (t-t_0)^2 p(t) dt, \quad (4)$$

$$t_0 = \frac{1}{E} \int_{-\infty}^{\infty} t \cdot p(t) dt, \quad (5)$$

где

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} p(t) dt. \quad (6)$$

Эти теоретические выводы можно подтвердить результатами численного моделирования. В нашем исследовании такое моделирование было проведено следующим образом: время нахождения фотона внутри импульса, а также времена задержек, вносимых самим детектором одиночных фотонов и остальным оборудованием, моделировались как случайные величины. Для времени нахождения фотона внутри импульса использовалось сглаженное равномерное распределение.

Последнее было получено в виде суммы двух независимых случайных величин:

величина с равномерным распределением шириной 200 пс,

величина с нормальным распределением при нулевом среднем среднеквадратическом отклонении, равном 20 пс.

Для временных же задержек, вносимых SPD и остальным измерительным оборудованием, использовались нормальные распределения.

Всего было сгенерировано 10 тыс. реализаций случайных величин. Гистограммы времен нахождения фотона внутри импульса, временных задержек в оборудовании, задержек срабатывания детектора одиночных фотонов и результирующих времен срабатывания SPD приведены на рис. 2.

В описанном выше численном эксперименте среднеквадратические отклонения случайных величин t_{jit} , t_H и τ составляли 50, 5 и 61 пс, соответственно. Было найдено среднеквадратическое отклонение суммы этих величин, что составило 78,8 пс. Соответственно, если найти среднеквадратическое отклонение времен срабатывания SPD, а также знать форму оптического импульса и джиттер используемых приборов σ_H , то можно найти временной джиттер SPD по формуле (3).

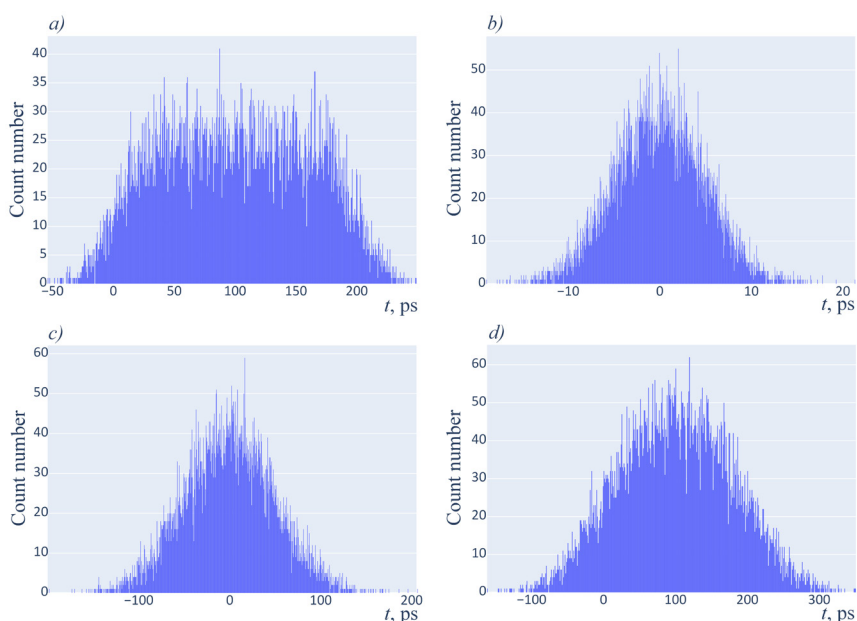


Рис. 2. Гистограммы времен нахождения фотона внутри импульса (a), временных задержек в оборудовании (b), задержек срабатывания SPD (c) и результирующих времен срабатывания SPD (d)

Для приведенного выше примера оцененное значение $\sigma_{jit} = 49,9$ пс хорошо соответствует значению, заложенному в численную модель.

Таким образом, нами предложен способ нахождения временного джиттера SPD, не требующий быстродействующего измерительного оборудования. Для применения разработанного способа необходимо предварительно оценить джиттер временных задержек, вносимых вспомогательным измерительным оборудованием. Также, очевидно, необходимо располагать информацией о форме световых импульсов, используемых для получения однофотонных состояний. Здесь необходимо отметить, что среднеквадратические отклонения временных задержек, входящие в формулу (3), принципиально отличаются от времен нарастания импульсных характеристик соответствующих приборов и зависят как от шумов регистрируемых сигналов, так и от принципов работы устройств.

При проведении измерений важно выбирать такие значения параметров измерительного оборудования, которые бы обеспечивали возможность достижения требуемой точности измерений (обеспечивали бы приемлемое значение величины σ_{MEAS}). С этой целью целесообразно воспользоваться фундаментальными соотношениями, описывающими достижимую разрешающую способность нахождения времени прихода некоторого сигнала. Оценку таких ограничений можно сделать на основе соотношения Рао – Крамера. В работе [9] были получены соотношения Рао – Крамера для нижней границы дисперсии оценки времени прихода склона импульса, описываемого функцией atan (арктангенс). Эта функция с хорошей точностью соответствует нарастающим склонам импульсов лавины, наблюдаемым в детекторах одиночных фотонов, и может быть успешно использована в данной работе. Согласно статье [9], нижняя граница среднеквадратического отклонения оценки времени прихода импульса записывается в виде

$$\sigma_{MEAS} = \sqrt{\frac{3 \cosh^3(t_L) t_{dur}}{\sinh(t_L) [2 \cosh^2(t_L) + 1]} f_s \cdot \text{SNR}}, \quad (7)$$

где t_{dur} – длительность линейного участка нарастающего склона импульса, время прихода которого измеряется; t_L – длительность отрезка склона, по которой оценивается время прихода, нормированное на t_{dur} ; f_s – частота дискретизации сигнала; SNR – отношение сигнал/шум, определенное как отношение квадрата половины амплитуды импульса, время прихода которого измеряется, к дисперсии аддитивного шума.

Как видно на рис. 3, амплитуда регистрируемого импульса составила 50 мВ, среднеквадратическое отклонение аддитивного шума, измеренное в отсутствие

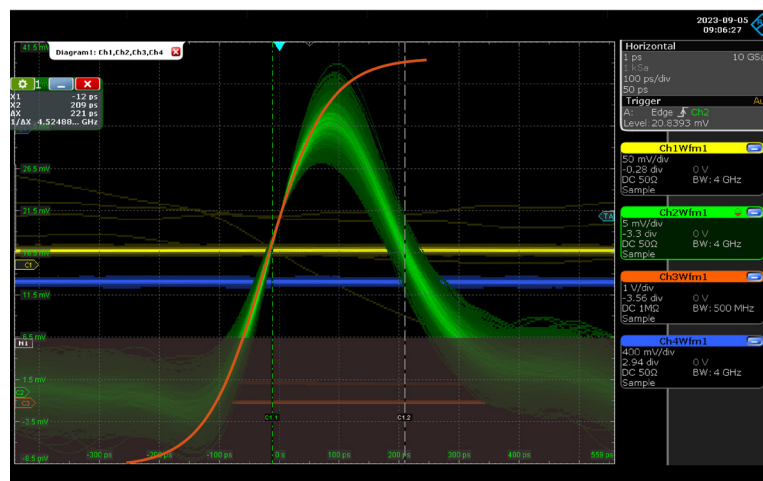


Рис. 3. Пример экспериментально измеренных форм лазерного импульса длительностью 220 пс: Горизонтальная ось – это шкала времени (масштаб 100 пс/дел.), вертикальная – шкала напряжения (5 мВ/дел.). Представлены сигналы фотоприемника, регистрировавшего лазерные импульсы (зеленые кривые) и аппроксимация функцией atan (арктангенс) нарастающего склона сигналов фотоприемника (красная кривая). Вертикальные пунктирные линии ограничивают длительность импульса по уровню, равному полувысоте максимума

полезного сигнала, составило около 0,8 мВ, что соответствует отношению сигнал/шум, равному 1000. Для сигнала срабатывания SPD перепад напряжения на склоне составляет 1,6 В, а среднеквадратическое отклонение аддитивного шума в отсутствие срабатываний – 40 мВ, что соответствует отношению сигнал/шум (SNR), равному 1600. Для реалистичного значения параметра $t_{dur} = 1$ нс (такое значение времени нарастания можно ожидать при рабочей полосе применяемого осциллографа 1 ГГц), значения величин следующие: $t_f = 1,145$ (оптимальное значение), $f_s = 10$ ГГц, $SNR = 10^3$, неопределенность $\sigma_{MEAS} = 8,3$ пс, что существенно ниже ожидаемого джиттера SPD.

Критерием применимости предложенной методики является малость величин σ_{MEAS} и σ_H , по сравнению с длительностью импульсов τ и измеряемой величиной σ_{jit} :

$$(\sigma_{MEAS})^2 + (\sigma_H)^2 \ll \tau^2 \sim (\sigma_{jit})^2. \quad (8)$$

Экспериментальное исследование джиттера низкошумящего детектора одиночных фотонов

Предложенная методика оценки временного джиттера SPD была экспериментально протестирована на примере коммерческого детектора одиночных фотонов ID Quantique IDQube-NIR-GAT-MMF-LN и разработанного в нашей лаборатории низкошумящего SPD (см. раздел «Описание реализованного детектора одиночных фотонов»). Температура лавинного фотодиода (APD) составляла -90°C , мертвое время – 100 мкс, квантовая эффективность – 25%. Для создания лазерных импульсов длительностью от 200 до 600 пс применяли лазер «Нолатех DFB-1550-AX» с длиной волны $\lambda = 1550$ нм, работающий в режиме переключаемого усиления [10]. Пиковая мощность излучения составляла около 450 мкВт, (см. схему на рис. 4).

Чтобы получить излучение субоднотонной интенсивности, эмиссия лазера ослаблялась с использованием комплекта переменных аттенуаторов с суммарным ослаблением около 67 дБ. Часть лазерного излучения подавалась на быстродействующий фотоприемник Thorlabs SIR5 с частотой среза 2 ГГц. Выходные электрические сигналы фотоприемника использовались в качестве начала отсчета при измерении времени срабатывания SPD. Для определения временной задержки импульсов от фотоприемника и от SPD применялся осциллограф Rohde & Schwarz RTO2044 с полосой частот 4 ГГц и частотой дискретизации 10 ГГц.

Чтобы обосновать наше допущение о пренебрежимо малом количестве нецелевых отсчетов, вначале были сняты зависимости частоты отсчетов SPD в отсутствие подачи на вход оптического сигнала от значения мертвого времени при квантовой эффективности 10%. Если принять вероятность послелавинных срабатываний близкой к нулю при высоких значениях мертвого времени, то частоту темновых срабатываний можно считать равной уровню асимптоты для зависимости частоты срабатываний от мертвого времени.

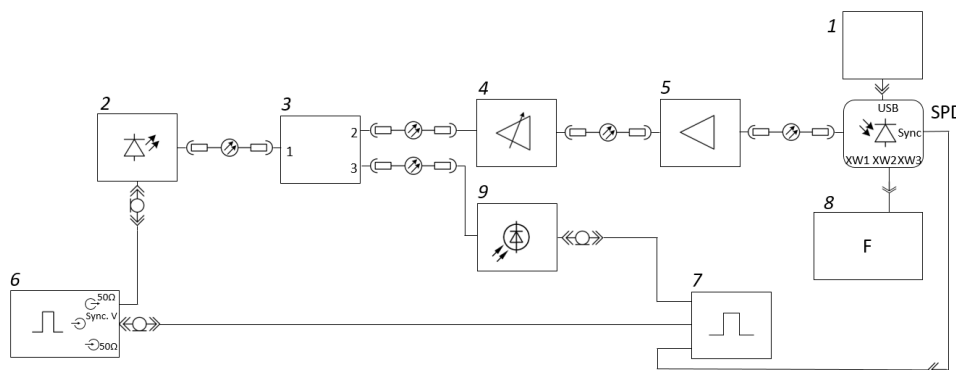


Рис. 4. Схема для измерения временного разрешения SPD:

- 1 – персональный компьютер; 2 – лазер DFB-1550-AX; 3 – волоконный X-разветвитель (50:50); 4, 5 – переменные аттенуаторы 0 – 40 дБ и 0 – 70 дБ, соответственно;
- 6 – генератор импульсов Г5-78; 7 – осциллограф Rohde & Schwarz RTO2044;
- 8 – частотомер ЧЗ-54; 9 – фотодетектор Thorlabs SIR5

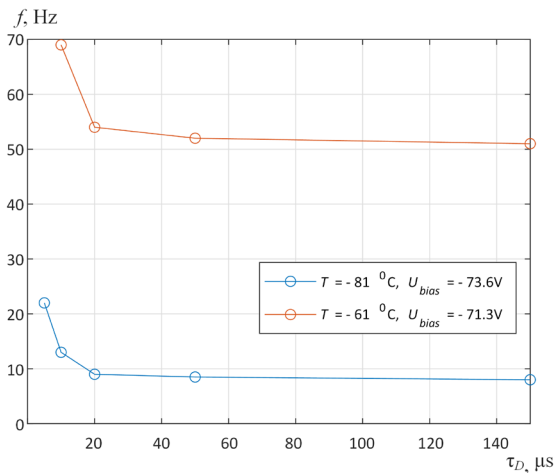


Рис. 5. Экспериментальные зависимости частоты темновых отсчетов от мертвого времени для двух режимов работы схемы

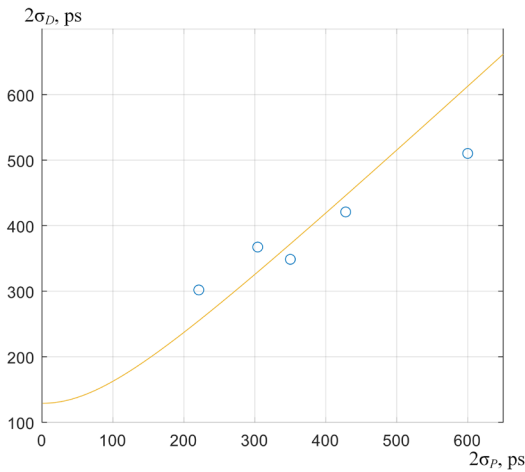


Рис. 6. Экспериментальная зависимость ширины гистограммы значений времени срабатывания SPD от длительности лазерного импульса (кружки) и ее аппроксимация выражением (3) (линия) методом наименьших квадратов

не 0,5 от максимального с удвоенной среднеквадратической длительностью импульса, рассчитанной по формуле (5); это совпадение обусловлено отличием формы лазерного импульса от гауссовой. В итоге величину джиттера σ_{jit} определяли аппроксимацией экспериментальной зависимости $2\sigma_D(2\sigma_P)$, показанной на рис. 6, методом наименьших квадратов. В результате аппроксимации было получено значение джиттера SPD $2\sigma_{jit} = 128$ пс.

Примеры выходных сигналов низкошумящего SPD и гистограммы их временных задержек относительно лазерных импульсов длительностью 220 пс приведены на рис. 7. Необходимо отметить, что оценка ширины гистограммы на рис. 7 сделана на уровне 0,500, тогда как для определения джиттера используется ширина на уровне 0,605. Эта разница приводит к различию значений, показанных на рис. 6 и 7.

Аналогичные измерения были проведены для коммерчески доступного детектора ID Quantique IDQube-NIR-GAT-MMF-LN. Для него измеренное значение джиттера при квантовой эффективности 25% составило 140 пс (паспортное значение – менее 150 пс). Полученный результат доказывает успешность предложенной методики.

Результаты экспериментальных измерений представлены на рис. 5. Из этой зависимости частота темновых отсчетов оценивается на уровне от 10 до 50 Гц, что есть крайне низкая величина, для которой можно использовать предположения, относящиеся к режиму работы с продолжительным мертвым временем (см. раздел «Описание реализованного детектора одиночных фотонов»).

Для измерения джиттера SPD, на осциллографе был включен режим синхронизации по каналу 2 и построение горизонтальной гистограммы по каналу 3. Накопление значений для построения гистограммы создавалось в течение 60 с. Ширина гистограммы измерялась на уровне около 0,605 относительно ее максимального уровня, среднеквадратическое отклонение моментов времени σ_D (срабатывания SPD) определялось как полуширина гистограммы. Следует отметить, что ширина гистограммы нормального распределения на уровне 0,500 относительно максимального уровня (удобнее ее измерять экспериментально) соотносится с шириной на уровне 0,605 как

$$w_{0,500} = 1,167w_{0,605} = 2,334 \sigma_D.$$

Далее величина временного джиттера оценивалась по формуле (3). В качестве оценки джиттера использовалось удвоенное значение среднеквадратического отклонения $2\sigma_{jit}$ (σ_{jit} – задержка срабатываний, вызванных детектором). Для более точного определения временного джиттера, значения ширины гистограммы σ_D находили при разных значениях длительности лазерного импульса σ_P : 220, 300, 350, 600 и 1200 пс. Для всех измеренных значений длительности была проведена проверка совпадения ширины на уровне

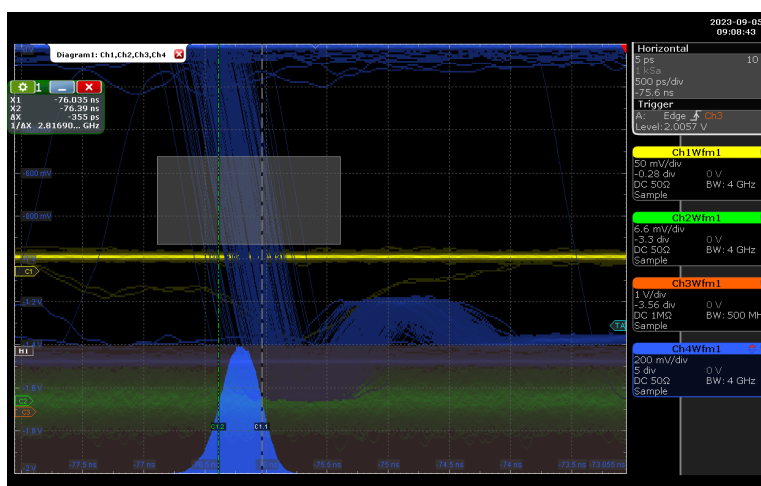


Рис. 7. Пример выходных сигналов SPD (верхняя часть) и гистограммы задержки времени срабатывания низкошумящего SPD относительно управляющего импульса длительностью 220 пс (нижняя часть). Горизонтальная ось – это шкала времени (масштаб 500 пс/дел.), вертикальная – шкала напряжения (200 мВ/дел.) Вертикальные пунктирные линии ограничивают ширину гистограммы по уровню, равному полувисоте максимума

Заключение

В работе предложен и обоснован метод измерения временного джиттера детекторов одиночных фотонов (SPD), не использующий быстродействующие электрооптические компоненты и измерительное оборудование. Экспериментально продемонстрировано измерение временного джиттера на уровне 100 пс с использованием зондирующих импульсов длительностью более 200 пс и осциллографа с полосой частот 4 ГГц. Теоретически показаны фундаментальные пределы разрешающей способности таких измерений.

Для реализованного низкошумящего детектора одиночных фотонов экспериментально измерено значение временного джиттера: оно составило 128 пс при охлаждении APD до температуры $-90\text{ }^{\circ}\text{C}$, что соответствует лучшим известным мировым аналогам.

Следует отметить, что предложенная методика измерения временного джиттера может применяться для детекторов одиночных фотонов других типов, включая фотоумножители и сверхпроводниковые детекторы.

Основными условиями, которые налагаются на детекторы, – это значения параметра длительности зондирующих импульсов, которые должны быть сравнимы с измеряемой величиной джиттера, а также использование измерительного оборудования, удовлетворяющего условию (8), а именно – малость величин σ_{MEAS} и σ_H , по сравнению с длительностью импульсов τ и измеряемой величиной σ_{jitter} .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bennett C. H., Bessette F., Brassard G., Salvail L., Smolin J. Experimental quantum cryptography // Journal of Cryptology. 1992. Vol. 5. No. 1. Pp. 3–28.
2. Hong C. K., Ou Z. Y., Mandel L. Measurement of subpicosecond time intervals between two photons by interference // Physical Review Letters. 1987. Vol. 59. No.18. Pp. 2044–2046.
3. Marand C., Townsend P. D. Quantum key distribution over distances as long as 30 km // Optics Letters. 1995. Vol. 20. No. 16. Pp. 1695–1697.
4. Smirnov K., Divochiy A., Vakhtomin Y., Morozov P., Zolotov P., Antipov A., Seleznev V. NbN single-photon detectors with saturated dependence of quantum efficiency // Superconductor Science and Technology. 2018. Vol. 31. No. 3. P. 035011.
5. Amri E., Boso G., Korzh B., Zbinden H. Temporal jitter in free-running InGaAs/InP single-photon avalanche detectors // Optics Letters. 2018. Vol. 41. No. 24. Pp. 5728–5731.

6. Acerbi F., Anti M., Tosi A., Zappa F. Design criteria for InGaAs/InP single-photon avalanche diode // IEEE Photonics Journal. 2013. Vol. 5. No. 2. P. 6800209.
7. Мосенцов С. Н., Лосев А. В., Заводиленко В. В., Филяев А. А., Павлов И. Д., Буров Н. В. Сравнение отечественных детекторов одиночных фотонов от QRate с аналогами от ID Quantique // Фотоника. 2023. Vol. 17. No. 2. Pp. 134–145.
8. Hadfield R. H. Single-photon detectors for optical quantum information applications // Nature Photonics. 2009. Vol. 3. No. 12. Pp. 696–705.
9. Ushakov N. A., Markvart A. A., Liokumovich L. B. Pulse wave velocity measurement with multiplexed fiber optic Fabry–Perot interferometric sensors // IEEE Sensors Journal. 2020. Vol. 20. No. 19. Pp. 11302–11312.
10. Wang Y., Chen G., Wang X. Characteristics of 1.55- μm gain-switched DFB laser diode // Proceedings of SPIE. 1998. Vol. 3547. Semiconductor Lasers III. 19 August. Event: Photonics China '98, Beijing, China. Pp. 4–7.

REFERENCES

1. Bennett C. H., Bessette F., Brassard G., et al., Experimental quantum cryptography, J. Cryptol. 5 (1) (1992) 3–28.
2. Hong C. K., Ou Z. Y., Mandel L., Measurement of subpicosecond time intervals between two photons by interference, Phys. Rev. Lett. 59 (18) (1987) 2044–2046.
3. Marand C., Townsend P. D., Quantum key distribution over distances as long as 30 km, Opt. Lett. 20 (16) (1995) 1695–1697.
4. Smirnov K., Divochiy A., Vakhtomin Y., et al., NbN single-photon detectors with saturated dependence of quantum efficiency, Supercond. Sci. Technol. 31 (3) (2018) 035011.
5. Amri E., Boso G., Korzh B., Zbinden H., Temporal jitter in free-running InGaAs/InP single-photon avalanche detectors, Opt. Lett. 41 (24) (2018) 5728–5731.
6. Acerbi F., Anti M., Tosi A., Zappa F., Design criteria for InGaAs/InP single-photon avalanche diode, IEE Photonics J. 5 (2) (2013) 6800209.
7. Mosentsov S. N., Losev A. V., Zavodilenko V. V., et al., Comparison of domestic single photon detectors by QRate with the analogues by ID Quantique, Photonics Russia. 17 (2) (2023) 134–145 (in Russian).
8. Hadfield R. H., Single-photon detectors for optical quantum information applications, Nat. Photonics. 3 (12) (2009) 696–705.
9. Ushakov N. A., Markvart A. A., Liokumovich L. B., Pulse wave velocity measurement with multiplexed fiber optic Fabry–Perot interferometric sensors, IEEE Sens. J. 20 (19) (2020) 11302–11312.
10. Wang Y., Chen G., Wang X., Characteristics of 1.55- μm gain-switched DFB laser diode, Proc. SPIE. Vol. 3547. Semiconductor Lasers III, 19 Aug.; Photonics China '98, Beijing, China (1998) 4–7.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АНИСИМОВ Андрей Александрович – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
anisimov.spbstu@yandex.ru

БЕЛОВ Андрей Александрович – ведущий инженер Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
belov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-0617-4514

КОЗЛОВ Артемий Сергеевич – инженер Международного научно-образовательного центра “National Instruments – Политехник“, ассистент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kozlov_as@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-1722-1964

КОТОВ Олег Иванович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kotov@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-8448-2024

КРИНСКИЙ Павел Александрович – инженер I категории Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
krinsky@mail.ru
ORCID: 0009-0003-4426-9503

МЕДВЕДЕВ Андрей Викторович – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
medvedev@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-7083-9184

ПЕТРОВ Александр Викторович – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
petrov.avl@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-5216-6588

РОЗОВ Сергей Владимирович – кандидат технических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
svroz@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-7305-4857

УШАКОВ Николай Александрович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
n.ushakoff@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-3480-2779

THE AUTHORS

ANISIMOV Andrey A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
anisimov.spbstu@yandex.ru

BELOV Andrey A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
belov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-0617-4514

KOZLOV Artemy S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kozlov_as@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-1722-1964

KOTOV Oleg I.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kotov@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-8448-2024

KRINSKIY Pavel A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
krinsky@mail.ru
ORCID: 0009-0003-4426-9503

MEDVEDEV Andrey V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
medvedev@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-7083-9184

PETROV Aleksandr V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
petrov.av1@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-5216-6588

ROZOV Sergey V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
svroz@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-7305-4857

USHAKOV Nikolai A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
n.ushakoff@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-3480-2779

*Статья поступила в редакцию 12.10.2024. Одобрена после рецензирования 22.10.2025.
Принята 22.10.2025.
Received 12.10.2024. Approved after reviewing 22.10.2025. Accepted 22.10.2025.*

Physical materials technology

Original article

UDC 537.6:548.73:538.91

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19111>

ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF HAUSMANNITE

O. K. Kuvandikov, Z. M. Shodiev, J. Sh. Akhtamov 

Samarkand State University named after Sharof Rashidof,

Samarkand, Republic of Uzbekistan

 texnologiya11@gmail.com

Abstract. In this work, the magnetic and electronic properties of the mineral hausmannite (Mn_3O_4) have been studied using both experimental and theoretical methods. Magnetic susceptibility χ was measured in the paramagnetic region over the temperature range of 288–1000 K using the Faraday method. The anomalies recorded at 657 K and 898 K in the $\chi^{-1}(T)$ plots were attributed to the Jahn–Teller effect, and this phenomenon was also found in the differential scanning calorimetry (DSC) analysis. Using the first-principles calculations based on the DFT+U method within the Quantum ESPRESSO package, the magnetic moment values of -4.1113 and 3.4801 Bohr magnetons (μ_B) for Mn^{2+} and Mn^{3+} ions, respectively, were obtained. The result of a net magnetization of $6.00 \mu_B$ per cell was established which indicated the ferrimagnetic nature of the object. Band structure analysis confirmed the semiconductor nature of hausmannite (a theoretical band gap $E_g \approx 0,82$ eV).

Keywords: hausmannite, magnetic susceptibility, DSC, Curie – Weiss law, Jahn – Teller effect

For citation: Kuvandikov O. K., Shodiev Z. M., Akhtamov J. Sh., Electronic and magnetic properties of hausmannite, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (1) (2026) 133–143. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19111>

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 537.6:548.73:538.91


DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19111>

ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ГАУСМАННИТА

O. K. Кувандиков, З. М. Шодиев, Ж. Ш. Ахтамов 

Самаркандский государственный университет имени Шарофа Рашидова,

г. Самарканд, Республика Узбекистан

 texnologiya11@gmail.com

Аннотация. Проведено комплексное исследование магнитных и электронных свойств минерала гаусманнита Mn_3O_4 с применением как экспериментальных, так и теоретических методов. Магнитная восприимчивость χ измерялась в парамагнитной области в диапазоне температур 288 – 1000 К методом Фарадея. Аномалии, зарегистрированные на температурной зависимости $\chi^{-1}(T)$ при 657 и 898 К, интерпретированы как проявление эффекта Яна – Теллера; данное явление также обнаружено в ходе анализа методом дифференциальной сканирующей калориметрии (DSC). Расчеты из первых принципов в рамках теории функционала плотности и модели Хаббарда (DFT + U), выполненные с использованием пакета Quantum ESPRESSO, показали, что магнитные моменты ионов Mn^{2+} и Mn^{3+} составляют $-4,1113$ и $3,4801$ магнетонов Бора μ_B , соответственно, что приводит к суммарной намагниченности $6,00 \mu_B$ на элементарную ячейку, что свидетельствует о ферримагнитной природе соединения. Анализ зонной структуры гаусманнита подтвердил его полупроводниковый характер (теоретическая ширина запрещенной зоны $E_g \approx 0,82$ эВ).

Ключевые слова: гаусманнит, магнитная восприимчивость, DSC, закон Кюри – Вейсса, эффект Яна – Теллера

Для цитирования: Кувандиков О. К., Шодиев З. М., Ахтамов Ж. Ш. Электронные и магнитные свойства гаусманнита // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 133–143. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19111>

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

Introduction

In recent years, manganese and its oxide compounds have garnered significant scientific interest due to their potential applications in ion exchange, molecular adsorption, photocatalysis, and water purification processes [1 – 4]. Manganese oxides exist in multiple structural forms that affects their electrical conductivity, magnetic behavior, and other physical parameters. They exhibit various oxidation states, namely, +2, +3, and +4, resulting from the loss of electrons from the $3d^5$ and $4s^2$ orbitals of manganese atoms. Among the naturally occurring manganese oxides, hausmannite (Mn_3O_4) is one of the most stable phases [5, 6]. It belongs to the spinel group and crystallizes in the tetragonal structure with the $I4_1/amd$ space group. Although it is often written as Mn_3O_4 , its spinel-type structure (AB_2O_4) is better represented by the formula $Mn^{2+}[Mn^{3+}]_2O_4$, in which the Mn^{3+} ions occupy octahedral sites, and Mn^{2+} ions occupy tetrahedral sites [7 – 9].

Hausmannite possesses a band gap and exhibits semiconducting behavior [10 – 12]. Being a mixed-valence mineral, hausmannite plays an active role in various environmentally significant processes in mining regions [13 – 15].

The present study aims to investigate the electronic and magnetic properties of hausmannite to address existing gaps in the modern understanding of this mineral.

The research consists of two parts: experimental measurements and computational simulation.

The experimental part includes measurements of the temperature-dependent magnetic susceptibility $\chi(T)$ using the Faraday method, which is known for its high precision and suitability for small sample quantities. In addition, the Differential Scanning Calorimetry (DSC) analysis was carried out.

The theoretical part employs the framework of density functional theory (DFT) to analyze the material's electronic and magnetic characteristics. DFT-based modeling not only broadens the scope of the study but also enhances the reliability of the experimental findings. Software packages such as Quantum ESPRESSO [16, 17] were used to implement DFT approaches and accurately model the electronic structure of hausmannite. These calculations enable the determination of the density of states (DOS) and band structure, which are critical for understanding the mineral's conductivity and other electronic properties.

Research technique

Experimental details. The temperature dependence of the magnetic susceptibility, $\chi(T)$, of the hausmannite mineral was measured using the Faraday method. The measurements were carried out in an inert helium atmosphere [18]. The experimental values of the magnetic susceptibility at various temperatures were determined using the following expression:

$$\chi = \chi_r \frac{m_r (U_{h+s} - U_h)}{m_s (U_{h+r} - U_h)} \quad (1)$$

In this context, U_{h+s} represents the compensating voltage measured for the combined sample and holder, while U_{h+r} corresponds to the compensating voltage for the standard reference and holder. U_h denotes the voltage drop of the empty holder (made of alumina, Al_2O_3). The symbols m_r and m_s refer to the masses of the reference and the sample, respectively, and χ_r indicates the magnetic susceptibility of the reference material.

The Mohr's salt was selected as the reference compound in the experiment. The relative measurement uncertainty of the magnetic susceptibility in the setup did not exceed 3% [19].

Computational details. For strongly correlated electron systems, particularly those involving transition metals such as Mn, Fe, Co, and Ni, the use of the extended Density Functional Theory with Hubbard U (DFT+U) approach is considered appropriate. This method accounts for the Coulomb repulsion between localized electrons, thereby more accurately representing the band gap typically observed in semiconductors or dielectric materials.

The crystal lattice parameters required for the DFT + U calculations of hausmannite were obtained from the Materials Project database [20]. The DFT+U computations were performed in the ferrimagnetic (FiM) phase using the Quantum ESPRESSO software package. The Hubbard U parameters employed were as follows:

$$U(\text{Mn}) = 4 \text{ eV}, U(\text{O}) = 0 \text{ eV}.$$

A Monkhorst – Pack k -point mesh of $6 \times 6 \times 6$ was adopted. The plane-wave energy cutoff for the wavefunctions was set to $ecutwfc = 56.6484$ Ry, while the energy cutoff for charge density and potentials was set to $ecutrho = 701.654$ Ry. All calculations utilized Kresse – Joubert PAW-type pseudopotentials.

Results and discussion

The magnetic susceptibility of hausmannite (Mn_3O_4) in the paramagnetic region was experimentally measured using the Faraday method over a temperature range of 288 – 1000 K. Hausmannite is known to exhibit ferrimagnetic behavior, with a transition from the ferrimagnetic state to paramagnetic one occurring at approximately 43.1 K. Specifically, R. A. Robie and B. S. Hemingway [21] investigated the low-temperature heat capacity of Mn_3O_4 over the range of 5 – 380 K using an adiabatically shielded calorimeter and identified the magnetic phase transition at 43.12 K. A closely matching value was later reported by K. Chhor et al. [22], who measured the heat capacity of Mn_3O_4 from 10 to 310 K using an automated adiabatic calorimeter and determined the magnetic transition temperature to be 43.15 K.

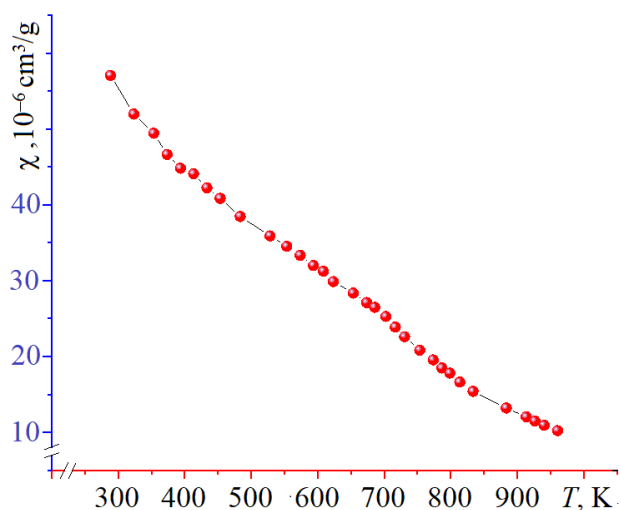


Fig. 1. A plot of the magnetic susceptibility versus temperature in the paramagnetic region for hausmannite Mn_3O_4

The temperature-dependent magnetic susceptibility $\chi(T)$ of hausmannite in the paramagnetic region is shown in Fig. 1. As can be seen in the plot, the magnetic susceptibility decreases monotonically with increasing temperature. This behavior is attributed to the disruption of the thermally ordered magnetic moments of Mn atoms under the influence of an external magnetic field, due to increasing thermal agitation.

Fig. 2, *a* shows the inverse magnetic susceptibility, i. e. $\chi^{-1}(T)$ curve for hausmannite, where distinct anomalies are observed at 657 K and 898 K. In order to scientifically interpret these anomalies and verify their thermal origin, we conducted a Differential Scanning Calorimetry (DSC) analysis of the sample (see Fig. 2, *b*). In the high-temperature region, a polymorphic phase transition from α - Mn_3O_4 to β - Mn_3O_4 was detected at 1449 K, where the structure transforms from a tetragonal spinel (α -phase)

to a cubic one (β -phase). A similar transition was reported by K. T. Jacob et al. [23], who observed this transformation at approximately 1445 K.

The anomalies at 657 K and 898 K in the $\chi^{-1}(T)$ curve closely correspond to the endothermic peaks observed in the DSC plot at 662.3 K and 890.7 K, respectively, with only minor deviations. These transitions are attributed to Jahn – Teller distortions, which, as far as are known, affect the electronic structure and local symmetry of transition metal oxides such as Mn_3O_4 .

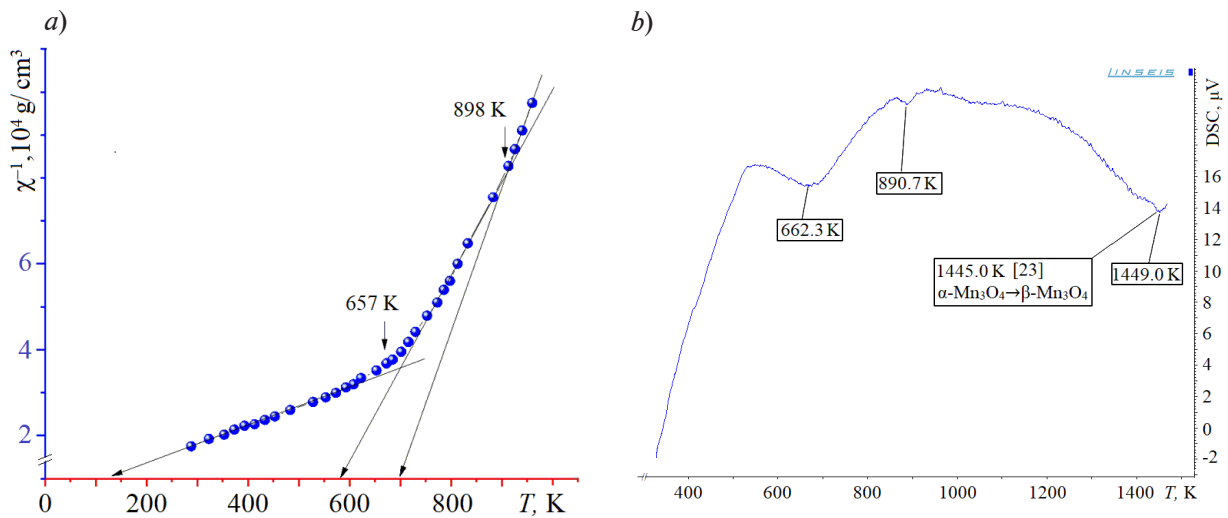


Fig. 2. The results of measuring the inverse magnetic susceptibility versus temperature of the sample (a) and its Differential Scanning Calorimetry (DSC) analysis (b)

In the Mn_3O_4 structure, Mn^{3+} ions occupy octahedral sites, and due to their d^4 electronic configuration $3t_{2g}^1e_g^3$, they are highly susceptible to Jahn – Teller distortions. This phenomenon was discussed in detail by D. Jarosch [8], as illustrated in Fig. 3. According to his analysis, the $\text{Mn}^{3+} - \text{O}^{2-}$ bond lengths in the octahedral coordination are divided into two distinct groups: four shorter bonds of approximately 1.930 Å and two longer bonds of ~ 2.282 Å. The deviation from perfect octahedral symmetry and the clear difference in bond lengths are strong indicators of Jahn – Teller distortion.

This effect alters the exchange interaction energy in the sample, which, in turn, affects its magnetic properties [24 – 26]. As temperature increases, the disparity between the $\text{Mn}^{3+} - \text{O}^{2-}$ bond lengths also changes, leading to anomalies (kinks) in the $\chi^{-1}(T)$ magnetic susceptibility curve.

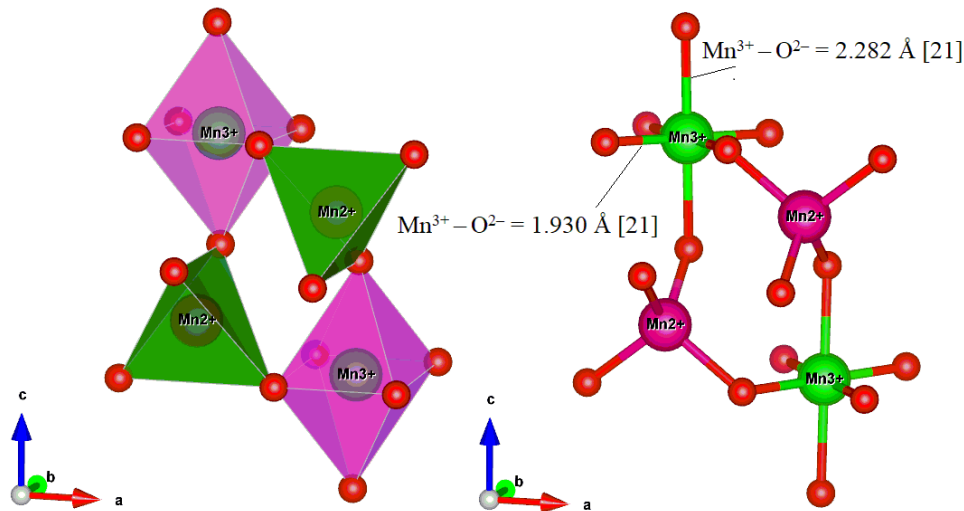


Fig. 3. Models of the crystal structure of hausmannite including oxygen octahedra and tetrahedrons; the Mn^{3+} ion is located in octahedral coordination, and this form experiences a strong Jahn – Teller distortion: the $\text{Mn}^{3+} - \text{O}^{2-}$ bond lengths differ (see also the description in the text)

According to Fig. 2, a, the $\chi^{-1}(T)$ dependence consists of three linear regions, indicating that the variation of magnetic susceptibility in this range follows the Curie – Weiss law. In the first temperature interval of 653 – 288 K, the positive value of the Curie temperature θ_p (127 K) indicates ferrimagnetic ordering in hausmannite. In this region, the effective magnetic moment was determined to be $\mu_{\text{eff}} = 3 \mu_B$, and the magnetic moment per formula unit was found to be $\mu_{\text{for}} = 5.2 \mu_B$. The values for the next intervals are presented in Table 1.



Table 1

Experimental results for the hausmannite (Mn_3O_4) sample calculated using the Curie – Weiss law from the $\chi^{-1}(T)$ plots (see Fig. 2, a)

Temperature interval, K	θ_p	$C, 10^{-4} \text{ cm}^3 \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{K}$	μ_{eff}	μ_{for}
			μ_B	
288 – 653	127	206.0	3.0	5.20
753 – 913	577	45.85	1.4	2.46
913 – 960	698	31.86	1.2	2.00

Notations: θ_p is the paramagnetic Curie temperature, C is the Curie – Weiss constant, μ_{eff} is the effective magnetic moment, μ_{for} is the magnetic moment per formula unit (μ_B is the Bohr magneton).

The results of the DFT+U calculation. The electronic density of states (DOS) of Mn_3O_4 (hausmannite) obtained by using the DFT+U calculations is shown in Fig. 4. The DOS for Mn^{2+} and Mn^{3+} ions exhibits spin polarization around the Fermi level. The total densities of states for spin-up and spin-down configurations are asymmetric and differ significantly, indicating the presence of ferrimagnetic ordering. The Mn^{2+} and Mn^{3+} ions are aligned in opposite spin orientations, resulting in a net uncompensated magnetic moment. At the Fermi level ($E = 0$), the DOS is zero, confirming the semiconductor nature of hausmannite.

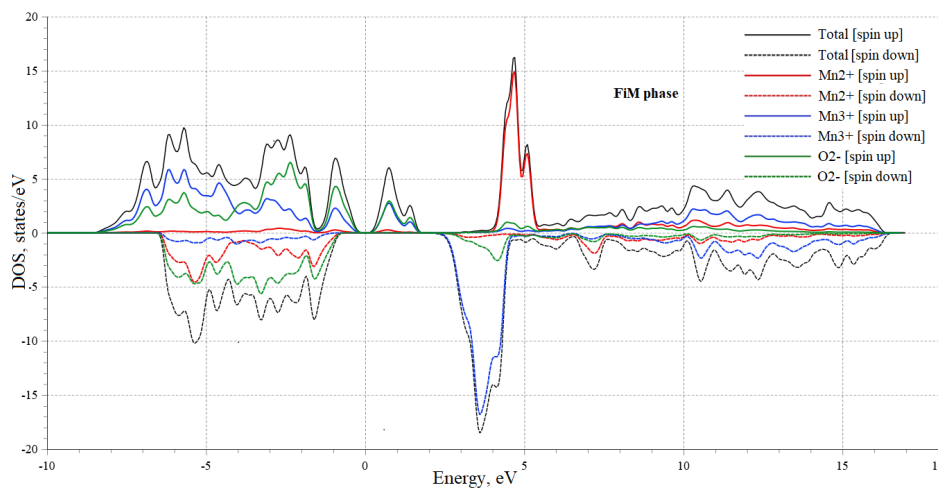


Fig. 4. Total and partial densities of states (DOS) of the hausmannite (Mn_3O_4) for spin-up and spin-down ion configurations

Table 2 presents the magnetic parameters of hausmannite. The magnetic moment of Mn^{2+} ion is $-4.1113 \mu_B$, with the negative sign indicating antiferromagnetic alignment. The Mn^{3+} ion exhibits a magnetic moment of $+3.4801 \mu_B$, and both values are in good agreement with the results reported by P. R. G. Gonçalves et al. [15].

Table 2

Results of DFT+U calculations for Mn_3O_4

Ion	Magnetic moment, μ_B	Magnetization, μ_B/cell	
		Total	Absolute
Mn^{2+}	-4.1113 (-4.3 [15])	6.00	26.84
Mn^{3+}	$+3.4801$ ($+3.5$ [15])		
O^{2-}	-0.0718		

The oxygen ion (O^{2-}) exhibits a magnetic moment of approximately $-0.0718 \mu_B$, which is attributed to spin polarization arising from hybridization and superexchange interactions with neighboring Mn atoms. Due to the incomplete compensation of the antiparallel spins of Mn^{2+} and Mn^{3+} ions, a net magnetic moment of $6.00 \mu_B$ per cell is produced. This value further confirms the ferrimagnetic nature of hausmannite.

Fig. 5 presents the band structure of Mn_3O_4 , where the blue (spin-up) and red (spin-down) bands are not symmetric. This asymmetry indicates that the magnetic moments in the material are not fully compensated and the net magnetization is non-zero. In the crystal structure of Mn_3O_4 , both Mn^{2+} and Mn^{3+} ions are present, with their electron spin states oriented in opposite directions, resulting in ferrimagnetic behavior.

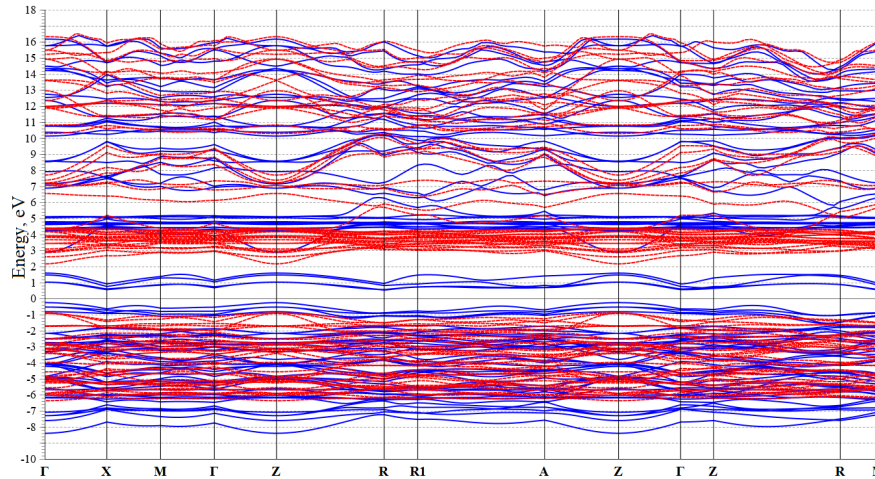


Fig 5. Band structure of Mn_3O_4

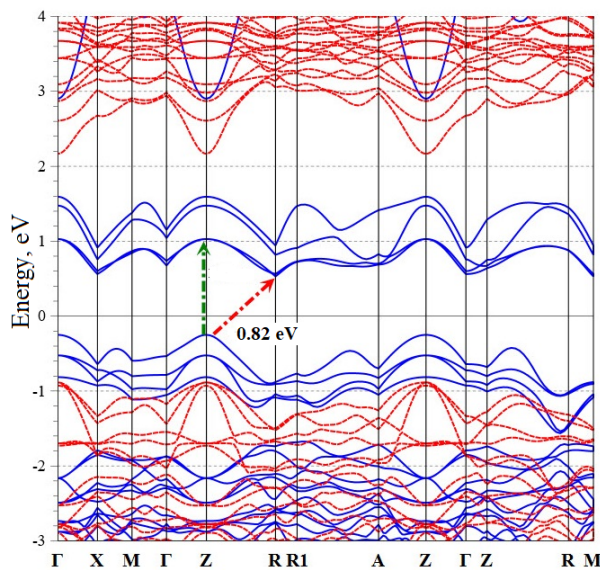


Fig. 6. Electronic band structure of Mn_3O_4 showing the energy states near the Fermi level

According to the band structure calculations of Mn_3O_4 , an energy band gap of 0.82 eV (0.8 eV, as given in Ref. [15]) between the valence and conduction bands is observed, as shown in Fig. 6. Experimental studies report higher band gap values for Mn_3O_4 : 2.07 eV for nanoparticles and 2.51 eV for thin films of this oxide [11, 12]. It is well known that the Generalized Gradient Approximation (GGA) functional used in our study tends to underestimate the band gap. When hybrid exchange-correlation functionals such as B3LYP, PBE0, and HSE are employed, the calculated band gap values for hausmannite are in much better agreement with experimental results [27 – 30]. However, since the primary focus of our study is on the magnetic properties, we limited our approach to GGA-level calculations.

ELF analysis. The Electron Localization Function (ELF) map serves as a powerful visual tool for analyzing the spatial distribution of

electrons. It plays a crucial role in identifying regions of high electron localization, interatomic electron density distributions, and the nature of chemical bonding within the crystal structure [31].

Fig. 7, *a* shows the primitive crystal lattice of Mn_3O_4 where the electrons are strongly localized around the manganese ions. In contrast, the oxygen ions exhibit delocalized electron distribution, with the electron cloud extending toward the Mn–O bond centers. However, there is no evident hybridization between the oxygen orbitals and those of Mn, suggesting that ionic bonding is predominant in hausmannite.

Fig. 7, *b* illustrates the distribution of electron density relative to atomic centers in terms of ELF isosurfaces. No significant electron density relief is observed between Mn atoms, whereas various ELF reliefs are found between Mn and O atoms at different heights, indicating localized electron density in these bonding regions.

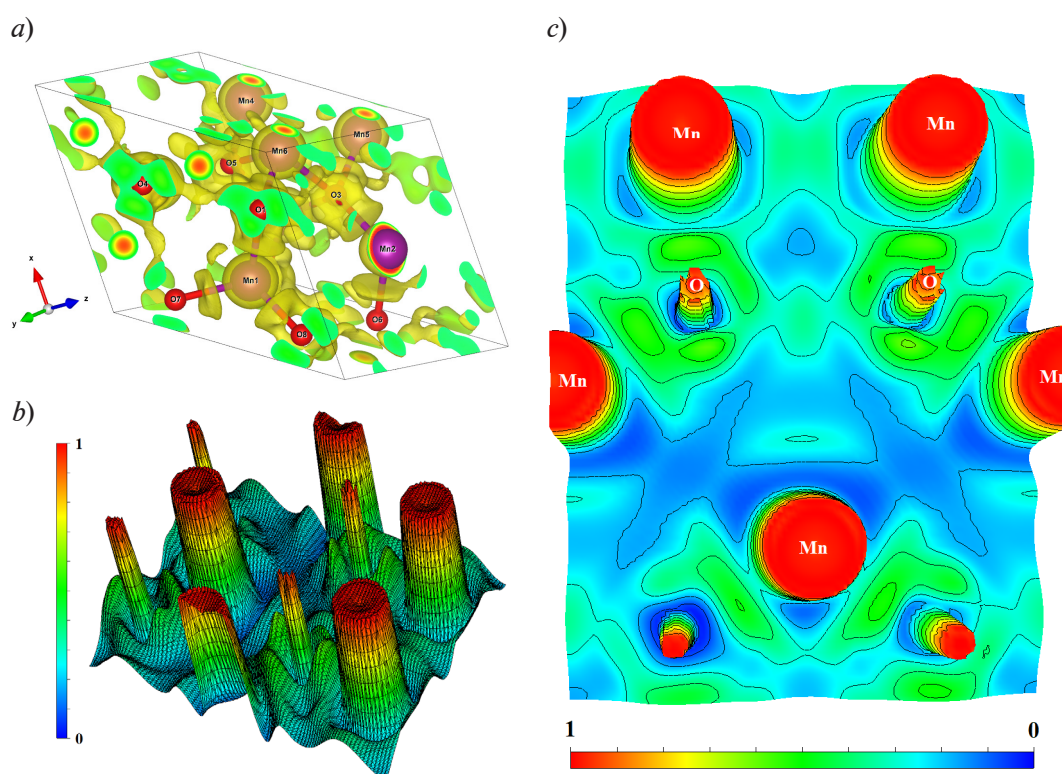


Fig. 7. ELF map of the Mn_3O_4 mineral including 3D views (*a*, *b*), and the 2D projection (*c*)

As shown in Fig. 7, *c*, the space Mn–Mn between atoms appears in blue, indicating the region of lowest electron density. This further confirms that bonding occurs predominantly through the oxygen atoms rather than direct Mn–Mn interaction.

Summary

In this study, the magnetic and electronic properties of the hausmannite (Mn_3O_4) mineral were investigated. In the paramagnetic phase, magnetic susceptibility $\chi(T)$, measured using the Faraday method, was found to decrease monotonically with increasing temperature. The $\chi^{-1}(T)$ plot exhibited anomalies at 657 K and 898 K, which were attributed to Jahn – Teller distortions. These distortions were further confirmed by endothermic effects observed using Differential Scanning Calorimetry (DSC) analysis at corresponding temperatures.

First-principles calculations based on the DFT+U approach revealed magnetic moments of $-4.1113 \mu_B$ for Mn^{2+} and $+3.4801 \mu_B$ for Mn^{3+} ions. The density of states (DOS) analysis confirmed a ferrimagnetic spin arrangement. Band structure calculations indicated that Mn_3O_4 exhibits semiconducting behavior with an estimated band gap of $E_g \approx 0.82$ eV. The analysis of Electron Localization Function (ELF) maps demonstrated ionic bonding characteristics in the Mn–O bonds.

REFERENCES

1. **Chen H., He J.**, Facile synthesis of monodisperse manganese oxide nanostructures and their application in water treatment, *J. Phys. Chem. C.* 112 (45) (2008) 17540–17545.
2. **Zhai Y., Zhai J., Zhou M., Dong S.**, Ordered magnetic core–manganese oxide shell nanostructures and their application in water treatment, *J. Mater. Chem.* 19 (38) (2009) 7030–7035.
3. **Chen H., Chu P. K., He J., et al.**, Porous magnetic manganese oxide nanostructures: synthesis and their application in water treatment, *J. Colloid Interface Sci.* 359 (1) (2011) 68–74.
4. **Imboon T., Khumphon J., Yotkuna K., et al.**, Enhancement of photocatalytic by Mn_3O_4 spinel ferrite decorated graphene oxide nanocomposites, *SN Appl. Sci.* 3 (22 May) (2021) 653.

5. Grundy A. N., Hallstedt B., Gauckler L. J., Assessment of the Mn–O system, *J. Phase Equilib.* 24 (1) (2003) 21–39.
6. Safarov R. Z., Baikenov Y. A., Zhandildenova A. K., et al., Phase transitions and structural evolution of manganese ores during high-temperature treatment, *Metals*. 15 (1) (2025) 89.
7. Aminoff G., Über die Kristallstruktur von Hausmannit (MnMn_2O_4) [On the crystal structure of hausmannite (MnMn_2O_4)], *Z. Kristallogr. Cryst. Mater.* 64 (1) (1926) 475–490.
8. Jarosch D., Crystal structure refinement and reflectance measurements of hausmannite, Mn_3O_4 , *Mineral. Petrol.* 37 (1) (1987) 15–23.
9. Baron V., Gutzmer J., Rundlöf H., Tellgren R., The influence of iron substitution on the magnetic properties of Hausmannite, $\text{Mn}^{2+}(\text{Fe},\text{Mn})^{3+}_2\text{O}_4$, *Am. Mineral.* 83 (7–8) (1998) 786–793.
10. Hosny N. M., Dahshan A., Facile synthesis and optical band gap calculation of Mn_3O_4 nanoparticles, *Mater. Chem. Phys.* 37 (2) (2012) 637–643.
11. Dubal D. P., Dhawale D. S., Salunkhe R. R., Fulari V. J., Lokhande C. D. Chemical synthesis and characterization of Mn_3O_4 thin films for supercapacitor application, *J. Alloys Compd.* 497 (1–2) (2010) 166–170.
12. Jha A., Thapa R., Chattopadhyay K. K., Structural transformation from Mn_3O_4 nanorods to nanoparticles and band gap tuning via Zn doping, *Mater. Res. Bull.* 47 (3) (2012) 813–819.
13. Freitas E. T. F., Montoro L. A., Gasparon M., Ciminelli V. S. T., Natural attenuation of arsenic in the environment by immobilization in nanostructured hematite, *Chemosphere*. 138 (Nov) (2015) 340–347.
14. Pulleri J. K., Singh S. K., Yearwar D., et al., Morphology dependent catalytic activity of Mn_3O_4 for complete oxidation of toluene and carbon monoxide, *Catal. Lett.* 151 (1) (2020) 172–183.
15. Gonçalves P. R. G., De Abreu H. A., Duarte H. A., Stability, structural, and electronic properties of hausmannite (Mn_3O_4) surfaces and their interaction with water, *J. Phys. Chem. C*. 122 (36) (2018) 20841–20849.
16. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., et al., QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, *J. Phys.: Condens. Matter*. 21 (39) (2009) 395502.
17. Davletshina A. D., Yakshibaev R. A., Bickulova N. N., The band structure of solid solutions of copper and silver chalcogenides, *St. Petersburg State Polytechnic University Journal. Physics and Mathematics*. (2 (170)) (2013) 33–38 (in Russian).
18. Kuvandikov O. K., Shodiev Z. M., Khasanov Kh. B., et al., Ferrimagnetic properties of the FeCr_2O_4 chromite and TiFe_2O_4 titanomagnetite minerals at high temperatures, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.* 47 (6) (2025) 595–600.
19. Kuvandikov O., Shodiev Z., Usarov U., et al., Paramagnetic properties of the rock minerals pyrrhotite and pentlandite at high temperatures, *AIP Conf. Proc.* 3304 (1) (2025) 020009.
20. Persson K., Lawrence Berkeley National Laboratory and US. Department of Energy. Office of Scientific and Technical Information. Materials data on Mn_3O_4 (SG:141) by Materials Project, Materials Project, 2014. URL: <https://doi.org/10.17188/1183671>.
21. Robie R. A., Hemingway B. S., Low-temperature molar heat capacities and entropies of MnO_2 (pyrolusite), Mn_3O_4 (hausmanite), and Mn_2O_3 (bixbyite), *J. Chem. Thermodyn.* 17 (2) (1985) 165–181.
22. Chhor K., Bocquet J. F., Pommier C., Chardon B., Heat capacity and thermodynamic behaviour of Mn_3O_4 and ZnMn_2O_4 at low temperatures, *J. Chem. Thermodyn.* 18 (1) (1986) 89–99.
23. Jacob K. T., Kumar A., Rajitha G., Waseda Y., Thermodynamic data for Mn_3O_4 , Mn_2O_3 and MnO_2 , *High Temp. Mater. Process.* 30 (4) (2011) 459–472.
24. Duan J., Huang M., Song M., et al., Suppressing Jahn–Teller distortion in manganese oxides for high-performance aqueous zinc-ion batteries, *Materials*. 18 (12) (2025) 2817.
25. Yu X., Qian K., Du L., et al., A strong Jahn – Teller distortion in Mn_3O_4 – MnO heterointerfaces for enhanced silver catalyzed formaldehyde reforming into hydrogen, *Sustain. Energ. Fuels*. 6 (12) (2022) 3068–3077.
26. Kuvandikov O. K., Subxankulov I., Imamnazarov D. H., Khomitov Sh. A., Nature of exchange interaction in amorphous alloys based on metals of iron group with metalloids, *Metallofiz. Noveish. Tekhnol.* 44 (7) (2022) 823–829.
27. Moussa J. E., Schultz P. A., Chelikowsky J. R., Analysis of the Heyd – Scuseria – Ernzerhof density functional parameter space, *J. Chem. Phys.* 136 (20) (2012) 204117.



28. **Ribeiro R. A. P., Lazaro S. R., Pianaro S. A.**, Density functional theory applied to magnetic materials: Mn_3O_4 at different hybrid functionals, *J. Magn. Magn. Mater.* 391 (1 Oct) (2015) 166–171.
29. **Hirai S., Goto Y., Sakai Y., et al.**, The electronic structure of structurally strained Mn_3O_4 postspinel and the relationship with Mn_3O_4 spinel, *J. Phys. Soc. Jpn.* 84 (11) (2015) 114702.
30. **Larbi T., Doll K., Manoubi T.**, Density functional theory study of ferromagnetically and ferrimagnetically ordered spinel oxide Mn_3O_4 . A quantum mechanical simulation of their IR and Raman spectra, *J. Alloys Compd.* 688-A (15 Dec) (2016) 692–698.
31. **Levämäki H., Vitos L.**, Electron localization function implementation in the exact muffin-tin orbitals method, *Phys. Rev. B.* 103 (3) (2021) 035118.
32. **James A. D. N., Harris-Lee E. I., Hampel A., et al.**, Wavefunctions, electronic localization and bonding properties for correlated materials beyond the Kohn – Sham formalism. arXiv preprint, Oct. 2020. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2010.04694>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Chen H., He J.** Facile synthesis of monodisperse manganese oxide nanostructures and their application in water treatment // *The Journal of Physical Chemistry C.* 2008. Vol. 112. No. 45. Pp. 17540–17545.
2. **Zhai Y., Zhai J., Zhou M., Dong S.** Ordered magnetic core–manganese oxide shell nanostructures and their application in water treatment // *Journal of Materials Chemistry.* 2009. Vol. 19. No. 38. Pp. 7030–7035.
3. **Chen H., Chu P. K., He J., Hu T., Yang M.** Porous magnetic manganese oxide nanostructures: synthesis and their application in water treatment // *Journal of Colloid and Interface Science.* 2011. Vol. 359. No. 1. Pp. 68–74.
4. **Imboon T., Khumphon J., Yotkuna K., Tang I-M., Sirikanjana Thongmee S.** Enhancement of photocatalytic by Mn_3O_4 spinel ferrite decorated graphene oxide nanocomposites // *SN Applied Sciences.* 2021. Vol. 3. 22 May. P. 653.
5. **Grundy A. N., Hallstedt B., Gauckler L. J.** Assessment of the Mn–O system // *Journal of Phase Equilibria.* 2003. Vol. 24. No. 1. Pp. 21–39.
6. **Safarov R. Z., Baikenov Y. A., Zhandildenova A. K., et al.** Phase transitions and structural evolution of manganese ores during high-temperature treatment // *Metals.* 2025. Vol. 15. No. 1. P. 89.
7. **Aminoff G.** Über die Kristallstruktur von Hausmannit ($MnMn_2O_4$) [On the crystal structure of hausmannite ($MnMn_2O_4$)] // *Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials.* 1926. Vol. 64. No. 1. Pp. 475–490.
8. **Jarosch D.** Crystal structure refinement and reflectance measurements of hausmannite, Mn_3O_4 // *Mineralogy and Petrology.* 1987. Vol. 37. No. 1. Pp. 15–23.
9. **Baron V., Gutzmer J., Rundlöf H., Tellgren R.** The influence of iron substitution on the magnetic properties of Hausmannite, $Mn^{2+}(Fe,Mn)^{3+}_2O_4$ // *American Mineralogist.* 1998. Vol. 83. No. 7–8. Pp. 786–793.
10. **Hosny N. M., Dahshan A.** Facile synthesis and optical band gap calculation of Mn_3O_4 nanoparticles // *Materials Chemistry and Physics.* 2012. Vol. 137. No. 2. Pp. 637–643.
11. **Dubal D. P., Dhawale D. S., Salunkhe R. R., Fulari V. J., Lokhande C. D.** Chemical synthesis and characterization of Mn_3O_4 thin films for supercapacitor application // *Journal of Alloys and Compounds.* 2010. Vol. 497. No. 1–2. Pp. 166–170.
12. **Jha A., Thapa R., Chattopadhyay K. K.** Structural transformation from Mn_3O_4 nanorods to nanoparticles and band gap tuning via Zn doping // *Materials Research Bulletin.* 2012. Vol. 47. No. 3. Pp. 813–819.
13. **Freitas E. T. F., Montoro L. A., Gasparon M., Ciminelli V. S. T.** Natural attenuation of arsenic in the environment by immobilization in nanostructured hematite // *Chemosphere.* 2015. Vol. 138. November. Pp. 340–347.
14. **Pulleri J. K., Singh S. K., Yearwar D., Saravanan G., Al-Fatesh A. S., Labhasetwar N. K.** Morphology dependent catalytic activity of Mn_3O_4 for complete oxidation of toluene and carbon monoxide // *Catalysis Letters.* 2020. Vol. 151. No. 1. Pp. 172–183.
15. **Gonçalves P. R. G., De Abreu H. A., Duarte H. A.** Stability, structural, and electronic properties of hausmannite (Mn_3O_4) surfaces and their interaction with water // *The Journal of Physical Chemistry C.* 2018. Vol. 122. No. 36. Pp. 20841–20849.

16. **Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., et al.** QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2009. Vol. 21. No. 39. P. 395502.
17. **Давлетшина А. Д., Якшибаев Р. А., Биккулова Н. Н.** Зонная структура твердых растворов халькогенидов меди и серебра // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2013. № 2 (170). С. 33–38.
18. **Kuvandikov O. K., Shodiev Z. M., Khasanov Kh. B., Khairullaev B. A., Akhtamov J. Sh.** Ferrimagnetic properties of the FeCr_2O_4 chromite and TiFe_2O_4 titanomagnetite minerals at high temperatures // *Metallofizika, Noveishie Tekhnologii*. 2025. T. 47. № 6. С. 595–600.
19. **Kuvandikov O., Shodiev Z., Usarov U., Khairullaev B., Akhtamov J.** Paramagnetic properties of the rock minerals pyrrhotite and pentlandite at high temperatures // *AIP Conference Proceedings*. 2025. Vol. 3304. No. 1. P. 020009.
20. **Persson K.** Lawrence Berkeley National Laboratory and US. Department of Energy. Office of Scientific and Technical Information. Materials data on Mn_3O_4 (SG:141) by Materials Project // *Materials Project*. 2014. URL: <https://doi.org/10.17188/1183671>.
21. **Robie R. A., Hemingway B. S.** Low-temperature molar heat capacities and entropies of MnO_2 (pyrolusite), Mn_3O_4 (hausmanite), and Mn_2O_3 (bixbyite) // *The Journal of Chemical Thermodynamics*. 1985. Vol. 17. No. 2. Pp. 165–181.
22. **Chhor K., Bocquet J. F., Pommier C., Chardon B.** Heat capacity and thermodynamic behaviour of Mn_3O_4 and ZnMn_2O_4 at low temperatures // *The Journal of Chemical Thermodynamics*. 1986. Vol. 18. No. 1. Pp. 89–99.
23. **Jacob K. T., Kumar A., Rajitha G., Waseda Y.** Thermodynamic data for Mn_3O_4 , Mn_2O_3 and MnO_2 // *High Temperature Materials and Processes*. 2011. Vol. 30. No. 4. Pp. 459–472.
24. **Duan J., Huang M., Song M., Zhou W., Tan H.** Suppressing Jahn – Teller distortion in manganese oxides for high-performance aqueous zinc-ion batteries // *Materials*. 2025. Vol. 18. No. 12. P. 2817.
25. **Yu X., Qian K., Du L., Zhang J., Lu N., Miao Z., Li Y., Kobayashi H., Yan X., Li R.** A strong Jahn – Teller distortion in Mn_3O_4 – MnO heterointerfaces for enhanced silver catalyzed formaldehyde reforming into hydrogen // *Sustainable Energy & Fuels*. 2022. Vol. 6. No. 12. Pp. 3068–3077.
26. **Kuvandikov O. K., Subxankulov I., Imamnazarov D. H., Khomitov Sh. A.** Nature of exchange interaction in amorphous alloys based on metals of iron group with metalloids // *Metallofizika i Noveishie Tekhnologii*. 2022. Vol. 44. No. 7. Pp. 823–829.
27. **Moussa J. E., Schultz P. A., Chelikowsky J. R.** Analysis of the Heyd – Scuseria – Ernzerhof density functional parameter space // *The Journal of Chemical Physics*. 2012. Vol. 136. No. 20. P. 204117.
28. **Ribeiro R. A. P., Lazaro S. R., Pianaro S. A.** Density functional theory applied to magnetic materials: Mn_3O_4 at different hybrid functionals // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2015. Vol. 391. 1 October. Pp. 166–171.
29. **Hirai S., Goto Y., Sakai Y., Wakatsuki A., Kamihara Y., Matoba M.** The electronic structure of structurally strained Mn_3O_4 postspinel and the relationship with Mn_3O_4 spinel // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2015. Vol. 84. No. 11. P. 114702.
30. **Larbi T., Doll K., Manoubi T.** Density functional theory study of ferromagnetically and ferrimagnetically ordered spinel oxide Mn_3O_4 . A quantum mechanical simulation of their IR and Raman spectra // *Journal of Alloys and Compounds*. 2016. Vol. 688. Part A. 15 December. Pp. 692–698.
31. **Levämäki H., Vitos L.** Electron localization function implementation in the exact muffin-tin orbitals method // *Physical Review B*. 2021. Vol. 103. No. 3. P. 035118.
32. **James A. D. N., Harris-Lee E. I., Hampel A., Aichhorn M., Dugdale S. B.** Wavefunctions, electronic localization and bonding properties for correlated materials beyond the Kohn – Sham formalism. arXiv preprint, Oct. 2020. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2010.04694>

**THE AUTHORS****KUVANDIKOV Oblakul K.***Samarkand State University*

15 University Blvd, Samarkand, 100104, Republic of Uzbekistan

quvandikov@rambler.ru

ORCID: 0000-0001-8750-038X

SHODIEV Zokir M.*Samarkand State University*

15 University Blvd, Samarkand, 100104, Republic of Uzbekistan

shodiyevzm@gmail.com

ORCID: 0009-0000-8607-813X

AKHTAMOV Jushkin Sh.*Samarkand State University*

15 University Blvd, Samarkand, 100104, Republic of Uzbekistan

texnalogiya11@gmail.com

ORCID: 0009-0007-7082-9251

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КУВАНДИКОВ Облакул Кувандикович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики Самаркандского государственного университета имени Шарофа Рашидова, г. Самарканд, Республика Узбекистан.

100104, Республика Узбекистан, г. Самарканд, Университетский бульвар, 15

quvandikov@rambler.ru

ORCID: 0000-0001-8750-038X

ШОДИЕВ Зокир Миртозаевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики Самаркандского государственного университета имени Шарофа Рашидова, г. Самарканд, Республика Узбекистан.

100104, Республика Узбекистан, г. Самарканд, Университетский бульвар, 15

shodiyevzm@gmail.com

ORCID: 0009-0000-8607-813X

АХТАМОВ Жушкин Шодмонович – докторант (PhD студент), кафедры общей физики Самаркандского государственного университета имени Шарофа Рашидова, г. Самарканд, Республика Узбекистан.

100104, Республика Узбекистан, г. Самарканд, Университетский бульвар, 15

texnalogiya11@gmail.com

ORCID: 0009-0007-7082-9251

Received 12.08.2025. Approved after reviewing 17.10.2025. Accepted 17.10.2025.

Статья поступила в редакцию 12.08.2025. Одобрена после рецензирования 17.10.2025. Принята 17.10.2025.

Ядерная физика

Научная статья

УДК 539.12


DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19112>

СРАВНЕНИЕ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ ПОТОКОВ π^0 -МЕЗОНОВ В СТОЛКНОВЕНИЯХ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЯДЕР МЕДИ И ЗОЛОТА ПРИ ЭНЕРГИИ 200 ГэВ И ЯДЕР УРАНА ПРИ 193 ГэВ

Е. В. Банников , **Я. А. Бердников**, **Д. О. Котов**, **Д. М. Ларионова**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

 bannikov.ev.21@gmail.com

Аннотация. В работе представлены результаты измерения эллиптических потоков π^0 -мезонов в зависимости от их поперечного импульса в различных центральных столкновениях релятивистских ядер Cu + Au при энергии 200 ГэВ и U + U при 193 ГэВ, а также проведено сравнение измеренных значений. Результаты сравнения свидетельствуют об образовании большего объема кварк-глюонной плазмы в столкновениях ядер урана. Кроме того, установлено, что эллиптические потоки π^0 -мезонов в рассматриваемых системах столкновений имеют положительные значения при значениях поперечных импульсов вплоть до 10 ГэВ/с. Таким образом, полученные результаты по эллиптическим потокам позволяют в дальнейшем исследовать зависимости потерь энергии партонов от длины их пути в кварк-глюонной плазме, образующейся в изученных столкновениях Cu + Au и U + U.

Ключевые слова: кварк-глюонная плазма, азимутальная анизотропия, эллиптический поток, π^0 -мезоны

Для цитирования: Банников Е. В., Бердников Я. А., Котов Д. О., Ларионова Д. М. Сравнение эллиптических потоков π^0 -мезонов в столкновениях релятивистских ядер меди и золота при энергии 200 ГэВ и ядер урана при 193 ГэВ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 144–157. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19112>

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.19112>

COMPARISON OF ELLIPTIC FLOWS OF π^0 MESONS IN Cu + Au COLLISIONS AT 200 GeV AND U + U COLLISIONS AT 193 GeV

E. V. Bannikov , **Ya. A. Berdnikov**, **D. O. Kotov**, **D. M. Larionova**

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

 bannikov.ev.21@gmail.com

Abstract. This paper presents the findings of investigation of the elliptic flows of π^0 mesons as functions of transverse momentum for different centrality classes of relativistic nuclei Cu + Au collisions at an energy of 200 GeV and U + U collisions at 193 GeV. A comparison of the obtained values is also presented. The results of the comparison have been indicated that a larger volume of quark-gluon plasma formed in the U + U collisions. Moreover, the elliptic flows of π^0 mesons were established to have positive values at transverse momenta up to 10 GeV/c in the collision systems under study. Thus, the results obtained on elliptic flows allow

us to further study the dependences of parton energy losses on their path lengths in the quark-gluon plasma forming in the Cu + Au and U + U collisions.

Keywords: quark-gluon plasma, azimuthal anisotropy, elliptic flow, π^0 mesons

For citation: Bannikov E. V., Berdnikov Ya. A., Kotov D. O., Larionova D. M., Comparison of elliptic flows of π^0 mesons in Cu + Au collisions at 200 GeV and U + U collisions at 193 GeV, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (1) (2026) 144–157. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19112>

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

Введение

Эксперименты с использованием ускорителей (коллайдерные эксперименты) позволяют разгонять два пучка ультрарелятивистских тяжелых ионов до околосветовых скоростей и осуществлять их лобовое столкновение с целью изучения свойств материи при экстремальных температурах (порядка 170 МэВ [1]) и плотностях энергии (около 1 ГэВ/фм³ [1]), которые при этом достигаются. Одним из ключевых направлений таких экспериментов выступает исследование свойств кварк-глюонной плазмы (КГП) – особого состояния материи, при котором кварки и глюоны (партоны) асимптотически свободны [2].

Существование КГП было предсказано физиками-теоретиками на основе расчетов квантовой хромодинамики и концепциях, возникших после открытия кварков в 1960-х годах [3], а впоследствии в коллайдерных экспериментах была подтверждена возможность формирования КГП в столкновениях релятивистских ядер [4].

В силу короткого времени жизни КГП, исследование ее свойств невозможно осуществлять прямыми экспериментами. Вместо этого измеряют различные наблюдаемые кинематические характеристики частиц, рожденных в ультрарелятивистских столкновениях ядер. К таким наблюдаемым относятся: азимутальная анизотропия распределения регистрируемых частиц по поперечному импульсу p_T [5] и подавление выхода адронов с большими поперечными импульсами ($p_T > 5$ ГэВ/с) [6]. Актуальной задачей современной физики высоких энергий является изучение возникновения и проявления данных наблюдаемых КГП.

Цель настоящей работы состоит в определении характеристик кварк-глюонной плазмы, образующейся в столкновениях релятивистских ядер на ускорителях (коллайдерах), с помощью исследования импульсной азимутальной анизотропии регистрируемых частиц, рождающихся в этих столкновениях.

В связи с поставленной целью в данной работе стояла задача измерения и сравнения эллиптических потоков π^0 -мезонов в зависимости от их поперечного импульса в различных центральных конкретных столкновениях релятивистских ионов. Более подробное описание задачи представлено в следующем разделе статьи.

Постановка и описание задачи

Азимутальная анизотропия в распределении регистрируемых частиц является следствием коллективных эффектов при расширении КГП. Величину и поведение данной наблюдаемой можно описать в рамках гидродинамической модели КГП [7]; модель рассматривает сильновзаимодействующую среду с партонами степенями свободы как каплю почти идеальной жидкости.

Область перекрытия сталкивающихся тяжелых ионов, в которой образуется КГП, в поперечном сечении имеет форму эллипса, который характеризует начальную пространственную азимутальную анизотропию. Ориентация указанного эллипса связана с положением плоскости реакции (эта плоскость образована осью пучка и вектором прицельного параметра): малая ось эллипса направлена вдоль плоскости реакции, а большая ось расположена перпендикулярно малой. Согласно положениям, принятым в релятивистской гидродинамике, вследствие начальной пространственной азимутальной анизотропии

расширение КГП под действием градиента давления будет происходить неравномерно: скорость расширения КГП будет максимальна в направлении малой оси эллипса (т.е. в плоскости реакции). Зависимость скорости расширения КГП от направления относительно плоскости реакции приводит к возникновению азимутальной анизотропии импульсов регистрируемых частиц.

Экспериментальное изучение импульсной азимутальной анизотропии частиц принято проводить с помощью измерения анизотропных потоков – коэффициентов разложения Фурье в распределении частиц по азимутальному углу относительно плоскости реакции [8]:

$$E \frac{d^3 N}{d^3 p} = \frac{1}{2\pi p_T dp_T dy} \left\{ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} 2v_n \cos[n(\varphi - \Psi^{RP})] \right\}, \quad (1)$$

где $E \cdot d^3 N / d^3 p$ – инвариантный дифференциальный спектр частиц; E, p – энергия и полный импульс частиц; N – количество частиц; φ – азимутальный угол вылета частицы; y – быстрота; v_n – коэффициенты Фурье (анизотропные потоки); Ψ^{RP} – азимутальный угол плоскости реакции.

Сомножитель $\frac{1}{2\pi p_T dp_T dy} \frac{d^2 N}{d^2 p_T dy}$ в разложении Фурье (1) количественно характеризует изотропное распределение частиц, усредненное по азимутальному углу; другими словами, это количество частиц в единице азимутального угла, рождающихся в интервалах dp_T и dy независимо от направления вылета частиц.

Остальная часть разложения, т.е.

$$1 + \sum_{n=1}^{\infty} 2v_n \cos[n(\varphi - \Psi^{RP})],$$

описывает отклонения углового распределения частиц, измеренного в эксперименте, от изотропного распределения.

В упрощенном варианте приведенное разложение Фурье, проинтегрированное по величинам p_T и y , имеет следующий вид:

$$\frac{dN}{d\varphi} = \frac{N_0}{2\pi} \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} v_n \cos[n(\varphi - \Psi^{RP})] \right\},$$

где N_0 – полное количество частиц в рассматриваемых интервалах величин p_T и y .

Для такого варианта коэффициенты Фурье (анизотропные потоки) следуют выражениям:

$$v_n = \left\langle \cos[n(\varphi - \Psi^{RP})] \right\rangle.$$

Наибольшие значения в области малых псевдобыстрот (она соответствует области псевдобыстрот $|\eta| < 0,35$, в которой проводятся измерения в эксперименте PHENIX [9]) принимает второй коэффициент Фурье – эллиптический поток v_2 . Значение эллиптического потока количественно характеризует конечную импульсную анизотропию, которая обусловлена начальной пространственной анизотропией области перекрытия ядер.

Таким образом, измерение коэффициентов v_2 позволяет изучать эволюцию КГП и, следовательно, оценивать ее свойства.

Сравнения экспериментальных данных по измерению эллиптических потоков адронов в столкновениях ультрарелятивистских тяжелых ядер с гидродинамическими моделями КГП показали [10], что основной механизм формирования v_2 при низких и промежуточных значениях поперечных импульсов ($p_T \leq 2 - 3$ ГэВ/с) – это гидродинамическое расширение КГП.

Одним из основных экспериментальных подкреплений данного утверждения служит масштабирование эллиптических потоков с областью перекрытия сталкивающихся ядер (она характеризуется эксцентриситетом нуклонов-участников ϵ_2) и с кубическим корнем из количества нуклонов-участников ($N_{part}^{1/3}$), который, как предполагается, характеризует радиус КГП [11]. Данное масштабирование значений v_2 от величины $\epsilon_2 N_{part}^{1/3}$ было обнаружено в столкновениях тяжелых симметричных ядер (например, при столкновениях ядер золота (Au + Au) [11]).

При поперечных импульсах $p_T > 5$ ГэВ/с влияние гидродинамического расширения КГП на образование частиц становится незначительным и ключевую роль в их рождении начинают играть жесткие процессы [1]. В связи с этим в механизме формирования эллиптических потоков начинают доминировать эффекты, связанные с потерями энергии партонов [12]. При таких высоких значениях поперечных импульсов ($p_T > 5$ ГэВ/с) рождение адронов происходит в виде адронных струй, возникающих в результате фрагментации высокоэнергетичных партонов. Однако последние, проходя через среду КГП и взаимодействуя с ней, теряют энергию, что приводит к ослаблению адронных струй. Этот эффект называется гашением адронных струй [6] и характеризуется подавлением выхода адронов в результате образования КГП.

Важно отметить, что степень подавления выхода адронов при $p_T > 5$ ГэВ/с зависит от длины пути родительских партонов в КГП: партон, вылетевший вдоль малой оси эллипса, пройдет меньшее расстояние в среде КГП, чем партон, вылетевший вдоль большой оси. Эта особенность приводит к возникновению азимутальной анизотропии частиц в импульсном пространстве относительно плоскости реакции и, следовательно, к формированию положительных значений v_2 .

Таким образом, измерение значений v_2 при поперечных импульсах $p_T > 5$ ГэВ/с позволяет изучать вторую наблюдаемую КГП, связанную с подавлением рождения адронов.

Эллиптические потоки адронов были широко изучены в симметричных тяжелых системах столкновений [12 – 14]. В частности, были получены значения v_2 для π^0 -мезонов в столкновениях ядер золота Au + Au, что в силу относительно низких неопределенностей измерения рождения π^0 -мезонов позволило провести детальное исследование механизмов возникновения эллиптических потоков в симметричных тяжелых системах столкновений в широком интервале по поперечному импульсу: $1 < p_T < 10$ ГэВ/с.

Применительно к исследованию влияния начальной геометрии столкновений на механизм формирования и развития эллиптических потоков представляет особый интерес измерение значений v_2 в столкновениях тяжелых ядер с дополнительной асимметрией области ядерного перекрытия. В эксперименте PHENIX к таким системам столкновений ядер относятся

$$\text{Cu} + \text{Au} \text{ при } \sqrt{s_{NN}} = 200 \text{ ГэВ} \text{ и } \text{U} + \text{U} \text{ при } \sqrt{s_{NN}} = 193 \text{ ГэВ}.$$

Первая система – столкновения ядер меди и золота – состоит из ядер разного размера, причем ядро золота может полностью поглотить ядро меди, а область перекрытия ядер имеет форму, отличную от эллипса.

Вторая система столкновений – самая тяжелая на коллайдере RHIC. Ядро ^{238}U имеет вытянутую форму и, следовательно, в зависимости от ориентации ядер урана в пространстве, геометрия области их перекрытия может оказаться разной [15]. Прежде всего привлекают внимание самые центральные столкновения U + U, поскольку эллиптичность области перекрытия ядер может оказаться увеличенной без уменьшения размеров образующейся КГП. Эта особенность позволяет детально исследовать зависимость потерь энергии партонов от длины их пути в КГП.

Эллиптические потоки были измерены ранее в столкновениях Cu + Au и U + U для заряженных адронов и ϕ -мезонов [16]. Однако измерения были выполнены примерно до 5 ГэВ/с, что не позволило детально исследовать азимутальную зависимость эффекта гашения струй. Измерение значений v_2 в столкновениях Cu + Au и U + U для π^0 -мезонов даст возможность получить эллиптические потоки в этих системах столкновений до больших значений поперечного импульса [17, 18], что откроет путь к детальному исследованию как гидродинамической природы v_2 , так и азимутальной зависимости эффекта гашения струй.

Задача настоящей работы состоит в измерении и сравнении эллиптических потоков π^0 -мезонов в зависимости от их поперечного импульса в различных центральностях столкновений ядер меди и золота (Cu + Au) при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ и ядер урана (U + U) при $\sqrt{s_{NN}} = 193$ ГэВ.

Методика исследования

Экспериментальные данные, анализируемые в настоящей работе, были получены в 2012 году на спектрометре PHENIX, расположенном на коллайдере RHIC. На рис. 1 представлена соответствующая конфигурация спектрометра PHENIX [9].

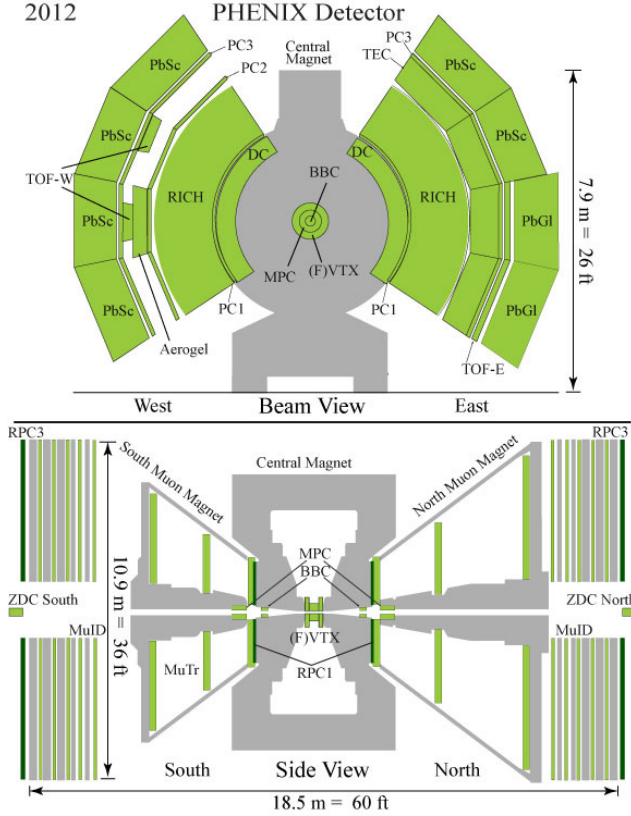


Рис. 1. Конфигурация спектрометра PHENIX в период набора данных в 2012 году

где $Q_{n,x} = \sum_{i=1}^N \omega_i \cos(n\phi_i)$, $Q_{n,y} = \sum_{i=1}^N \omega_i \sin(n\phi_i)$; Ψ_n^{EP} – азимутальный угол плоскости события n -й гармоники; при этом N – количество частиц в событии; ϕ_i – измеренный азимутальный угол частиц; ω_i – вес (например, p_T [19]), который используют для коррекции азимутальной анизотропии детектора или для учета множественности частиц.

Угол Ψ_n^{EP} можно измерить для каждой гармоники n , что дает n независимых оценок угла Ψ^{RP} :

$$\Psi_n^{EP} = \frac{1}{n} \arctan \left(\frac{Q_{n,x}}{Q_{n,y}} \right).$$

В случае идеального углового акцептанса детекторов точность оценки плоскости реакции зависит только от множественности частиц, применяемых для расчета векторов Q_n : чем больше частиц используется для определения плоскости события, тем ближе измеренный угол Ψ_n^{EP} к истинному Ψ^{RP} [20]. Однако в эксперименте угловой акцептанс детекторов ограничен, а также могут проявляться различные дополнительные эффекты, искажающие измерения азимутальных углов и приводящие к неправильному измерению анизотропных потоков. Для учета этих эффектов используются следующие общепринятые методы, основанные исключительно на экспериментально измеряемых величинах: центрирование векторов Q_n и выравнивание распределения углов Ψ_n^{EP} [19].

Центрирование векторов Q_n позволяет устранить сдвиг детекторов в плоскости, поперечной пучку, за счет вычитания их среднего значения:

$$Q'_{n,x} = Q_{n,x} - \langle Q_{n,x} \rangle, \quad Q'_{n,y} = Q_{n,y} - \langle Q_{n,y} \rangle,$$

Измерение плоскости реакции. При измерении анизотропных потоков существенная сложность состоит в определении ориентации плоскости реакции (т.е. ее азимутального угла Ψ^{RP}). Плоскость реакции задается осью ионного пучка и вектором прицельного параметра, который невозможно прямо измерить в эксперименте.

Одним из самых широко используемых методов для определения плоскости реакции служит ее оценка через измеримую в эксперименте плоскость события (так называемый «метод плоскости события» [19]). Ключевая идея этого метода заключается в использовании экспериментальной оценки вектора прицельного параметра в каждом событии – вектора потока Q_n гармоники n – вместо самого вектора [19].

Вектор Q_n можно получить для каждой гармоники Фурье на основании самого анизотропного потока в событии. Указанный вектор рассчитывается с помощью измеренных в эксперименте азимутальных углов частиц следующим образом:

$$Q_n = Q_{n,x} + iQ_{n,y} = |Q_n| e^{in\Psi_n^{EP}},$$

где $Q'_{n,x}$ и $Q'_{n,y}$ – компоненты вектора Q_n после центрирования; угловые скобки показывают усреднение векторов Q_n по всем событиям в одном интервале по центральности и по вершине.

Данный метод позволяет устранить большинство эффектов неоднородности углового акцептанса детекторов.

Остаточные неоднородности устраняются с помощью выравнивания распределения углов Ψ_n^{EP} за счет сдвига азимутального угла плоскости события на величину $\Delta\Psi_n$ [19]:

$$(\Psi_n^{EP})' = \Psi_n^{EP} + n\Delta\Psi_n,$$

$$n\Delta\Psi_n = \sum_{k=1}^M \frac{2}{k} \left[-\langle \sin(kn\Psi_n^{EP}) \rangle \cos(kn\Psi_n^{EP}) + \langle \cos(kn\Psi_n^{EP}) \rangle \sin(kn\Psi_n^{EP}) \right],$$

где $(\Psi_n^{EP})'$ – азимутальный угол плоскости события после сдвига; величина M определяет наибольший порядок гармоники Фурье и для анализов данных по измерению v_1 или v_2 обычно определяется как $M = 4/n$ [19].

После применения двух методов корректировки итоговое распределение углов Ψ_n^{EP} становится изотропным, что позволяет устранять влияние неоднородности углового акцептанса детекторов на измеряемые значения анизотропных потоков.

Значение Ψ_n^{EP} зависит от количества частиц, используемых для его оценки. Однако количество частиц в эксперименте ограничено, что приводит к дополнительному искажению определяемой плоскости события. Для устранения этого искажения вводится величина, называемая разрешением плоскости события:

$$\text{Res}\{\Psi_n^{EP}\} = \left\langle \cos \left[n(\Psi_n^{EP} - \Psi^{RP}) \right] \right\rangle.$$

Измерения величины разрешения плоскости события производятся по корреляциям углов Ψ_n^{EP} , измеренных независимо разными детекторами в различных диапазонах по псевдобыстроте. В случае симметричных систем столкновения (например, Au + Au), детектор, использующийся для измерения углов Ψ_n^{EP} и состоящий из двух частей, расположенных в противоположных диапазонах по псевдобыстроте, будет регистрировать в среднем одинаковое количество частиц в каждой части детектора. В таком случае можно говорить о «разбиении» одного события на два, в каждом из которых производится независимое измерение угла Ψ_n^{EP} – так называемый «метод двух подсобытий» [19]:

$$\text{Res}\{\Psi_n^{EPA}\} = \text{Res}\{\Psi_n^{EPB}\} = \sqrt{\left\langle \cos \left[n(\Psi_n^{EPA} - \Psi_n^{EPB}) \right] \right\rangle},$$

$$\text{Res}\{\Psi_n^{EP}\} = \sqrt{2 \left\langle \cos \left[n(\Psi_n^{EPA} - \Psi_n^{EPB}) \right] \right\rangle},$$

где Ψ_n^{EPA} , Ψ_n^{EPB} – азимутальные углы плоскости события, измеренные в подсистеме EPA и EPB одного детектора EP (например, подсистемы BBCS и BBCN детектора BBC [21]).

Однако в столкновениях тяжелых ядер, отличных от симметричных, например в системе Cu + Au или в столкновениях продольно деформированных ядер урана (U + U), маловероятно иметь детекторы, состоящие из двух подсистем, регистрирующих в среднем одинаковое количество частиц. Наиболее надежным и независимым от симметрии системы столкновений является метод трех подсобытий:

$$\text{Res}\{\Psi_n^A\} = \sqrt{\frac{\left\langle \cos \left[n(\Psi_n^A - \Psi_n^B) \right] \right\rangle \left\langle \cos \left[n(\Psi_n^A - \Psi_n^C) \right] \right\rangle}{\left\langle \cos \left[n(\Psi_n^C - \Psi_n^B) \right] \right\rangle}},$$

$$\text{Res}\{\Psi_n^B\} = \sqrt{\frac{\left\langle \cos \left[n(\Psi_n^B - \Psi_n^A) \right] \right\rangle \left\langle \cos \left[n(\Psi_n^B - \Psi_n^C) \right] \right\rangle}{\left\langle \cos \left[n(\Psi_n^A - \Psi_n^C) \right] \right\rangle}},$$

$$\text{Res}\{\Psi_n^C\} = \sqrt{\frac{\langle \cos[n(\Psi_n^C - \Psi_n^A)] \rangle \langle \cos[n(\Psi_n^C - \Psi_n^B)] \rangle}{\langle \cos[n(\Psi_n^A - \Psi_n^B)] \rangle}},$$

где $\Psi_n^A, \Psi_n^B, \Psi_n^C$ – азимутальные углы плоскости события, измеренные в различных детекторах A, B и C (т.е. детектор EP в данном случае – это один из детекторов A, B, C).

Таким образом, чтобы получить финальные значения v_n , необходимо измеренные значения анизотропных потоков

$$v_n^{meas} = \langle \cos[n(\varphi - \Psi_n^{EP})] \rangle$$

нормировать на величину разрешения плоскости события:

$$v_n = \langle \cos[n(\varphi - \Psi_n^{RP})] \rangle = \frac{\langle \cos[n(\varphi - \Psi_n^{EP})] \rangle}{\langle \cos[n(\Psi_n^{EP} - \Psi_n^{RP})] \rangle} = \frac{v_n^{meas}}{\text{Res}\{\Psi_n^{EP}\}}.$$

В данной работе плоскость события измерялась с помощью детекторов FVTX [22] и BBC при анализе столкновений $\text{Cu} + \text{Au}$, а при изучении данных по столкновениям $\text{U} + \text{U}$ для измерения углов Ψ_n^{EP} использовался детектор MPC [23]. Значения разрешений плоскости события были получены для обеих систем столкновений с помощью метода трех подсобытий, в котором в качестве дополнительной независимой оценки углов Ψ_n^{EP} использовалась детекторная система центральных плеч спектрометра PHENIX (CNT [24]), т.е. при анализе столкновений $\text{Cu} + \text{Au}$ применялась комбинация детекторов FVTX-BBC-CNT, а при анализе столкновений $\text{U} + \text{U}$ – MPC-BBC-CNT:

$$\begin{aligned} \text{Res}\{\Psi_n^{FVTX}\} &= \sqrt{\frac{\langle \cos[n(\Psi_n^{FVTX} - \Psi_n^{BBC})] \rangle \langle \cos[n(\Psi_n^{FVTX} - \Psi_n^{CNT})] \rangle}{\langle \cos[n(\Psi_n^{CNT} - \Psi_n^{BBC})] \rangle}}, \\ \text{Res}\{\Psi_n^{BBC}\} &= \sqrt{\frac{\langle \cos[n(\Psi_n^{BBC} - \Psi_n^{FVTX})] \rangle \langle \cos[n(\Psi_n^{BBC} - \Psi_n^{CNT})] \rangle}{\langle \cos[n(\Psi_n^{CNT} - \Psi_n^{FVTX})] \rangle}}, \\ \text{Res}\{\Psi_n^{MPC}\} &= \sqrt{\frac{\langle \cos[n(\Psi_n^{MPC} - \Psi_n^{BBC})] \rangle \langle \cos[n(\Psi_n^{MPC} - \Psi_n^{CNT})] \rangle}{\langle \cos[n(\Psi_n^{CNT} - \Psi_n^{BBC})] \rangle}}. \end{aligned}$$

Важно отметить, что в столкновениях $\text{Cu} + \text{Au}$ детектор FVTX использовался при $p_T < 5$ ГэВ/с, а при остальных значениях поперечного импульса использовался детектор BBC. С одной стороны, значения $\text{Res}\{\Psi_n^{FVTX}\}$ превосходят значения $\text{Res}\{\Psi_n^{BBC}\}$ во всем рассматриваемом диапазоне по центральности [16], что делает его предпочтительным. Но с другой стороны, в отличие от детектора BBC ($3,1 < |\eta| < 3,9$) у детектора FVTX диапазон по псевдобыстроте ($1,0 < |\eta| < 3,0$) близок к области малых быстрот ($|\eta| < 0,35$), где происходит измерение рождения π^0 -мезонов, изучаемых в данной работе. Близость детектора FVTX к области малых быстрот делает его более восприимчивым, чем BBC к непотоковым эффектам (таким как распад резонансов) [25], искажающим значения анизотропных потоков. Благодаря этим двум особенностям детекторной установки, комбинация детекторов FVTX и BBC в зависимости от p_T позволяет устранить влияние непотоковых эффектов и провести точные измерения анизотропных потоков.

Методика измерения значений эллиптических потоков. В данной работе были измерены анизотропные потоки второго порядка, называемые эллиптическими потоками v_2 , поэтому далее в работе везде принимается, что $n = 2$. Измерения коэффициентов v_2 были выполнены для π^0 -мезонов как функция от их поперечного импульса в различных

центральных столкновений ядер меди и золота (Cu + Au) при $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ и ядер урана (U + U) при $\sqrt{s_{NN}} = 193$ ГэВ. Методика получения значений v_2 заключалась в аппроксимации распределения π^0 -мезонов по их азимутальному углу относительно плоскости события следующей функцией:

$$\frac{dN}{d\phi} = \frac{N_0}{2\pi} \left(1 + 2v_2^{meas} \cos \left[n(\phi - \Psi_2^{EP}) \right] \right).$$

Для построения распределения π^0 -мезонов по их азимутальному углу относительно плоскости события ($\Delta\phi = \phi - \Psi_2^{EP}$) было проведено измерение их выходов в шести диапазонах по $\Delta\phi$ в интервале от 0 до $\pi/2$. Реконструкция π^0 -мезонов была выполнена в канале распада $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$. Регистрация дочерних фотонов и определение их кинематических характеристик были осуществлены с помощью электромагнитного калориметра EMCal [26].

На основе зарегистрированных пар фотонов, удовлетворяющих критериям отбора [17, 18], формировалось их распределение по инвариантной массе. Исходное распределение состояло из фоновой части и сигнала π^0 -мезонов. Фоновая часть подразделялась на коррелированную и некоррелированную составляющие. Некоррелированная составляющая вычиталась с помощью метода смешивания событий. Коррелированная фоновая часть аппроксимировалась полиномом второй степени и вычиталась из распределения по инвариантной массе. Остальное распределение пар фотонов по инвариантной массе аппроксимировалось функцией Гаусса, а величина выхода π^0 -мезонов вычислялась путем интегрирования этого распределения в интервале $\pm 2\sigma$ от массы π^0 -мезона.

После извлечения значений измеренных эллиптических потоков из аппроксимации распределения $dN/d\phi$ значения v_2^{meas} нормировались на величину разрешения плоскости события. Измерения были проведены отдельно для каждого интервала по поперечному импульсу в диапазоне $1 < p_T < 10$ ГэВ/с и для шести классов событий по центральности столкновений Cu + Au и U + U:

0 – 10%, 10 – 20%, 20 – 30%, 30 – 40%, 40 – 50% и 50 – 60%.

Результаты измерений, их анализ и обсуждение

На рис. 2 представлены измеренные зависимости значений v_2 для π^0 -мезонов от их поперечного импульса в различных классах событий по центральности столкновений Cu + Au при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ и U + U при $\sqrt{s_{NN}} = 193$ ГэВ.

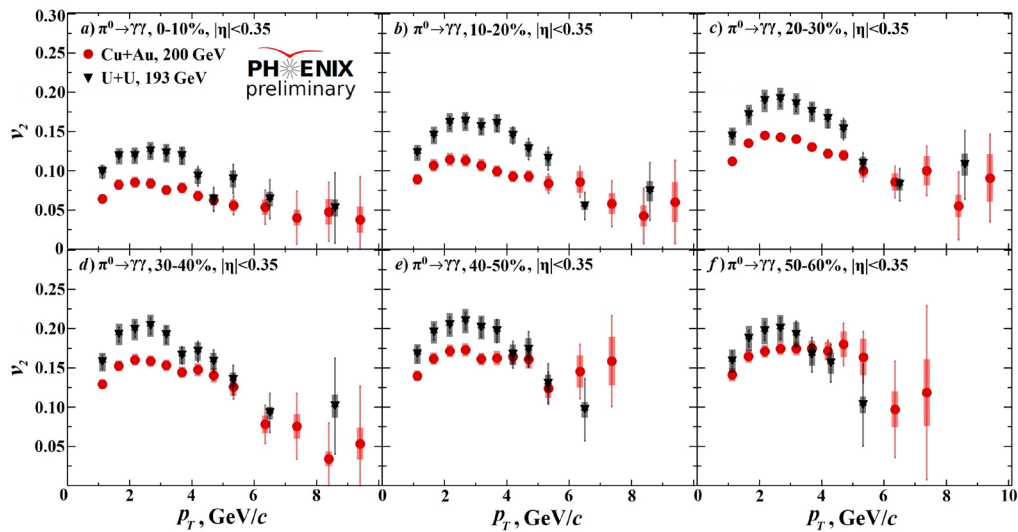


Рис. 2. Зависимости значений v_2 для π^0 -мезонов от поперечного импульса p_T , измеренные в столкновениях Cu+Au при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ и U+U при $\sqrt{s_{NN}} = 193$ ГэВ в шести классах событий по центральности (%): 0–10 (a), 10–20 (b), 20–30 (c), 30–40 (d), 40–50 (e), 50–60 (f).

Реконструкция π^0 -мезонов выполнена в канале распада $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$ и в области малых быстрот ($|\eta| < 0,35$)

В зависимостях $v_2(p_T)$ на рис. 2 целесообразно выделить два диапазона по поперечному импульсу: $p_T < 5$ ГэВ/с и $p_T > 5$ ГэВ/с. Границей этих диапазонов служит место пересечения зависимостей $v_2(p_T)$ в обеих системах столкновений – при значении $p_T \approx 5$ ГэВ/с. Наблюдаемое изменение упорядочения зависимостей $v_2(p_T)$ указывает на смену доминирующего механизма формирования v_2 с гидродинамического расширения КГП на потери энергии партонов. Аналогичное поведение зависимости $v_2(p_T)$ для π^0 -мезонов наблюдалось ранее в столкновениях ядер золота Au+Au [12].

В диапазоне $p_T < 5$ ГэВ/с эллиптические потоки π^0 -мезонов в столкновениях U + U систематически превосходят аналогичные значения в столкновениях Cu + Au. Это, скорее всего, связано с тем, что столкновения U + U приводят к образованию большего объема КГП, чем столкновения Cu + Au. Различие объемов КГП приводит к разным значениям коллективного потока, в частности эллиптического потока, в рассматриваемых системах. Это наблюдение интерпретируется в рамках гидродинамической модели КГП, что можно проверить, если учесть форму области перекрытия ядер и размеры образованной КГП.

В диапазоне высоких значений поперечных импульсов $p_T > 5$ ГэВ/с измеренные зависимости $v_2(p_T)$ в столкновениях U + U и Cu + Au соизмеримы с учетом неопределенностей измерений и имеют положительные значения. Формирование положительных значений эллиптических потоков при таких больших значениях величины p_T объясняется различной длиной пробега высокоэнергетичных партонов в среде КГП относительно плоскости реакции: чем большее расстояние партон проходит в КГП, тем больше он теряет энергии и, следовательно, тем сильнее эффект гашения адронных струй.

Таким образом, совпадение значений $v_2(p_T)$ в столкновениях U + U и Cu + Au при $p_T > 5$ ГэВ/с свидетельствует об одинаковой степени азимутальной анизотропии эффекта гашения адронных струй в рассмотренных столкновениях.

Измеренные значения эллиптических потоков в обеих системах столкновений растут по мере увеличения центральности (т.е. при переходе от центральных столкновений к периферическим), вплоть до значений центральности 40 – 50%. Рост значений v_2 с увеличением p_T обусловлен усиливающейся пространственной анизотропией области перекрытия ядер. Однако величина эллиптических потоков зависит также от множественности π^0 -мезонов, которая, напротив, снижается при переходе к периферическим столкновениям. Конкуренция этих двух эффектов приводит к ограничению максимальных значений $v_2(p_T)$, наблюдаемому для центральности 40 – 50%.

В периферических столкновениях, соответствующих центральностям 40 – 50% и 50 – 60%, происходит уменьшение множественности рождающихся частиц, что может приводить к усилению непотоковых эффектов, особенно в области высоких значений $p_T > 5$ ГэВ/с и, как следствие, к завышению измеренных значений v_2 . Из данных на рис. 2 следует, что значения $v_2(p_T)$ π^0 -мезонов в центральностях 40 – 50% и 50 – 60% столкновений Cu + Au при $p_T > 5$ ГэВ/с превосходят аналогичные значения в (U + U)-столкновениях. Это различие может быть связано с влиянием непотоковых эффектов на измеренные значения v_2 при $p_T > 5$ ГэВ/с в столкновениях Cu + Au, даже несмотря на существенный промежуток по псевдобыстроте между оценкой плоскости реакции и измерением рождения π^0 -мезонов.

Для более наглядного сравнения измеренных эллиптических потоков π^0 -мезонов в рамках каждой рассматриваемой системы столкновений Cu + Au и U + U, полученные зависимости $v_2(p_T)$ были построены на одном рисунке для всех классов событий по центральности. Данные зависимости представлены на рис. 3 для столкновений Cu + Au и U + U.

В дополнение к выводам, сделанным на основе данных рис. 2, следует отметить, что согласно результатам, представленным на рис. 3 для центральностей 40 – 50% и 50 – 60% столкновений Cu + Au, значения v_2 при $p_T > 4$ ГэВ/с превосходят аналогичные значения, измеренные в остальных центральностях и в системе столкновений U + U. Такое наблюдение может указывать на наличие существенного вклада от непотоковых эффектов в измеренные значения v_2 .

Кроме того, при высоких значениях поперечных импульсов $p_T > 5$ ГэВ/с во всех рассматриваемых системах столкновений эллиптические потоки π^0 -мезонов имеют

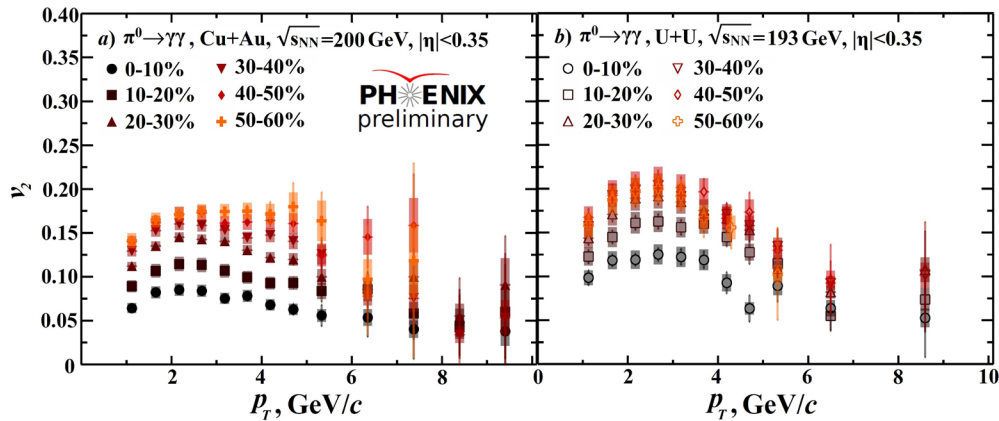


Рис. 3. Зависимости значений v_2 для π^0 -мезонов от величины p_T , измеренные в столкновениях Cu + Au при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ (a) и U + U при $\sqrt{s_{NN}} = 193$ ГэВ (b) в шести классах событий по центральности.

Реконструкция π^0 -мезонов выполнена в канале распада $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$ и в области малых быстрот ($|\eta| < 0,35$)

положительные значения. Такой результат, скорее всего, обусловлен преобладанием эффекта гашения адронных струй в механизме развития эллиптических потоков.

Заключение

В представленной работе были измерены эллиптические потоки π^0 -мезонов в широком диапазоне значений поперечных импульсов ($1 \leq p_T < 10$ ГэВ/с) в различных интервалах по центральности столкновений Cu + Au при $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ и U + U при $\sqrt{s_{NN}} = 193$ ГэВ. Кроме того, в ходе работы была подробно представлена методика этих измерений и проведено сравнение измеренных значений $v_2(p_T)$ π^0 -мезонов в столкновениях Cu + Au и U + U.

Установлено, что измеренные значения v_2 π^0 -мезонов увеличиваются при переходе от центральных столкновений к периферическим вплоть до центральности 40 – 50%. Полученный результат объясняется тем, что увеличение центральности влечет за собой, с одной стороны, повышение асимметрии области перекрытия ядер, а с другой, – снижение множественности регистрируемых частиц. Оба эффекта оказывают противоположное влияние на величину v_2 , приводя к ограничению максимальных значений эллиптических потоков в интервале 40 – 50% по центральности столкновений Cu + Au и U + U.

Обнаружено, что значения $v_2(p_T)$ π^0 -мезонов при $p_T < 5$ ГэВ/с в системе столкновений Cu + Au оказались ниже, чем в столкновениях U + U. Это наблюдение может свидетельствовать об образовании большего объема КГП в столкновениях U + U.

В области больших поперечных импульсов ($p_T > 5$ ГэВ/с) эллиптические потоки π^0 -мезонов в рассмотренных системах столкновений имеют положительные значения, что, по нашему мнению, связано с зависимостью потерь энергии партонов от длины их пути в КГП.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Adcox K., Adler S., Afanasiev S., et al. (PHENIX Collaboration). Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus–nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX Collaboration // Nuclear Physics A. 2005. Vol. 757. No. 1–2. Pp. 184–283.
2. Shuryak E. Quantum chromodynamics and the theory of superdense matter // Physics Reports. 1980. Vol. 61. No. 2. Pp. 71–158.
3. Collins J., Perry M. Superdense matter: Neutrons or asymptotically free quarks? // Physical Review Letters. 1975. Vol. 34. No. 21. Pp. 1353–1356.
4. Matsui T., Satz H. J/ψ suppression by quark-gluon plasma formation // Physics Letters B. 1986. Vol. 178. No. 4. Pp. 416–422.

5. **Ollitrault J.-Y.** Anisotropy as a signature of transverse collective flow // *Physical Review D*. 1992. Vol. 46. No. 1. Pp. 229–245.
6. **Cao S., Wang X.-N.** Jet quenching and medium response in high-energy heavy-ion collisions: A review // *Reports on Progress in Physics*. 2021. Vol. 84. No. 2. P. 024301.
7. **Heinz U., Snellings R.** Collective flow and viscosity in relativistic heavy-ion collisions // *Annual Review of Nuclear and Particle Science*. 2013. Vol. 63. October. Pp. 123–151.
8. **Voloshin S., Zhang Y.** Flow study in relativistic nuclear collisions by Fourier expansion of azimuthal particle distributions // *Zeitschrift für Physik C*. 1996. Vol. 70. December. Pp. 665–671.
9. **Adcox K., Adler S., Aizama M., et al.** (PHENIX Collaboration). PHENIX detector overview // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. 2003. Vol. 499. No. 2–3. Pp. 469–479.
10. **Adams J., Aggarwal M., Ahammed Z., et al.** (STAR Collaboration). Azimuthal anisotropy in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV // *Physical Review C*. 2005. Vol. 72. No. 1. P. 014904.
11. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration). Systematic study of azimuthal anisotropy in Cu+Cu and Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 62.4$ and 200 GeV // *Physical Review C*. 2015. Vol. 92. No. 3. P. 034913.
12. **Afanasiev S., Aidala C., Ajitanand N., et al.** (PHENIX Collaboration). High- p_T π^0 production with respect to the reaction plane in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV // *Physical Review C*. 2009. Vol. 80. No. 5. P. 054907.
13. **Aamodt K., Abelev B., Abrahantes Quintana A., et al.** (ALICE Collaboration). Elliptic flow of charged particles in Pb–Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$ TeV // *Physical Review Letters*. 2010. Vol. 105. No. 25. P. 252302.
14. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration). Scaling properties of azimuthal anisotropy in Au+Au and Cu+Cu collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV // *Physical Review Letters*. 2007. Vol. 98. No. 16. P. 162301.
15. **Wang Z., Chen J., Xu H., Zhao J.** Systematic investigation of the nuclear multipole deformations in U+U collisions with a multi-phase transport model // *Physical Review C*. 2024. Vol. 110. No. 3. P. 034907.
16. **Abdulameer N., Acharya U., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration). Measurement of φ meson production in Cu+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV and U+U collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 193$ GeV // *Physical Review C*. 2023. Vol. 107. No. 1. P. 014907.
17. **Aidala C., Ajitanand N., Akiba Y., et al.** (PHENIX Collaboration). Production of π^0 and η mesons in Cu+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV // *Physical Review C*. 2018. Vol. 98. No. 5. P. 054903.
18. **Acharya U., Aidala C., Ajitanand N., et al.** (PHENIX Collaboration). Production of π^0 and η mesons in U+U collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 192$ GeV // *Physical Review C*. 2020. Vol. 102. No. 6. P. 064905.
19. **Poskanzer A., Voloshin S.** Methods for analyzing anisotropic flow in relativistic nuclear collisions // *Physical Review C*. 1998. Vol. 58. No. 3. Pp. 1671–1678.
20. **Selyuzhenkov I., Voloshin S.** Effects of nonuniform acceptance in anisotropic flow measurements // *Physical Review C*. 2008. Vol. 77. No. 3. P. 034904.
21. **Allen M., Bennett M., Bobrek M., et al.** (PHENIX Collaboration). PHENIX inner detectors // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. 2003. Vol. 499. No. 2–3. Pp. 549–559.
22. **Aidala C., Anaya L., Anderssen E., et al.** (PHENIX Collaboration). The PHENIX Forward Silicon Vertex Detector // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. 2014. Vol. 755. 11 August. Pp. 44–61.
23. **Chiu M.** Single spin transverse asymmetries of neutral pions at forward rapidities in $\sqrt{s_{NN}} = 62.4$ GeV polarized proton collisions in PHENIX // *AIP Conference Proceedings*. 2007. Vol. 915. No. 1. Pp. 539–542.
24. **Adcox K., Ajitanand N., Alexander J., et al.** (PHENIX Collaboration). PHENIX central arm tracking detectors // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. 2003. Vol. 499. No. 2–3. Pp. 489–507.
25. **Ollitrault J.-Y., Poskanzer A., Voloshin S.** Effect of flow fluctuations and nonflow on elliptic flow methods // *Physical Review C*. 2009. Vol. 80. No. 1. P. 014904.
26. **Aphcetché L., Awes T., Banninget J., al.** (PHENIX Collaboration). PHENIX calorimeter // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. 2003. Vol. 499. No. 2–3. Pp. 521–536.

REFERENCES

1. **Adcox K., Adler S., Afanasiev S., et al.** (PHENIX Collaboration), Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus–nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX Collaboration, *Nucl. Phys. A.* 757 (1–2) (2005) 184–283.
2. **Shuryak E.**, Quantum chromodynamics and the theory of superdense matter, *Phys. Rept.* 61 (2) (1980) 71–158.
3. **Collins J., Perry M.**, Superdense matter: neutrons or asymptotically free quarks? *Phys. Rev. Lett.* 34 (21) (1975) 1353–1356.
4. **Matsui T., Satz H.**, J/ψ suppression by quark-gluon plasma formation, *Phys. Lett. B.* 178 (4) (1986) 416–422.
5. **Ollitrault J.-Y.**, Anisotropy as a signature of transverse collective flow, *Phys. Rev. D.* 46 (1) (1992) 229–245.
6. **Cao S., Wang X.-N.**, Jet quenching and medium response in high-energy heavy-ion collisions: a review, *Rept. Prog. Phys.* 84 (2) (2021) 024301.
7. **Heinz U., Snellings R.**, Collective flow and viscosity in relativistic heavy-ion collisions, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* 63 (Oct) (2013) 123–151.
8. **Voloshin S., Zhang Y.**, Flow study in relativistic nuclear collisions by Fourier expansion of azimuthal particle distributions, *Z. Phys C.* 70 (Dec) (1996) 665–671.
9. **Adcox K., Adler S., Aizama M., et al.** (PHENIX Collaboration), PHENIX detector overview, *Nucl. Instrum. Meth. A.* 499 (2–3) (2003) 469–479.
10. **Adams J., Aggarwal M., Ahammed Z., et al.** (STAR Collaboration), Azimuthal anisotropy in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV, *Phys. Rev. C.* 72 (1) (2005) 014904.
11. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration), Systematic study of azimuthal anisotropy in Cu+Cu and Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 62.4$ and 200 GeV, *Phys. Rev. C.* 92 (3) (2015) 034913.
12. **Afanasiev S., Aidala C., Ajitanand N., et al.** (PHENIX Collaboration), High- p_T π^0 production with respect to the reaction plane in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV, *Phys. Rev. C.* 80 (5) (2009) 054907.
13. **Aamodt K., Abelev B., Abrahantes Quintana A., et al.** (ALICE Collaboration), Elliptic flow of charged particles in Pb–Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$ TeV, *Phys. Rev. Lett.* 105 (25) (2010) 252302.
14. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration), Scaling properties of azimuthal anisotropy in Au+Au and Cu+Cu collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV, *Phys. Rev. Lett.* 98 (16) (2007) 162301.
15. **Wang Z., Chen J., Xu H., Zhao J.**, Systematic investigation of the nuclear multipole deformations in U+U collisions with a multi-phase transport model, *Phys. Rev. C.* 110 (3) (2024) 034907.
16. **Abdulameer N., Acharya U., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration), Measurement of ϕ meson production in Cu+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV and U+U collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 193$ GeV, *Phys. Rev. C.* 107 (1) (2023) 014907.
17. **Aidala C., Ajitanand N., Akiba Y., et al.** (PHENIX Collaboration), Production of π^0 and η mesons in Cu+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV, *Phys. Rev. C.* 98 (5) (2018) 054903.
18. **Acharya U., Aidala C., Ajitanand N., et al.** (PHENIX Collaboration), Production of π^0 and η mesons in U+U collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 192$ GeV, *Phys. Rev. C.* 102 (6) (2020) 064905.
19. **Poskanzer A., Voloshin S.**, Methods for analyzing anisotropic flow in relativistic nuclear collisions, *Phys. Rev. C.* 58 (3) (1998) 1671–1678.
20. **Selyuzhenkov I., Voloshin S.**, Effects of nonuniform acceptance in anisotropic flow measurements, *Phys. Rev. C.* 77 (3) (2008) 034904.
21. **Allen M., Bennett M., Bobrek M., et al.** (PHENIX Collaboration), PHENIX inner detectors, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A.* 499 (2–3) (2003) 549–559.
22. **Aidala C., Anaya L., Anderssen E., et al.** (PHENIX Collaboration), The PHENIX Forward Silicon Vertex Detector, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A.* 755 (11 Aug) (2014) 44–61.
23. **Chiu M.**, Single spin transverse asymmetries of neutral pions at forward rapidities in $\sqrt{s_{NN}} = 62.4$ GeV polarized proton collisions in PHENIX, *AIP Conf. Proc.* 915 (1) (2007) 539–542.
24. **Adcox K., Ajitanand N., Alexander J., et al.** (PHENIX Collaboration), PHENIX central arm tracking detectors, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A.* 499 (2–3) (2003) 489–507.

25. Ollitrault J.-Y., Poskanzer A., Voloshin S., Effect of flow fluctuations and nonflow on elliptic flow methods, Phys. Rev. C. 80 (1) (2009) 014904.

26. Ahechetche L., Awes T., Banninget J., et al. (PHENIX Collaboration), PHENIX calorimeter, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 499 (2–3) (2003) 521–536.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БАНИКОВ Егор Викторович – аспирант Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

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

bannikov.ev.21@gmail.com

ORCID: 0000-0002-9820-062X

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

КОТОВ Дмитрий Олегович – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

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

dmitriy.kotov@gmail.com

ORCID: 0000-0002-3395-0454

ЛАРИОНОВА Дарья Максимовна – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

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

dashalarior@gmail.com

ORCID: 0009-0007-7019-5586

THE AUTHORS

BANNIKOV Egor V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

bannikov.ev.21@gmail.com

ORCID: 0000-0002-9820-062X

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

KOTOV Dmirty O.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

dmitriy.kotov@gmail.com

ORCID: 0000-0002-3395-0454



LARIONOVA Daria M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
dashalario@gmail.com
ORCID: 0009-0007-7019-5586

*Статья поступила в редакцию 10.12.2025. Одобрена после рецензирования 29.12.2025.
Принята 19.01.2026.*

Received 10.12.2025. Approved after reviewing 29.12.2025. Accepted 19.01.2026.

Теоретическая физика

Научная статья

УДК 538.9

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19113>

ЗАВИСИМОСТЬ ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ ОБЪЕМНО-ЛЕГИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ СУЛЬФИДА КАДМИЯ ОТ ИХ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ РАЗМЕРОВ И ЧИСЛА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА

А. Н. Ипатов^{1,2}, Г. А. Куприянов¹ □

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

² Академический университет им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия
□ henryweis3@gmail.com

Аннотация. Продолжено теоретическое исследование дипольных плазмонных резонансов в объемно-легированных полупроводниковых нанокристаллах CdS. Рассмотрен случай большего числа свободных носителей в нанокристалле. Показано, что в спектрах фотопоглощения систем, рассмотренных на данном этапе исследования, доминирует гигантский дипольный резонанс. Установлено, что для рассмотренного случая сохраняются все тенденции и зависимости, выявленные ранее. Таким образом, характер коллективной моды может изменяться от режима классического дипольного плазмона к режиму размерного квантования при варьировании высоты потенциального барьера на границе наночастицы. При этом характер и скорость указанного изменения зависят от числа свободных носителей и размеров нанокристалла.

Ключевые слова: полупроводниковый нанокристалл, сульфид кадмия, легирование, плазмонный резонанс, многочастичное возбуждение

Для цитирования: Ипатов А. Н., Куприянов Г. А. Зависимость оптических спектров объемно-легированных полупроводниковых нанокристаллов сульфида кадмия от их геометрических размеров и числа носителей заряда // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 158–169. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19113>

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.19113>

DEPENDENCE OF OPTICAL SPECTRA OF BULK-DOPED CADMIUM SULFIDE SEMICONDUCTOR NANOCRYSTALS ON THEIR GEOMETRICAL DIMENSIONS AND NUMBER OF CHARGE CARRIERS

A. N. Ipatov^{1,2}, G. A. Kupriianov¹ □

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

² Alferov University, St. Petersburg, Russia

□ henryweis3@gmail.com

Abstract. The theoretical study of dipole plasmon resonances in bulk-doped CdS semiconductor nanocrystals has been continued. In this paper, the case of a larger number



of free carriers in a nanocrystal was considered. It was demonstrated that the giant dipole resonance dominated in the photoabsorption spectra of the systems considered. For this case, all the trends and dependencies revealed earlier were established to remain the same. Thus, the character of the collective mode can change from the classical dipole plasmon regime to the size quantization one when varying the height of the potential barrier at the nanoparticle boundary. In so doing, the character and rate of this change depend on the number of free carriers and the nanocrystal size.

Keywords: semiconductor nanocrystal, cadmium sulfide, doping, plasmon resonance, multiparticle excitation

For citation: Ipatov A. N., Kupriianov G. A., Dependence of optical spectra of bulk-doped cadmium sulfide semiconductor nanocrystals on their geometrical dimensions and number of charge carriers, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (1) (2026) 158–169. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19113>

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

Введение

В последнее время происходит активное развитие наноэлектроники и нанофотоники, что, в свою очередь, стимулирует создание новых материалов, свойства которых принципиально отличаются от соответствующих свойств аналогичных объемных соединений. Одно из направлений, подающее большие надежды, — это квантовая плазмоника, которая изучает взаимодействие света с веществом на наноразмерном уровне [1 – 7]. В число перспективных материалов наноплазмоники входят легированные полупроводниковые нанокристаллы, для которых характерно наличие дипольных плазмонных резонансов в их оптических спектрах [8 – 11]. Свойства последних зависят от ряда параметров, и среди них параметры внешней среды, концентрация носителей, а также тип легирования, которое можно условно назвать поверхностным или объемным [12 – 16].

Так, у нанокристаллов с первым типом легирования при взаимодействии с электромагнитным излучением возбуждаются только угловые степени свободы [17 – 19]. В случае же объемного типа легирования включаются радиальные степени свободы и дипольный плазмон представляет собой гармонические колебания всей системы электронов как единого целого вдоль нормали к поверхности кристалла [14 – 16, 20].

Согласно результатам, представленным в работах [17, 18], для описания возбужденных состояний электронной системы полупроводниковых нанокристаллов с поверхностным типом легирования можно использовать простую двухуровневую модель [18, 21]. Это возможно благодаря тому, что для плазмонных мод их частоты и силы осцилляторов практически полностью определяются вкладом коррелированных возбуждений одного дипольного перехода одночастичными уровнями НОМО и LUMO.

Ситуация с объемно-легированными кристаллами значительно отличается от вышеописанной. Как оказалось, в данном случае описание возбужденных состояний электронной системы требует учета вкладов, как минимум, двух одночастичных дипольных переходов, связанных друг с другом корреляционным взаимодействием. Кроме того, при наличии на поверхности кристалла потенциального барьера доминирующая резонансная мода также расщепляется на несколько отдельных спектральных линий [21].

Цель данной работы — анализ зависимостей характера многочастичных возбужденных состояний системы свободных электронов в полупроводниковых нанокристаллах сульфида кадмия CdS с объемным типом легирования от ряда параметров: геометрических размеров нанокристаллов и высоты потенциального барьера на их границе.

Основное состояние системы рассчитывалось при помощи численного решения самосогласованных уравнений Кона — Шема [22]. Для получения спектров фотопоглощения рассматриваемых систем было использовано приближение случайных фаз (*англ.* Random Phase Approximation (RPA)) с локальным обменным взаимодействием (RPAX) [23, 24].

Исследование возбужденных состояний в объемно-легированных сферических нанокристаллах CdS различного радиуса, содержащих 8 делокализованных носителей заряда,

показало ряд тенденций и зависимостей [25]. Так, было выявлено наличие двух основных дипольных резонансов с частотами Ω_1 и Ω_2 . В пределе свободных систем доминирует первый из них. При появлении потенциального барьера на границе нанокристалла, с ростом высоты барьера у нанокристаллов малых радиусов (от $R = 1$ нм до $R = 4$ нм) происходит смена мод местами, так что доминировать начинает вторая (Ω_2). Однако при этом уже у нанокристаллов радиуса $R = 4$ нм явного доминирования не достигает ни одна из мод при достаточно больших значениях высоты барьера. Для нанокристаллов больших радиусов, при любой высоте барьера доминирует первая мода (Ω_1). Кроме того, следует отметить, что обе основные моды имеют многочастичный характер, причем с увеличением размера системы вклад межчастичных корреляций в формирование возбужденного состояния растет.

Стоит также отметить, что переход к режиму размерного квантования с ростом высоты барьера происходит только у моды Ω_1 , причем только при сравнительно малых размерах системы. Для нанокристаллов радиуса $R = 4$ нм такой переход уже не наблюдается ни для одной моды.

Чтобы удостовериться в том, что выявленные тенденции поведения зависимости спектральных характеристик исследуемых наночастиц от высоты потенциального барьера на их границе имеют достаточно общий характер, рассмотрим систему с существенно большим числом свободных носителей заряда, например, с $N = 58$ электронов. Основное состояние такой системы имеет конфигурацию

$$1s^2 2p^6 3d^{10} 2s^2 4f^{14} 3p^6 5g^{18}$$

с семью заполненными электронными оболочками.

Теоретический подход

В проведенном исследовании рассматривались нанокристаллы CdS с объемным n -типом легирования в диэлектрическом окружении. Расчеты проводились таким же образом, как описано в статье [25]. Исследуемые нанокристаллы рассматривались как электронейтральные системы взаимодействующих фермионов, которые связаны друг с другом кулоновским взаимодействием, и их движение ограничено объемом потенциальной ямы. Соответствующий гамильтониан приведен в формуле (1) статьи [25]. При этом в связи с формой нанокристаллов, которая условно считается шарообразной, модельный внешний потенциал в гамильтониане имеет вид потенциала равномерно заряженного шара. В качестве свободных частиц выступают электроны в зоне проводимости. Вследствие экранирования парного кулоновского взаимодействия, потенциал межчастичного взаимодействия принимает вид, представленный в уравнении (3) в статье [25].

Межчастичное взаимодействие в основном состоянии описывалось в рамках приближения локальной плотности (LDA), которое подразумевает, что одночастичные волновые функции свободных электронов должны удовлетворять самосогласованным уравнениям Кона – Шема (см. уравнение (5) в статье [25]). При этом предполагаемая сферическая симметрия системы позволяет представить вышеописанные одночастичные волновые функции как произведение радиальной, угловой и спиновой компонент (см. уравнение (7) в статье [25]).

Многоэлектронные корреляции описывались в рамках приближения случайных фаз с локальным обменным взаимодействием (RPAX), где суперпозиция одночастичных возбуждений типа частица-вакансия используется для представления волновой функции возбужденного состояния, как это записано в [25, формула (8)]. Кроме того, в связи с тем, что рассматриваемая система сферически симметрична, в приближении связи Рассела – Саундерса (LS -связь) для того, чтобы описать оптические свойства нанокристаллов, оказывается достаточно рассмотреть дипольные переходы из основного состояния в k -ε возбужденное, у которого полный орбитальный момент $L = 1$, а его проекция $M = 0$ [25].

Амплитудные коэффициенты «вперед-во-времени» ($X^{(k)}$) и «назад-во-времени» ($Y^{(k)}$) в вышеупомянутой суперпозиции находятся из матричного уравнения RPAX (9) в статье [25]. Энергии оптических переходов и соответствующие им силы осцилляторов, которые получаются при решении этого уравнения, позволяют описать возбужденные состояния

системы, возникающие в результате различных внешних воздействий. Так, например, в системе возникают дипольные возбуждения как отклик на действие внешнего электромагнитного поля. При этом силы осцилляторов дипольных переходов между основным и k -м возбужденным состояниями подчиняются правилу сумм Томаса – Райха – Куна и определяются уравнением (15) в статье [25].

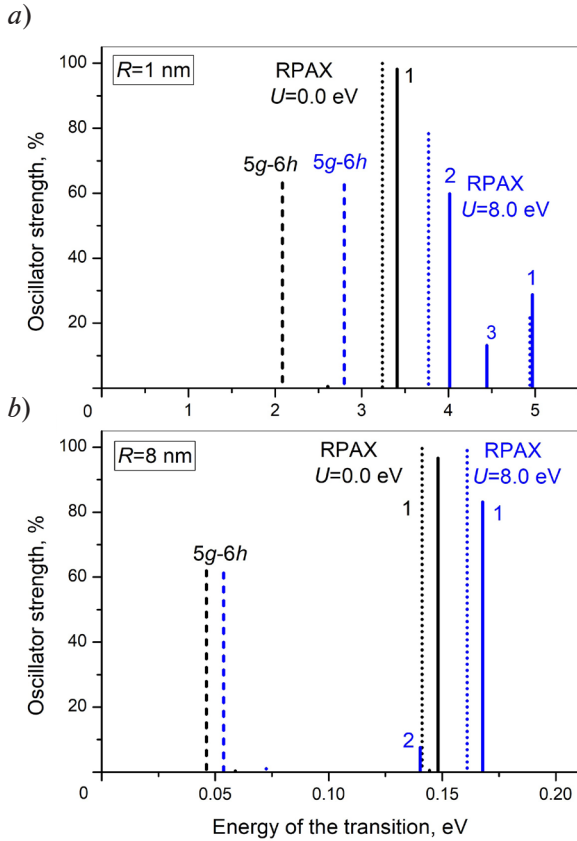


Рис. 1. Распределение сил осцилляторов для квантовых точек CdS с $N = 58$ электронов с радиусами нанокристаллов $R = 1$ нм (a) и $R = 8$ нм (b) при двух различных значениях высоты U потенциального барьера.

Показаны результаты точного расчета RPAX (9) (сплошные линии) и учитывающего только два основных перехода (37) (пунктиры), а также силы осцилляторов для переходов $5g \rightarrow 6h$ в одночастичном приближении (штриховые линии). Формулы под указанными номерами см. в работе [25]

корреляций между этими двумя каналами при формировании коллективных возбуждений (см. формулу (8) в статье [25]) в дипольных спектрах нанокристаллов. Об этом же свидетельствует наблюдаемое существенное различие между спектрами RPAX и распределениями сил осцилляторов, соответствующих основным одночастичным переходам.

Вследствие изменения высоты потенциального барьера происходит изменение характера радиальных зависимостей плотностей переходов, в особенности для частиц меньшего размера (рис. 2), как это происходило и для нанокристалла с восемью свободными носителями заряда. Это также свидетельствует о перераспределении между вкладами одночастичных каналов при формировании возбужденного состояния (8), в первую очередь между основными каналами $5g \rightarrow 6h$ и $5g \rightarrow 5f$. В случае «свободной» системы для мод с частотой Ω_1 максимум плотности переходов по-прежнему приходится на область вблизи

Проведенные расчеты возбужденных состояний нанокристаллов CdS при различных значениях радиуса R показали, что, как и в случае системы с меньшим числом электронов, в спектре доминируют две основных линии, соответствующие коллективным дипольным возбуждениям. При этом влияние потенциального барьера приводит как к перераспределению сил осцилляторов между ними, так и к перераспределению вкладов основных одночастичных каналов между этими модами.

На рис. 1 представлены распределения сил осцилляторов, вычисленные для радиусов нанокристаллов $R = 1$ нм и $R = 8$. На графиках видно, что в пределе «свободных» систем, при высоте барьера $U = 0$ эВ, в обоих случаях спектр представляет собой одну доминирующую «плазмонную» линию, как и при $N = 8$, содержащую в себе более 90% суммы сил осцилляторов. При появлении потенциального барьера также наблюдается фрагментация резонансной линии на две компоненты, причем перераспределение сил осцилляторов между ними в процентном соотношении зависит от высоты барьера. Результаты расчетов с учетом полного базиса по-прежнему оказались близкими к результатам, полученным с учетом только двух основных переходов: $5g \rightarrow 6h$ и $5g \rightarrow 5f$. Некоторое наблюдаемое различие между ними свидетельствует о влиянии вкладов других одночастичных каналов, что обусловлено более сложной электронной структурой системы, по сравнению с ситуацией при $N = 8$. Качественное сходство расчетов в рамках этих двух моделей также сохраняется во всем диапазоне изменения высоты барьера U , что свидетельствует о преобладающем влиянии многочастичных

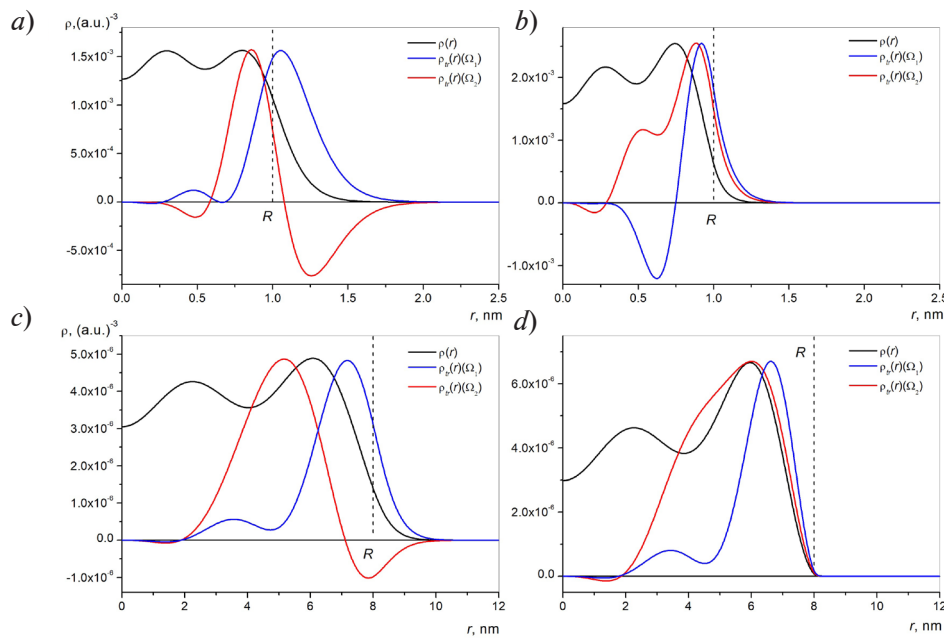


Рис. 2. Распределения электронной плотности основного состояния квантовых точек CdS с $N = 58$ электронах с радиусами нанокристаллов $R = 1$ нм (a, b) и $R = 8$ нм (c, d) при значениях высоты потенциального барьера $U = 0$ эВ (a, c) и $U = 8$ эВ (b, d).

Также показаны радиальные распределения плотности дипольных переходов, соответствующие спектральным линиям RPAХ с частотами Ω_1 и Ω_2

границы раздела, что позволяет характеризовать данное возбужденное состояние как дипольный поверхностный плазмон, линия которого доминирует в спектре, составляя более 90% сил осцилляторов. Колебания с частотой Ω_2 , радиальная плотность которых, как и при $N = 8$, в значительной степени распределена по объему системы, при $U = 0$ эВ практически не возбуждаются (о чем свидетельствуют графики на рис. 1).

При возникновении потенциального барьера на границе наночастицы, в спектре ее дипольных возбуждений также наблюдаются две основные линии с частотами Ω_1 и Ω_2 , но соотношение их сил осцилляторов оказывается различным для систем разного размера. В случае системы меньшего радиуса, $R = 1$ нм, происходит существенное перераспределение вкладов одночастичных каналов в коллективные моды, что, как будет показано ниже, приведет к разделению резонансных дипольных колебаний электронной плотности на две моды с преимущественно трансляционным и преимущественно вращательным характером движения. При этом характер колебаний с частотой Ω_1 претерпевает изменение от гармонической плазмонной моды к режиму размерного квантования, а мода с частотой Ω_2 , спектральный вклад которой начинает преобладать, в свою очередь, проявляет черты, характерные для вращательного плазмона. Напротив, для наночастицы большего размера, с $R = 8$ нм, существенного перераспределения сил осцилляторов между двумя спектральными линиями не происходит. Доминирование возбужденного состояния с частотой Ω_1 сохраняется, но при этом обе моды проявляют свойства плазмонных колебаний, у которых существенный вклад в волновую функцию возбужденного состояния (см. формулу (8) в работе [25]) дают амплитуды «назад-во-времени» $Y_{eh}^{(k)}$.

Проанализируем влияние потенциального барьера на дипольные спектры систем с $N = 58$ более детально.

Возбужденные состояния в нанокристаллах разного радиуса, содержащих 58 свободных носителей

Нанокристаллы радиуса $R = 1$ нм. На основании графиков на рис. 1, a и 3, a, b можно сделать вывод, что увеличение высоты U потенциального барьера не только приводит к фрагментации резонансной линии на две компоненты, как это было при $N = 8$, но и сопровождается появлением третьего сателлита с частотой Ω_3 при $U \gtrsim 4$ эВ. Сравнение

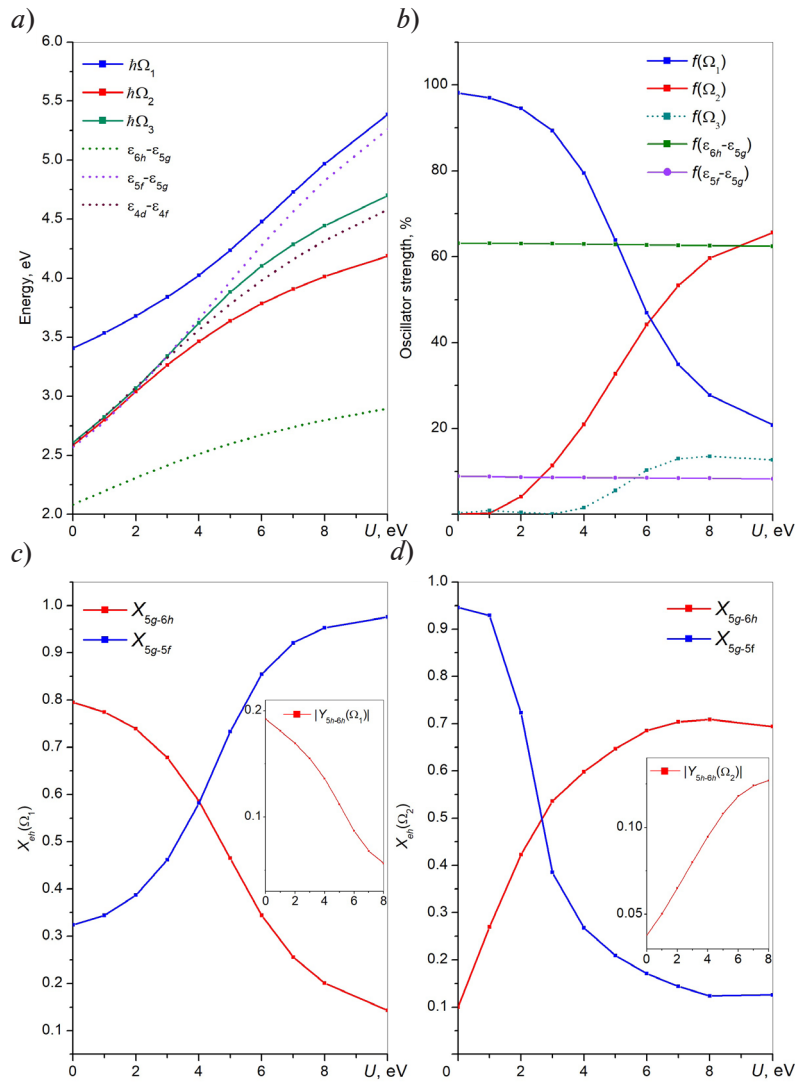


Рис. 3. Зависимости ключевых величин, рассматриваемых в данной работе, квантовых точек CdS с $N = 58$ электронами для нанокристаллов с радиусом $R = 1$ нм от высоты потенциального барьера U : a – зависимости для частот основных коллективных возбуждений и энергий одночастичных переходов; b – для сил осцилляторов; c, d – амплитуд «вперед-во-времени» X_{im} основных одночастичных компонент для возбужденных состояний с частотами Ω_1 (c) и Ω_2 (d).

На вкладках: зависимости для амплитуд «назад-во-времени» Y_{im}

на рис. 3, a разностей энергий одночастичных уровней с частотами дипольных переходов, полученными в приближении случайных фаз, позволяет охарактеризовать возбужденное состояние с частотой перехода Ω_3 как одночастичное возбуждение в канале $4d \rightarrow 4f$, которое не является какой-либо компонентой плазмонного резонанса. Между двумя другими модами с частотой Ω_1 , которая при $U = 0$ эВ содержала почти 100% сил осцилляторов, и частотой Ω_2 , которая в спектре свободной наночастицы практически отсутствовала, происходит перераспределение спектральных вкладов, подобно тому, как это наблюдалось для системы с $N = 8$; причем таким образом, что при $U \approx 6$ эВ начинает доминировать линия с более низкой частотой перехода. Эта тенденция также сопровождается перераспределением вкладов одночастичных каналов между коллективными возбуждениями. При $U = 0$ эВ доминирующая мода представляла собой колебание электронной плотности плазмонного характера с преобладанием канала $5g \rightarrow 6h$, о чем также свидетельствует представленный на вкладке график зависимости соответствующей амплитуды «назад-во-времени» $Y_{5g-6h}^{(1)}$. Далее при увеличении высоты барьера начинает возрастать вклад канала $5g \rightarrow 5f$, который при $U \approx 4$ эВ становится преобладающим. Причем, как следует

из данных на рис. 3, *a*, частота Ω_1 практически сравнивается с частотой одночастичного перехода в этом канале, что позволяет сделать вывод о переходе моды «1» из возбуждения плазмонного типа в слабо коррелированный режим размерного квантования в дипольном переходе $5g \rightarrow 5f$. Для линии «2» ситуация меняется противоположным образом, как это происходило и при значении $N = 8$. Ее сила осциллятора возрастает до значения примерно 66% правила сумм, что соответствует возбуждению только угловых степеней свободы. Этот процесс (см. рис. 3, *d*) сопровождается перераспределением вкладов одночастичных каналов с тенденцией к преобладанию компоненты $5g \rightarrow 6h$ и заметным возрастанием ее амплитуды $Y_{5g-6h}^{(1)}$. При этом частота одночастичного перехода в этом канале на рис. 3, *a* существенно отличается от частот коллективных мод во всем диапазоне изменения U , что свидетельствует о значительных электронно-дырочных корреляциях между уровнями $5g$ и $6h$.

Таким образом, возбужденное состояние с частотой Ω_2 приобретает признаки вращательной плазмонной моды по мере возрастания высоты барьера. Также следует отметить, что при сравнении результатов расчетов, учитывающих полный базис и проведенных в рамках модели двух переходов (силы осцилляторов для этой модели показаны на рис. 1, *a* пунктирными линиями), наблюдается их заметное расхождение, в особенности для спектральной компоненты, преобладающей при данном значении U . Это свидетельствует о том, что по мере увеличения числа частиц в системе вклады других одночастичных дипольных переходов также начинают оказывать влияние на формирование спектра ее возбужденных состояний, при сохранении общей тенденции преобладания вкладов двух основных каналов.

Нанокристаллы радиуса $R = 8$ нм. В случае системы с достаточно большим радиусом $R = 8$ нм ситуация оказывается принципиально иной, причем наблюдаются существенные отличия и от тенденций, которые были выявлены для случая $N = 8$. Во-первых,

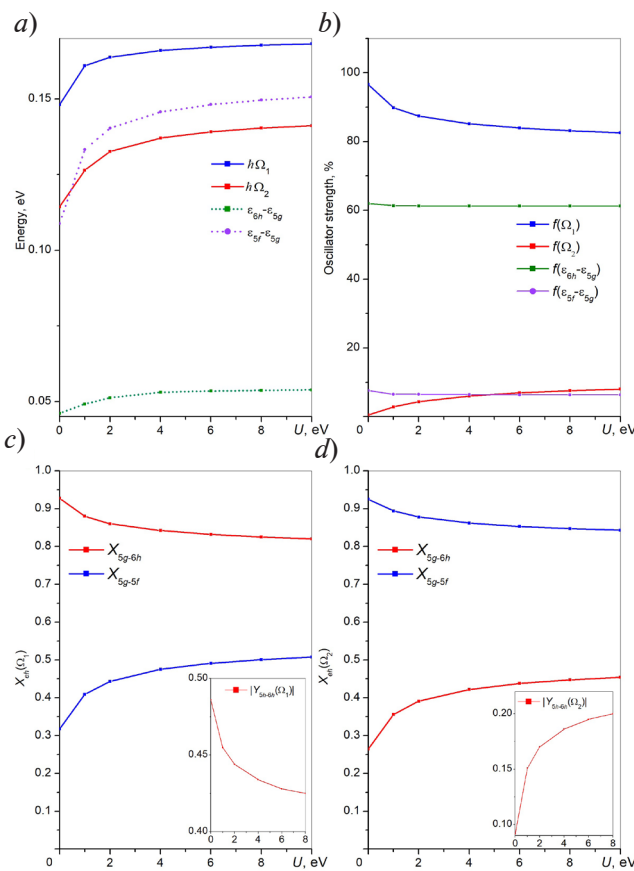


Рис. 4. Зависимости, аналогичные приведенным на рис. 3, но для радиуса нанокристалла $R = 8$ нм

(см. рис. 1, *b* и 4), с ростом значения U не происходит перераспределения сил осцилляторов между двумя модами, так что сохраняется доминирование линии, соответствующей частоте Ω_1 . В этом состоит главная разница с обсуждавшимися ранее дипольными спектрами, показанными в статье [25] (см. рис. 5, *b*). При этом, также в отличие от распределения сил осцилляторов для $N = 8$, изображенного на рис. 6, в рассматриваемом случае не происходит существенного перераспределения вкладов одночастичных каналов внутри коллективных состояний с частотами Ω_1 и Ω_2 . Несмотря на то, что в каждой из мод (см. рис. 4, *c*, *d*) присутствуют обе одночастичные компоненты, в каждое из возбужденных состояний с частотами переходов Ω_1 и Ω_2 дают основной вклад, соответственно, каналы $5g \rightarrow 6h$ и $5g \rightarrow 5f$. При этом в обеих модах наблюдается высокая степень корреляций в основном состоянии; об этом свидетельствует поведение кривых для значений амплитуд «назад-во-время» (см. вклады на рис. 4), которые для более коррелированного канала $5g \rightarrow 6h$ имеют заметные значения во всем диапазоне изменения U . В особенности это касается линии «1», доминирующей в спектре.

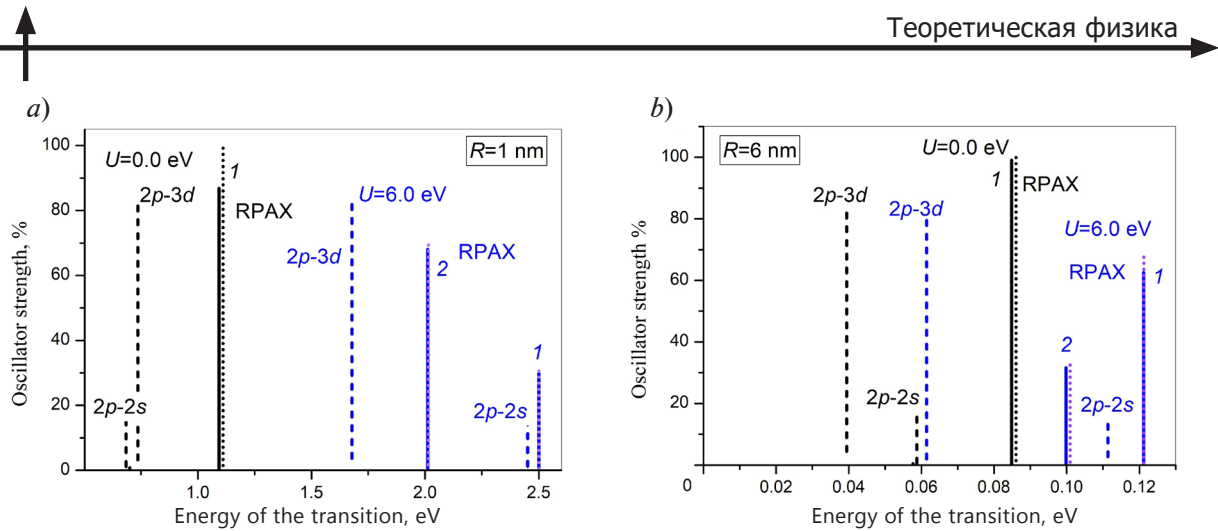


Рис. 5 [25]. Распределение сил осцилляторов для квантовых точек CdS, аналогичное приведенному на рис. 1, но для случая $N = 8$ электронов и для радиусов нанокристалла $R = 1$ нм (a) и $R = 6$ нм (b)

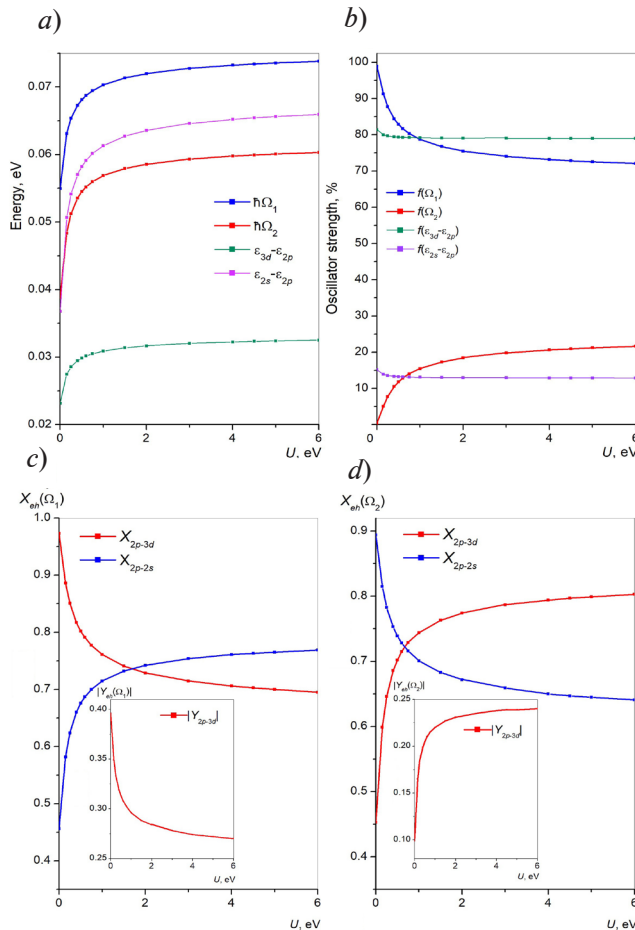


Рис. 6 [25]. Зависимости, аналогичные приведенным на рис. 3 и 4, но для случая $N = 8$ и радиуса нанокристалла $R = 8$ нм

Таким образом, несмотря на наличие потенциального барьера на границе системы, колебания электронной плотности с частотой Ω_1 по своему характеру представляют собой гармонические плазмонные колебания. К такому же выводу можно прийти, если сравнить результаты расчета с полным базисом со спектрами, рассчитанными в рамках двухканальной модели (см. пунктирные линии на рис. 1). Несмотря на некоторое различие в положениях плазмонной линии, ее доминирующий характер сохраняется в обоих случаях.

Таким образом, в отличие от ситуации с $N = 8$, увеличение числа свободных электронов приводит к тому, что не происходит перехода от плазмонных колебаний в режим размерного квантования ни для одной из мод; это объясняется преобладанием межчастичных корреляций в системе над взаимодействием с потенциальным барьером. Об определяющей роли корреляционных взаимодействий свидетельствует также кардинальное отличие частот коллективных колебаний от разностей энергий одночастичных уровней во взаимодействующих дипольных каналах (см. рис. 4, a).

Заключение

В работе представлены результаты теоретического исследования спектров возбужденных состояний полупроводниковых нанокристаллов с объемным типом легирования, помещенных в диэлектрическую среду. В качестве объекта исследования выбраны кристаллы сульфида кадмия CdS, имеющие различные геометрические размеры и

число делокализованных носителей заряда. При моделировании процессов межчастичного взаимодействия электронов между собой был использован теоретический подход, основанный на использовании локального обменного потенциала Дирака – Слэтера. В результате проведенных численных расчетов было продемонстрировано, что в оптических спектрах нанокристаллов присутствует доминирующая резонансная мода, в формировании которой важную роль играют корреляции между одночастичными каналами дипольных электронно-дырочных переходов. Для описания корреляционных эффектов при формировании волновых функций коллективных возбужденных состояний, в представленной работе применялось приближение случайных фаз с обменом (RPAX). Было показано, что основной вклад в волновую функцию резонансной моды дают два одночастичных канала, соответствующие дипольным переходам из оболочки основного состояния, содержащей наибольшее число частиц.

Проведенные расчеты продемонстрировали хорошее согласие результатов, полученных с учетом полного базиса одночастичных возбуждений и в рамках двухканальной модели для систем разного размера и с разным числом свободных носителей заряда в основном состоянии.

Основной целью работы был анализ влияния потенциального барьера на границе между нанокристаллом и его диэлектрическим окружением на спектральные характеристики наночастиц. Было показано, что практически вне зависимости от размера системы, при отсутствии потенциального барьера, в спектре «свободной» частицы доминирует одна основная линия плазмонного резонанса, при котором происходят гармонические колебания электронной плотности в параболическом потенциале положительно заряженного объемно-легированного остова с равномерным распределением заряда. При этом сила осциллятора плазмонной моды во всех рассмотренных случаях содержит более 90% правила сумм, причем с увеличением как радиуса системы, так и числа носителей заряда, вклад плазмонного резонанса возрастает. Таким образом, в отсутствие потенциального барьера дипольное возбужденное состояние электронной системы с хорошей точностью можно описать как классические гармонические колебания электронной системы как единого целого, в то время как ее внутренние степени свободы остаются замороженными.

Появление разности потенциалов между поверхностью полупроводника и его диэлектрическим окружением, т.е. разности энергий между НОМО-уровнями электронной системы наночастицы и внешней диэлектрической матрицы, приводит к заметным изменениям в спектре дипольных возбуждений системы. При этом характер этих изменений оказывается зависящим от геометрических размеров наночастицы, тогда как число свободных носителей заряда в ней не оказывает принципиального влияния.

Анализ результатов проведенных расчетов показал, что при сравнительно малых размерах нанокристаллов ($R \leq 4$ нм) и появлении потенциального барьера происходит фрагментация резонансной линии на две основные спектральные компоненты. Кроме того, по мере увеличения высоты барьера происходит не только сдвиг резонансной частоты в сторону более высоких значений, но и существенное перераспределение сил осцилляторов между этими модами. При этом колебания, соответствующие изначальной плазмонной линии, переходят в режим размерного квантования, тогда как вновь появившееся состояние, с более низкой частотой, постепенно приобретает свойства вращательной плазмонной моды. Эти процессы также сопровождаются перераспределением вкладов одночастичных каналов между сформировавшимися коллективными возбужденными состояниями, что и определяет характер движения электронов в каждой из дипольных мод.

В случае больших геометрических размеров наночастиц ситуация меняется. Уже при радиусах R наночастиц, лежащих в интервале 6 – 8 нм, или при более высоких значениях этого радиуса, наблюдается тенденция к доминированию спектральной компоненты с частотой Ω_1 , соответствующей плазмонной моде в свободной системе, при том что вклад более низкочастотной компоненты Ω_2 заметно убывает по мере увеличения R . Немаловажно также, что обе моды проявляют характер плазмонных колебаний, о чем свидетельствует заметный вклад амплитуд «назад-во-время» в соответствующие коллективные возбужденные состояния. Более того, если для системы, содержащей сравнительно малое число электронов ($N = 8$), при повышении U наблюдается перераспределение вкладов основных одночастичных каналов между резонансными модами (это соответствовало эффективному



перераспределению между степенями свободы, участвующими в колебательном движении электронов), то уже для случая $N = 58$ ситуация меняется. Для этой системы соотношение между основными одночастичными компонентами в волновых функциях (см. формулу (8) в работе [25]) при возрастании высоты барьера остается практически неизменным и, таким образом, не происходит явного разделения электронных колебаний на трансляционные и вращательные при сохранении их плазмонного характера.

Таким образом, можно прийти к заключению, что спектральные характеристики полупроводниковых нанокристаллов в случае их объемного типа легирования зависят не только от их геометрических размеров и числа электронов в системе, но также от высоты потенциального барьера между поверхностью наночастицы и ее диэлектрическим окружением. Соотношение между этими параметрами определяет положение резонансной линии, доминирующей в спектре дипольных возбуждений, степень ее расщепления на отдельные компоненты, а также переход от классических плазмонных осцилляций к режиму размерного квантования для каждой из них.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Климов В. В.** Наноплазмоника. М.: Физматлит, 2009. 480 с.
2. **Bozhevolniy S. I., Martin-Moreno L., Garcia-Vidal F.** (Eds.) Quantum plasmonics (Springer Series in Solid-State Sciences. Vol. 185). Cham, Switzerland: Springer International Publishing, 2017. 327 p.
3. **Enoch S., Bonod N.** Plasmonics: From basics to advanced topics (Springer Series in Optical Sciences. Vol. 167). Heidelberg, Berlin: Springer-Verlag, 2012. 321 p.
4. **Tame M. S., McEneaney K. R., Özdemir Ş. K., Lee J., Maier S. A., Kim M. S.** Quantum plasmonics // *Nature Physics*. 2013. Vol. 9. June. Pp. 329–340.
5. **Федоров А. В., Рухленко И. Д., Баранов А. В., Кручинин С. Ю.** Оптические свойства полупроводниковых квантовых точек. СПб.: Наука, 2011. 188 с.
6. **Гусев А. И.** Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. М.: Физматлит, 2005. 416 с.
7. **Gaponenko S. V.** Optical properties of semiconductor nanocrystals. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1998. 245 p.
8. **Scholl J. A., Koh A. L., Dionne J. A.** Quantum plasmon resonances of individual metallic nanoparticles // *Nature*. 2012. Vol. 483. 22 March. Pp. 421–427.
9. **Brack M.** The physics of simple metal clusters: Self-consistent jellium model and semiclassical approaches // *Reviews of Modern Physics*. 1993. Vol. 65. No. 3. Pp. 677–732.
10. **Harb M., Rabilloud F., Simon D., Rydlo A., Lecoultré S., Conus F., Rodrigues V., Félix C.** Optical absorption of small silver clusters: Ag_n ($n = 4–22$) // *The Journal of Chemical Physics*. 2008. Vol. 129. No. 19. P. 194108.
11. **Xuan F., Guet C.** Core-polarization-corrected random-phase approximation with exchange for dipole surface plasmons in silver clusters // *Physical Review A*. 2016. Vol. 94. No. 4. P. 043415.
12. **Routzahn A. L., White S. L., Fong L.-K., Jain P. K.** Plasmonics with doped quantum dots // *Israel Journal of Chemistry*. 2012. Vol. 52. No. 11–12. Pp. 983–991.
13. **Luther J. M., Jain P. K., Ewers T., Alivisatos A. P.** Localized surface plasmon resonances arising from free carriers in doped quantum dots // *Nature Materials*. 2011. Vol. 10. May. Pp. 361–366.
14. **Faucheaux J. A., Stanton A. L. D., Jain P. K.** Plasmon resonances of semiconductor nanocrystals: Physical principles and new opportunities // *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2014. Vol. 5. No. 6. Pp. 976–985.
15. **Lounis S. D., Runnerstrom E. L., Bergerud A., Nordlund D., Milloron D. J.** Influence of dopant distribution on the plasmonic properties of indium tin oxide nanocrystals // *Journal of the American Chemical Society*. 2014. Vol. 136. No. 19. Pp. 7110–7116.
16. **Zhang H., Kulkarni V., Prodan E., Nordlander P., Govorov A. O.** Theory of quantum plasmon resonances in doped semiconductor nanocrystals // *The Journal of Physical Chemistry. C*. 2014. Vol. 118. No. 29. Pp. 16035–16042.
17. **Ipatov A. N., Gerchikov L. G., Guet C.** Plasmon resonance in photoabsorption of colloidal highly doped ZnO nanocrystals // *Nanoscale Research Letters*. 2018. Vol. 13. No. 1. P. 297.

18. Герчиков Л. Г., Ипатов А. Н. Вращательная дипольная плазмонная мода в наноразмерных полупроводниковых частицах // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2021. Т. 159. № 6. С. 1047–1069.
19. Ипатов А. Н. Дипольная плазмонная мода в наноразмерных полупроводниковых квантовых точках типа «ядро-оболочка» с гетеропереходом второго рода // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2023. Т. 163. № 6. С. 858–872.
20. Liu X., Swihart M. T. Heavily-doped colloidal semiconductor and metal oxide nanocrystals, an emerging new class of plasmonic nanomaterials // Chemical Society Reviews. 2014. Vol. 43. No. 11. Pp. 3908–3920.
21. Ипатов А. Н., Куприянов Г. А. Плазмонный резонанс в полупроводниковых нанокристаллах селенида кадмия с различным типом легирования // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 2. С. 27–51.
22. Dreizler R. M., Gross E. K. U. Density functional theory: An approach to the quantum many-body problem. Berlin: Springer, 1990. 302 p.
23. Madjet M., Guet G., Johnson W. R. Comparative study of exchange-correlation effects on electron and optical properties of alkali-metal clusters // Physical Review A. 1995. Vol. 51. No. 2. Pp. 1327–1339.
24. Mukherjee D. Applied many-body methods in spectroscopy and electronic structure. New York, USA: Springer, 1992. 299 p.
25. Ипатов А. Н., Куприянов Г. А. Коллективные возбуждения в объемно-легированных полупроводниковых нанокристаллах сульфида кадмия // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 2. С. 144–161.

REFERENCES

1. Klimov V. V., Nanoplasmonics, Jenny Stanford Publishing, New York, 2014.
2. Bozhevolniy S. I., Martin-Moreno L., Garcia-Vidal F. (Eds.), Quantum plasmonics (Springer Series in Solid-State Sciences. Vol. 185), Springer International Publishing, Cham, Switzerland, 2017.
3. Enoch S., Bonod N., Plasmonics: From basics to advanced topics. (Springer Series in Optical Sciences. Vol. 167), Springer-Verlag, Heidelberg, Berlin, 2012.
4. Tame M. S., McEneaney K. R., Özdemir Ş. K., et al., Quantum plasmonics, Nat. Phys. 9 (June) (2013) 329–340.
5. Fedorov A. V., Rukhlenko I. D., Baranov A. V., Kruchinin S. Yu., Optical properties of semiconductor quantum dots, Nauka, Saint-Petersburg, 2011.
6. Gusev A. I., Nanomaterials, nanostructures, and nanotechnologies, Fizmatlit Publishing, Moscow, 2005.
7. Gaponenko S. V., Optical properties of semiconductor nanocrystals, Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
8. Scholl J. A., Koh A. L., Dionne J. A., Quantum plasmon resonances of individual metallic nanoparticles, Nature. 483 (22 March) (2012) 421–427.
9. Brack M., The physics of simple metal clusters: Self-consistent jellium model and semiclassical approaches, Rev. Mod. Phys. 65 (3) (1993) 677–732.
10. Harb M., Rabilloud F., Simon D., et al., Optical absorption of small silver clusters: Ag_n (n = 4–22), J. Chem. Phys. 129 (19) (2008) 194108.
11. Xuan F., Guet C., Core-polarization-corrected random-phase approximation with exchange for dipole surface plasmons in silver clusters, Phys. Rev. A. 94 (4) (2016) 043415.
12. Routzahn A. L., White S. L., Fong L.-K., Jain P. K., Plasmonics with doped quantum dots, Isr. J. Chem. 52 (11–12) (2012) 983–991.
13. Luther J. M., Jain P. K., Ewers T., Alivisatos A. P., Localized surface plasmon resonances arising from free carriers in doped quantum dots, Nat. Mater. 10 (May) (2011) 361–366.
14. Faucheaux J. A., Stanton A. L. D., Jain P. K., Plasmon resonances of semiconductor nanocrystals: Physical principles and new opportunities, J. Phys. Chem. Lett. 5 (6) (2014) 976–985.
15. Lounis S. D., Rønnestrom E. L., Bergerud A., et al., Influence of dopant distribution on the plasmonic properties of indium tin oxide nanocrystals, J. Am. Chem. Soc. 136 (19) (2014) 7110–7116.
16. Zhang H., Kulkarni V., Prodan E., et al., Theory of quantum plasmon resonances in doped semiconductor nanocrystals, J. Phys. Chem. C. 118 (29) (2014) 16035–16042.



17. **Ipatov A. N., Gerchikov L. G., Guet C.**, Plasmon resonance in photoabsorption of colloidal highly doped ZnO nanocrystals, *Nanoscale Res. Lett.* 13 (1) (2018) 297.
18. **Gerchikov L. G., Ipatov A. N.**, Rotational dipole plasmon mode in nanoscale semiconductor particles, *J. Exp. Theor. Phys.* 132 (6) (2021) 922–940.
19. **Ipatov A. N.**, Dipole plasmon mode in nanosize semiconductor core-shell quantum dots with a type II heterojunction, *J. Exp. Theor. Phys.* 136 (6) (2023) 765–777.
20. **Liu X., Swihart M. T.**, Heavily-doped colloidal semiconductor and metal oxide nanocrystals, an emerging new class of plasmonic nanomaterials, *Chem. Soc. Rev.* 43 (11) (2014) 3908–3920.
21. **Ipatov A. N., Kupriianov G. A.**, The plasmon resonance in the cadmium selenide semiconductor nanocrystals with different doping types, *St. Petersburg State Polytechnical University J. Phys. and Math.* 16 (2) (2023) 27–51 (in Russian).
22. **Dreizler R. M., Gross E. K. U.**, Density functional theory: An approach to the quantum many-body problem, Springer, Berlin, 1990.
23. **Madjet M., Guet G., Johnson W. R.**, Comparative study of exchange-correlation effects on electron and optical properties of alkali-metal clusters, *Phys. Rev. A.* 51 (2) (1995) 1327–1339.
24. **Mukherjee D.**, Applied many-body methods in spectroscopy and electronic structure, Springer, NY, 1992.
25. **Ipatov A. N., Kupriianov G. A.**, Collective excitations in bulk-doped semiconductor cadmium sulfide nanocrystals, *St. Petersburg State Polytechnical University J. Phys. and Math.* 18 (2) (2025) 144–161 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ИПАТОВ Андрей Николаевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого и профессор кафедры физики и технологии наногетероструктур Санкт-Петербургского академического университета имени Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
andrei_ipatov@mail.ru
ORCID: 0000-0003-1457-8236

КУПРИЯНОВ Генрих Александрович – ассистент кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
henryweis3@gmail.com
ORCID: 0009-0001-5775-2276

THE AUTHORS

IPATOV Andrei N.

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
Alferov University of RAS*
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
andrei_ipatov@mail.ru
ORCID: 0000-0003-1457-8236

KUPRIANOV Genrikh A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
henryweis3@gmail.com
ORCID: 0009-0001-5775-2276

*Статья поступила в редакцию 08.08.2024. Одобрена после рецензирования 17.10.2025.
Принята 17.10.2025.*

Received 08.08.2024. Approved after reviewing 17.10.2025. Accepted 17.10.2025.

Научная статья

УДК 534-13

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19114>

НЕЛИНЕЙНЫЕ МОДЕЛИ ПОНИЖЕННОГО ПОРЯДКА ДЛЯ КОНТИНУАЛЬНЫХ УПРУГИХ ЭЛЕМЕНТОВ КОНСТРУКЦИЙ

А. В. Лукин [□], И. А. Попов, Н. Д. Пискун, Д. В. Антуфьев

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

[□] lukin_av@spbstu.ru

Аннотация. Рассмотрена проблема синтеза динамических моделей пониженного порядка для континуальных упругих систем в геометрически нелинейной постановке (прежде всего – тонкостенных конструкций) на базе метода конечных элементов. В основе рассматриваемых подходов лежит идея идентификации нелинейной (квадратично-кубической) жесткостной характеристики упругой системы в ее модальных координатах с последующим применением аппарата теории нелинейных нормальных мод и нормальных форм Пуанкаре для построения инвариантного многообразия, касательного к выбранному модальному подпространству. Разработанный алгоритм использован для построения нелинейной модели продольно-изгибных колебаний пролетной балки и ее верификации на базе приближенного аналитического решения методом Галёркина. Обсуждаются особенности программной реализации представленного метода на основе программной системы конечно-элементного анализа ABAQUS.

Ключевые слова: нелинейная теория упругости, нормальная форма Пуанкаре, нелинейное модальное взаимодействие, редуцированная модель

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 24-71-10097; <https://rscf.ru/project/24-71-10097/>.

Для цитирования: Лукин А. В., Попов И. А., Пискун Н. Д., Антуфьев Д. В. Нелинейные модели пониженного порядка для континуальных упругих элементов конструкций // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 170–190. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19114>

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.19114>

NONLINEAR REDUCED ORDER MODELS FOR ELASTIC STRUCTURES

A. V. Lukin [□], I. A. Popov, N. D. Piskun, D. V. Antufiev

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

[□] lukin_av@spbstu.ru

Abstract. The problem of synthesizing the reduced-order dynamic models for continuous elastic systems in a geometrically nonlinear formulation (primarily thin-walled structures) based on the finite element method is considered. The approaches under consideration are based on the idea of identifying the nonlinear (quadratic-cubic) stiffness characteristic of an elastic system in its modal coordinates, followed by the application of the theory of nonlinear normal modes and Poincaré normal forms to construct an invariant manifold tangent to the selected modal subspace. The developed algorithm is used to construct a nonlinear model of



coupled longitudinal-bending vibrations of a clamped-clamped beam and its verification based on an approximate analytical solution by the Galerkin method. The features of the software implementation of the presented method based on the ABAQUS finite element analysis software system are discussed.

Keywords: nonlinear theory of elasticity, Poincaré normal form, nonlinear modal interaction, reduced-order model

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 24-71-10097), <https://rscf.ru/project/24-71-10097/>.

For citation: Lukin A. V., Popov I. A., Piskun N. D., Antufiev D. V., Nonlinear reduced order models for elastic structures, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (1) (2026) 170–190. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.19114>

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

Введение

Актуальной задачей механики деформируемого твердого тела и динамики машин на современном этапе является разработка эффективных численных методов моделирования динамических режимов работы сооружений, конструкций, приборов и их элементов в геометрически нелинейной постановке и с учетом связанности физических полей различной природы (термо-, электро-, магнито-, аэро-, гидроупругость и пр.). Ключевыми требованиями к создаваемым математическим моделям становятся противоречащие друг другу (на первый взгляд) характеристики: с одной стороны, это высокая степень подробности модели, ее адекватности реальным геометрическим и физико-механическим параметрам системы и условиям ее нагружения; с другой стороны, это компактность численной модели, ее применимость для проведения вычислений в реальном времени и с учетом вариативности как параметров внешнего нагружения, так и параметров, описывающих саму систему. Модель также должна быть адаптирована к использованию в задачах проектирования систем автоматического управления движением, а также съема и обработки полезных сигналов.

В современной научной литературе модели, обладающие указанными свойствами, называются моделями пониженного порядка (*англ.* Reduced-Order Models (ROM)), или редуцированными моделями [1 – 3]. Вопросам разработки, верификации и практического применения численных методов синтеза таких моделей для различных физико-математических постановок и промышленных приложений посвящено значительное число научных работ (см., например, статьи [4 – 7]). Отмечается¹, что автоматизированные алгоритмы создания моделей пониженного порядка представляют собой ключевую технологию в рамках разработки цифрового двойника изделия [8].

В настоящей работе рассматривается проблема синтеза динамических моделей пониженного порядка для континуальных упругих систем в геометрически нелинейной постановке (прежде всего, тонкостенных конструкций: струн, мембран, балок, пластинок и оболочек) на базе метода конечных элементов.

В основе рассматриваемых подходов лежит концепция идентификации нелинейной (квадратично-кубической) жесткостной характеристики упругой системы в ее модальных координатах, с последующим применением аппарата теории нелинейных нормальных мод и нормальных форм Пуанкаре для построения инвариантного многообразия, относящегося к изучаемому модальному подпространству.

Целью настоящей работы является построение модели пониженного порядка, точно описывающей нелинейную динамику полной системы при заданном пространственном распределении внешнего воздействия и его спектральном составе.

¹ ГОСТ Р 57700.37–2021 «Компьютерные модели и моделирование. Цифровые двойники изделий. Общие положения».

В работе представлены результаты применения метода к построению нелинейной модели продольно-изгибных колебаний пролетной балки и ее верификации на базе приближенного аналитического решения методом Галёркина. Обсуждаются особенности программной реализации представленного метода на основе программной системы конечно-элементного анализа ABAQUS.

Постановка задачи

Уравнения эластодинамики трехмерного упругого тела в геометрически точной лагранжевой постановке имеют вид [8]:

$$\frac{\partial}{\partial X_k} (F_{ij} S_{jk}) + \rho_0 b_i^0 = \rho_0 \ddot{u}_i \text{ для } X \in \Omega_0, i = 1, 2, 3, \quad (1)$$

где Ω_0 – область трехмерного пространства, занимаемая телом в своей отсчетной конфигурации; \mathbf{u} – вектор перемещений материальных точек упругого тела, $\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X}$ (\mathbf{x} , \mathbf{X} – радиусы-векторы точек тела в актуальной и отсчетной конфигурациях соответственно); ρ_0 – массовая плотность материала; b_0 – объемная плотность приложенных сил.

Компоненты тензора градиента деформации определяются выражениями

$$F_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial X_j} = \delta_{ij} + \frac{\partial u_i}{\partial X_j}, \quad (2)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера.

Определяющее соотношение для анизотропного линейно-упругого материала имеет вид

$$S_{ij} = C_{ijkl} E_{kl} \quad (3)$$

где S_{ij} – компоненты тензора напряжений Пиолы – Кирхгофа; C_{ijkl} – компоненты тензора упругих модулей 4-го ранга; E_{kl} – компоненты тензора деформации Коши – Грина.

Компоненты E_{kl} выражаются через градиент деформации следующим образом:

$$E_{ij} = \frac{1}{2} (F_{ki} F_{kj} - \delta_{ij}). \quad (4)$$

Уравнения (1) дополняются граничными условиями

$$F_{ij} S_{jk} n_k^0 = t_i^0 \text{ для } \mathbf{X} \in \partial\Omega_0', \quad (5)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 \text{ для } \mathbf{X} \in \partial\Omega_0''.$$

Здесь $\partial\Omega_0'$, $\partial\Omega_0''$ – части границы тела $\partial\Omega_0$, на которой заданы внешние поверхностные усилия \mathbf{t}_0 и перемещения \mathbf{u}_0 , соответственно; \mathbf{n}^0 – нормаль к поверхности тела.

Все указанные величины рассматриваются по отношению к отсчетной конфигурации.

Путем применения проекционных или вариационно-сеточных методов вычислительной механики (методы Галёркина, Ритца; метод конечных элементов и др.) уравнения (1) – (5) приводятся к виду следующей системы нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}} + \mathbf{C}\dot{\mathbf{U}} + \mathbf{K}\mathbf{U} + \mathbf{\Gamma}(\mathbf{U}) = \mathbf{F}(t), \quad (6)$$

где $\mathbf{U} = [U_1, U_2, \dots, U_N]^T$ – конечномерный вектор обобщенных координат дискретизированной модели (модальных координат в случае применения метода Галёркина; узловых перемещений для метода конечных элементов); \mathbf{M} , \mathbf{K} – матрицы масс и жесткостей; $\mathbf{\Gamma}(\mathbf{U})$ – вектор нелинейных восстанавливающих сил, обусловленных учетом квадратичных компонент в тензоре деформации (4); $\mathbf{F}(t)$ – вектор обобщенных сил.

В уравнениях (6) также учтены малые силы линейного вязкого трения по модели Рэлея; матрица диссипации \mathbf{C} имеет вид

$$\mathbf{C} = \alpha\mathbf{M} + \beta\mathbf{K}, \quad (7)$$

где α , β – параметры демпфирования Рэлея.



Отметим, что в рамках рассматриваемой геометрически точной постановки вектор нелинейных внутренних усилий Γ имеет следующую структуру:

$$\Gamma(\mathbf{U}) = \mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{U}) + \mathbf{H}(\mathbf{U}, \mathbf{U}, \mathbf{U}), \quad (8)$$

где \mathbf{G} , \mathbf{H} – билинейная и трилинейная векторные формы по обобщенным координатам \mathbf{U} :

$$\mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{U}) = \sum_{r=1}^N \sum_{s=1}^N \mathbf{G}_{rs} U_r U_s, \quad \mathbf{H}(\mathbf{U}, \mathbf{U}, \mathbf{U}) = \sum_{r=1}^N \sum_{s=1}^N \sum_{t=1}^N \mathbf{H}_{rst} U_r U_s U_t. \quad (9)$$

В выражениях (9) \mathbf{G}_{rs} , \mathbf{H}_{rst} представляют собой векторы коэффициентов соответствующих мономов второй и третьей степени в уравнениях (6).

На основе формулировки поставленной задачи повторим, что целью настоящей работы является построение модели пониженного порядка $n \ll N$, точно описывающей нелинейную динамику полной системы (6) при заданном пространственном распределении внешнего воздействия и его спектральном составе.

В связи с заявленной целью представим искомое поле перемещений \mathbf{U} в виде разложения по ограниченному числу модальных координат $\mathbf{q} = [q_1, q_2, \dots, q_n]^T$:

$$\mathbf{U} = \Phi \mathbf{q}, \quad (10)$$

где $\Phi = [\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n]$ – матрица, составленная из учтенных собственных векторов линейной части системы (6).

В модальном базисе система дифференциальных уравнений примет вид

$$\tilde{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{q}} + \tilde{\mathbf{C}}\dot{\mathbf{q}} + \tilde{\mathbf{K}}\mathbf{q} + \gamma(\mathbf{q}) = \tilde{\mathbf{F}}, \quad (11)$$

где с учетом нормировки собственных форм φ_r по массе

$$\tilde{\mathbf{M}} = \Phi^T \mathbf{M} \Phi = \mathbf{I}, \quad \tilde{\mathbf{C}} = \Phi^T \mathbf{C} \Phi = \text{diag}[2\xi_r \omega_r], \quad \tilde{\mathbf{K}} = \Phi^T \mathbf{K} \Phi = \text{diag}[\omega_r^2]. \quad (12)$$

В выражениях (12) ω_r – собственные частоты недемпфированной системы; ξ_r – коэффициенты относительного модального затухания, $\xi_r = (1/2)(\beta\omega_r + \alpha/\omega_r)$.

По аналогии с выражениями (8), (9), нелинейную жесткостную характеристику в модальном базисе $\gamma(\mathbf{q})$ можно представить в виде

$$\gamma(\mathbf{q}) = \mathbf{g}(\mathbf{q}, \mathbf{q}) + \mathbf{h}(\mathbf{q}, \mathbf{q}, \mathbf{q}), \quad (13)$$

где

$$\mathbf{g}(\mathbf{q}, \mathbf{q}) = \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n \mathbf{g}_{rs} q_r q_s, \quad \mathbf{h}(\mathbf{q}, \mathbf{q}, \mathbf{q}) = \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n \sum_{t=1}^n \mathbf{h}_{rst} q_r q_s q_t. \quad (14)$$

В дальнейшем для определенности будем считать, что дискретизация континуальной задачи выполнена с применением метода конечных элементов.

Разработка численной процедуры определения векторов коэффициентов

$$\mathbf{g}_{rs} = \{g_{rs}^l\}_{l=1}^n, \quad \mathbf{h}_{rst} = \{h_{rst}^l\}_{l=1}^n$$

на базе произвольной расчетной модели вида (6), с применением встроенного функционала выбранного программного комплекса конечно-элементного анализа, позволит синтезировать и применять при анализе динамики системы редуцированные нелинейные модели вида (11).

Процедура идентификации нелинейной жесткостной характеристики

В настоящей работе для решения задачи определения коэффициентов нелинейной жесткости в модальном базисе применяется алгоритм STEP (*англ.* Stiffness Evaluation Procedure), предложенный в статье [9]. Подробный обзор различных подходов к решению поставленной проблемы приведен в статьях [10, 11]. Программная реализация алгоритма STEP выполнена авторами настоящей работы на базе конечно-элементной системы ABAQUS.

Для идентификации значений коэффициентов $\{g_{rs}^l\}_{l=1}^n, \{h_{rst}^l\}_{l=1}^n$ нелинейной жесткостной характеристики

$$\gamma_l(q_1, q_2, \dots, q_n) = \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n g_{rs}^l q_r q_s + \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n \sum_{t=1}^n h_{rst}^l q_r q_s q_t, \quad l = 1, 2, \dots, n \quad (15)$$

конечно-элементной модели, описываемой уравнениями (6), последовательно сообщается ряд заданных статических полей перемещений по рассматриваемым собственным формам. Представим соответствующий алгоритм.

Первый шаг процедуры. Выполняется статический расчет напряженно-деформированного состояния конструкции в геометрически линейной и нелинейной постановках при заданных полях перемещений вида

$$\mathbf{U}_c = \pm \phi_r q_r, \quad r = 1, 2, \dots, n.$$

Величины модальных амплитуд q_r при этом выбираются исходя из ожидаемого размаха перемещений конструкции в реальных условиях ее нагружения. Результатом расчетов являются векторы сил реакций в узлах конечно-элементной сетки в линейной (\mathbf{F}_L) и нелинейной (\mathbf{F}_r) постановках, причем

$$\mathbf{F}_T = \mathbf{F}_L + \mathbf{F}_{NL} = \mathbf{K}\mathbf{U}_c + \mathbf{\Gamma}(\mathbf{U}_c). \quad (16)$$

Это позволяет вычислить нелинейную часть упругой восстанавливающей силы по формуле

$$\mathbf{F}_{NL} = \mathbf{\Gamma}(\mathbf{U}_c) = \mathbf{F}_T - \mathbf{F}_L. \quad (17)$$

Проецирование нелинейной компоненты сил реакций \mathbf{F}_{NL} на рассматриваемое модальное подпространство и учет структуры выражений (15) позволяют записать системы линейных алгебраических уравнений для нахождения коэффициентов

$$g_{rr}^l, h_{rrr}^l, \quad l = 1, 2, \dots, n$$

последовательно для всех $r = 1, 2, \dots, n$:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{F}}_{NL_1} &= \mathbf{\Phi}^T \mathbf{F}_{NL_1} = \mathbf{\Phi}^T \mathbf{\Gamma}(\pm \phi_r q_r) = [g_{rr}^l] q_r q_r + [h_{rrr}^l] q_r q_r q_r, \\ \tilde{\mathbf{F}}_{NL_2} &= \mathbf{\Phi}^T \mathbf{F}_{NL_2} = \mathbf{\Phi}^T \mathbf{\Gamma}(\pm \phi_r q_r) = [g_{rr}^l] q_r q_r + [h_{rrr}^l] q_r q_r q_r. \end{aligned} \quad (18)$$

Второй шаг процедуры. Аналогичные вычисления выполняются для определения коэффициентов g_{rs}^l, h_{rrs}^l и h_{rss}^l путем сообщения конструкции перемещений по комбинациям собственных форм вида

$$\mathbf{U}_c = +\phi_r q_r + \phi_s q_s, \quad \mathbf{U}_c = -\phi_r q_r - \phi_s q_s, \quad \mathbf{U}_c = +\phi_r q_r - \phi_s q_s. \quad (19)$$

Третий шаг процедуры. Для вычисления коэффициентов расчеты проводятся при задании системе смещений по суперпозиции каждой трех собственных форм с номерами r, s, t :

$$\mathbf{U}_c = +\phi_r q_r + \phi_s q_s + \phi_t q_t. \quad (20)$$

Описанная процедура, в принципе, позволяет вычислить коэффициенты нелинейной характеристики (15) для любого числа n собственных форм колебаний, учитываемых в модели пониженного порядка. При этом число искомым компонент линейных форм силовой характеристики составляет n^3 для $\mathbf{g}(\mathbf{q}, \mathbf{q})$ и n^4 для $\mathbf{h}(\mathbf{q}, \mathbf{q}, \mathbf{q})$, что приводит к стремительному росту числа расчетов в рамках процедуры STEP с повышением значения n . В то же время, в практических приложениях число рабочих форм колебаний, по которым развивается динамика конструкции, как правило, невелико, что делает STEP чрезвычайно эффективным алгоритмом вычисления нелинейной восстанавливающей силы в модальном базисе. Вопросам дальнейшего повышения вычислительной эффективности алгоритма STEP при высоких значениях n посвящена статья [12].



Особенности нелинейных модальных взаимодействий в упругих системах

Следует подчеркнуть, что изложенная выше процедура идентификации нелинейной силовой характеристики в модальном базисе, в общем случае, не приводит к построению требуемой модели пониженного порядка. Как будет показано далее, это обусловлено существенными нелинейными межмодальными взаимодействиями, которые связывают между собой движения системы по низшим (конструкционным) и высшим (объемным) формам колебаний. Наличие таких взаимодействий не позволяет осуществить классическую для линейной теории колебаний модальную редукцию – отбрасывание (принятие равными нулю тождественно) всех обобщенных модальных координат, кроме так называемых «главных», соответствующих частотному составу и пространственному распределению внешних воздействий.

Рассмотрим этот вопрос подробнее на примере достаточно общего класса тонких плоских упругих конструкций (струн, прямолинейных балок, плоских мембран и пластин), базируясь на работах [13, 14].

Выделим в общей форме уравнений нелинейных колебаний упругой системы, записанных в модальном базисе вида

$$\ddot{q}_l + 2\xi_l \omega_l \dot{q}_l + \omega_l^2 q_l + \sum_{r,s=1}^n g_{rs}^l q_r q_s + \sum_{r,s,t=1}^n h_{rst}^l q_r q_s q_t = Q_l, \quad l = 1, 2, \dots, n, \quad (21)$$

две группы обобщенных координат:

$$\mathbf{q} = [\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_{n_b}, p_{n_b+1}, p_{n_b+2}, \dots, p_n]^T$$

где η_r – набор модальных координат, соответствующих низкочастотным изгибным формам колебаний конструкции ($r = 1, 2, \dots, n_b$); p_s – все остальные модальные координаты, соответствующие неизгибным высокочастотным формам колебаний ($s = n_b + 1, n_b + 2, \dots, n$); к этим формам относятся стержневые и объемные формы колебаний балок и пр.

В данном случае крутильные формы колебаний рассматриваться не будут. Будем считать, что внешнее воздействие является низкочастотным и ориентированным преимущественно по нормали к срединной поверхности конструкции. В таком случае будем считать, что $Q_s \equiv 0$ для $s = n_b + 1, n_b + 2, \dots, n$. Как следствие, динамика системы будет развиваться в первую очередь по низшим изгибным формам колебаний.

В связи с этим будет выполняться следующее соотношение между порядками модальных амплитуд, типичное для тонкостенных конструкций:

$$\eta_r = O(\varepsilon) \text{ для } r = 1, 2, \dots, n_b; \quad p_s = O(\varepsilon^2) \text{ для } s = n_b + 1, n_b + 2, \dots, n.$$

Здесь ε – малый параметр, значение которого соответствует величинам смещений, соизмеримых с толщиной конструкции.

Кроме того, учтем, что для любой пары изгибных координат с номерами i, j квадратичные коэффициенты $g_{ij}^r = 0$ в силу симметричности упругой восстанавливающей силы. С учетом этих допущений систему уравнений (21) можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \ddot{\eta}_r + 2\xi_r \omega_r \dot{\eta}_r + \omega_r^2 \eta_r + \sum_{i=1}^{n_b} \sum_{j=n_b+1}^n g_{ij}^r \eta_i p_j + \sum_{i,j,k=1}^n h_{ijk}^r \eta_i \eta_j \eta_k + O(\varepsilon^4) = Q_r, \quad r = 1, 2, \dots, n_b, \\ \ddot{p}_s + 2\xi_s \omega_s \dot{p}_s + \omega_s^2 p_s + \sum_{i,j=1}^{n_b} g_{ij}^s \eta_i \eta_j + O(\varepsilon^3) = 0, \quad s = n_b + 1, n_b + 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (22)$$

Структура уравнений указывает на присутствие квадратичной связанности изгибных и высших форм колебаний. Это препятствует простому пренебрежению координатами p_s при редукции полной системы к подпространству нижних рабочих форм колебаний η_r .

В то же время, вторую группу уравнений (22) в рамках сделанных предположений можно разрешить квазистатически:

$$p_s \cong - \sum_{i,j=1}^{n_b} \frac{g_{ij}^s}{\omega_s^2} \eta_i \eta_j, \quad s = n_b + 1, n_b + 2, \dots, n. \quad (23)$$

После подстановки p_s в первое из уравнений (22) это приводит к корректной (как асимптотически, так и механически) нелинейной модели пониженного порядка для изгибных форм колебаний конструкции:

$$\ddot{\eta}_r + 2\xi_r \omega_r \dot{\eta}_r + \omega_r^2 \eta_r + \sum_{i,j,k=1}^n \Gamma_{ijk}^r \eta_i \eta_j \eta_k + O(\varepsilon^4) = Q_r, \quad r = 1, 2, \dots, n_b, \quad (24)$$

где истинные коэффициенты нелинейной жесткости Γ_{ijk}^r учитывают как собственную нелинейность данной формы колебаний, так и ее нелинейную квазистатическую связанность с высшими формами.

Для краткости изложения приведем здесь явные выражения лишь для «диагональных» коэффициентов кубической нелинейности Γ_{iii}^r [13, 14]:

$$\Gamma_{iii}^r = h_{iii}^r - \sum_{s=n_b+1}^n \frac{g_{is}^r g_{ii}^s}{\omega_s^2}, \quad i, r = 1, 2, \dots, n_b. \quad (25)$$

Конкретный числовой анализ показывает, что в общем случае различие между значениями коэффициентов h_{ijk}^r и Γ_{ijk}^r оказывается существенным [13, 14]. Это отражает факт сильного межмодального взаимодействия в задачах геометрически нелинейной теории упругости, причем резонансные соотношения между частотами соответствующих мод не имеют здесь особого значения: обсуждаемый эффект является чисто кинематическим и обусловлен характером распределения поля конечных деформаций по объему конструкции.

Из изложенного следует вывод о необходимости вычислять при синтезе моделей пониженного порядка как сами высшие формы линейных колебаний системы, так и всех коэффициентов нелинейной жесткостной характеристики в модальном базисе. Численная реализация такой задачи для подробных конечно-элементных моделей реальных конструкций практически неосуществима: даже решение задачи на собственные значения, с вычислением полного спектра частот системы с $n \gg 1000$ степеней свободы, будет чрезвычайно трудоемким, не говоря уже о применении процедур типа STER для вычисления нелинейных жесткостных коэффициентов в полном модальном базисе. Кроме того, рассмотренная выше декомпозиция форм свободных колебаний на изгибные и остальные является, в известной степени, условной и непосредственно относится лишь к случаю низкочастотных возбуждений плоских тонкостенных конструкций. В связи с этим, возникает задача разработки и программной реализации достаточно универсальных и вычислительно эффективных алгоритмов создания моделей пониженного порядка по числу рабочих форм колебаний конструкции с разрешением их квазистатической связанности с вторичными собственными формами.

Как будет показано в следующем разделе, отмеченные принципиальные трудности можно преодолеть путем применения аппарата теории нелинейных нормальных мод и нормальных форм Пуанкаре.

Нормальная форма Пуанкаре как модель пониженного порядка

Отмеченная выше существенная нелинейная связанность уравнений системы в модальном базисе (21), с точки зрения теории динамических систем [15], выражает особенности топологической структуры ее пространства состояний, а именно — отличие геометрии инвариантных подмногообразий от геометрии линейных подпространств, натянутых на соответствующие наборы собственных векторов системы, линеаризованной в окрестности положения равновесия $\mathbf{q} = 0$. Подробное обсуждение этих вопросов приведено в работах [16, 11]; здесь же отметим лишь ключевые положения общей теории, важные для практических приложений.

Для консервативной системы в нерезонансном случае А. М. Ляпунов показал, что каждой паре комплексно-сопряженных собственных значений $\{\pm i\omega_j\}$ соответствует инвариантное многообразие, плотно заполненное периодическими орбитами и касательное к линейному подпространству соответствующих собственных векторов (так называемое



ляпуновское центральное подмногообразие (LCSM) [17]). Топологическое понятие LCSM идентично механическому понятию нелинейной нормальной моды (NNM) – изолированного семейства периодических орбит, выходящего за границы малой окрестности особой точки динамической системы [18]. В работах С. У. Шоу и К. Пьера показано [19], что в неконсервативном случае систем вибрационного типа, со слабой диссипацией, нелинейные нормальные моды также образуют инвариантные подмногообразия, касательные к линейным подпространствам. Проблема неединственности таких подмногообразий рассматривается в работе [20], где предложен алгоритм аналитического построения наиболее гладких (так называемых спектральных) подмногообразий.

Задача сведения исходной динамической системы к своему инвариантному подмногообразию решается с применением теории нормальных форм Пуанкаре [21, 22], основным результатом которой является процедура нахождения наиболее простой формы, к которой можно привести систему нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений в окрестности положения равновесия или периодического движения. Построение нормальных форм широко используется в теории бифуркаций при сведении системы к своему центральному многообразию и дальнейшей классификации негиперболических особых точек или предельных циклов [21].

В контексте задач нелинейной динамики конструкций теория нормальных форм Пуанкаре выступает как метод вычисления нелинейных нормальных мод колебательной системы, как эффективный алгоритм синтеза редуцированной модели (модели пониженного порядка).

Следуя статье [23], последовательно рассмотрим процесс построения нормальной формы для нелинейной динамической системы, записанной в модальном и исходном узловом базисах, оставив за рамками изложения фактор возможного наличия внутренних резонансов между формами колебаний системы.

В первом случае формально примем, что с помощью процедур типа STEP был предварительно совершен переход к модальным координатам для всех N степеней свободы механической системы. Для простоты изложения не будем учитывать силы диссипации и внешние нагрузки на конструкцию. Тогда уравнения (11) примут следующий вид:

$$\ddot{q}_l + \omega_l^2 q_l + \sum_{r,s=1}^N g_{rs}^l q_r q_s + \sum_{r,s,t=1}^N h_{rst}^l q_r q_s q_t = 0, \quad l = 1, 2, \dots, N. \quad (26)$$

Обозначим вектор обобщенных скоростей $\mathbf{v} \equiv \dot{\mathbf{q}}$ и поставим задачу нахождения такой замены координат

$$\{q_i, v_i\}_{i=1}^N \rightarrow \{R_j, S_j \equiv \dot{R}_j\}_{j=1}^n, \quad n \ll N,$$

которая осуществляет переход к нормальной форме Пуанкаре по выбранным n нелинейным нормальным модам.

Можно показать, что общий вид этой замены в разложении до третьего порядка (включительно) таков:

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= \sum_{i=1}^n \mathbf{e}_i R_i + \sum_{i,j=1}^n \mathbf{a}_{ij} R_i R_j + \sum_{i,j=1}^n \mathbf{b}_{ij} S_i S_j + \sum_{i,j,k=1}^n \mathbf{r}_{ijk} R_i R_j R_k + \sum_{i,j,k=1}^n \mathbf{u}_{ijk} R_i R_j R_k, \\ \mathbf{v} &= \sum_{i=1}^n \mathbf{e}_i S_i + \sum_{i,j=1}^n \boldsymbol{\gamma}_{ij} R_i S_j + \sum_{i,j,k=1}^n \boldsymbol{\mu}_{ijk} S_i S_j S_k + \sum_{i,j,k=1}^n \mathbf{v}_{ijk} S_i R_j R_k, \end{aligned} \quad (27)$$

где \mathbf{e}_i – вектор, i -компонента которого равна единице, а все остальные – нулю; \mathbf{a}_{ij} , \mathbf{b}_{ij} , \mathbf{r}_{ijk} , \mathbf{u}_{ijk} , $\boldsymbol{\gamma}_{ijk}$, $\boldsymbol{\mu}_{ijk}$, \mathbf{v}_{ijk} – искомые векторы коэффициентов нелинейной замены переменных.

Как следует из выражений (27), в модальном представлении переход к нормальной форме осуществляется квазигождественной заменой координат, что отражает свойство касательности инвариантного подмногообразия к соответствующему линейному подпространству.

Подстановка замены (27) в уравнения (26) и решение задачи о минимизации количества ненулевых нелинейных коэффициентов для динамической системы в новых (криволинейных) координатах $\{R_i, S_j\}$ (решение когомологических уравнений второго и третьего

приближений [23]) позволяет определить как все коэффициенты замены (27), так и итоговый вид дифференциальных уравнений, описывающих динамику выбранных n нелинейных нормальных мод:

$$\begin{aligned} \ddot{R}_r + \omega_r^2 R_r + (A_{rrr}^r + h_{rrr}^r) R_r^3 + B_{rrr}^r R_r \dot{R}_r^2 + R_r \sum_{j \neq r}^n (A_{jrr}^r + A_{rjj}^r + A_{rjj}^r + 3h_{rjj}^r) R_j^2 + \\ + R_r \sum_{j \neq r}^n B_{rjj}^r \dot{R}_j^2 + \dot{R}_r \sum_{j \neq r}^n (B_{jrr}^r + B_{rjj}^r) R_j \dot{R}_j = 0, \quad r = 1, 2, \dots, n, \end{aligned} \quad (28)$$

где коэффициенты

$$\mathbf{A}_{ijk} = \sum_{s=1}^N 2\mathbf{g}_{is} a_{jk}^s, \quad \mathbf{B}_{ijk} = \sum_{s=1}^N 2\mathbf{g}_{is} b_{jk}^s \quad (29)$$

вычисляются через параметры нелинейной модальной характеристики $g(q, q)$ и коэффициенты замены координат (27) a_{ij}^s, b_{ij}^s . Явные выражения для последних здесь не приводятся для краткости изложения [23, 24].

В отношении полученных уравнений в нормальной форме (28) необходимо подчеркнуть, что они асимптотически точно описывают подмножества фазового пространства исходной системы высокой размерности (26), а именно – инвариантные центральные подмногообразия полной динамической системы. Это позволяет назвать систему в нормальной форме корректной моделью пониженного порядка, учитывающей все нелинейные межмодальные взаимодействия, свойственные исходной системе. Вторым важным следствием подхода с построением нормальной формы является отсутствие в системе (28) так называемых нелинейных членов, нарушающих инвариантность: в каждое r -е уравнение (28) координаты R_j ($j \neq r$) входят лишь в произведении с R_r или \dot{R}_r , что является аналогией с расщеплением системы на набор независимых линейных осцилляторов в линейном случае и также обосновывает возможность редукции динамической системы к малому числу нелинейных нормальных мод, соответствующих частотному составу и пространственному распределению внешних воздействий.

В то же время, из выражений (29) следует, что вычисление истинных параметров нелинейной упругой характеристики механической системы по n главным координатам требует знания коэффициентов билинейной формы $\mathbf{g}(\mathbf{q}, \mathbf{q})$ по всем N линейным формам колебаний. Это является обобщением на случай упругих тел произвольной геометрии ранее отмеченного факта связанности изгибных и остальных форм колебаний в случае плоских тонких конструкций (см. выражения (25)). В свою очередь, это обстоятельство ограничивает практическую реализуемость процедуры вычисления нелинейной нормальной формы в модальном базисе для упругой конструкции лишь в случае достаточно малого с вычислительной точки зрения полного числа степеней свободы N .

В ранее цитированной работе [23] предложен вычислительно эффективный алгоритм синтеза нормальной формы (модели пониженного порядка), не требующий вычисления как высших форм колебаний, так и коэффициентов их нелинейной связанности с выбранными главными формами – так называемый метод прямой нормальной формы (англ. Direct Normal Form (DNF)). Основная идея такого подхода состоит в построении нормальной формы на основе не модального базиса (11), а исходного конечно-элементного представления системы в узловых перемещениях (6).

Рассмотрим свободные нелинейные колебания системы в отсутствие затухания:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}} + \mathbf{K}\mathbf{U} + \mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{U}) + \mathbf{H}(\mathbf{U}, \mathbf{U}, \mathbf{U}) = 0. \quad (30)$$

Переход к нормальной форме осуществляется заменой переменных

$$\mathbf{U} = \sum_{i=1}^n \phi_i R_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \bar{\mathbf{a}}_{ij} R_i R_j + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \bar{\mathbf{b}}_{ij} S_i S_j, \quad \mathbf{V} \equiv \dot{\mathbf{U}} = \sum_{i=1}^n \phi_i S_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \bar{\boldsymbol{\gamma}}_{ij} R_i S_j, \quad (31)$$

где $\bar{\mathbf{a}}_{ij}, \bar{\mathbf{b}}_{ij}, \bar{\boldsymbol{\gamma}}_{ij}$ – векторы коэффициентов, подлежащие определению.

Здесь, для краткости изложения, в отличие от случая работы в модальном базисе, выражения перехода записаны во втором, а не третьем, приближении.

Как отмечено выше, цель рассматриваемого подхода – построение нормальной формы для $n \ll N$ без необходимости вычисления высших, вторичных форм колебаний и соответствующих им компонент нелинейной восстанавливающей силы. В работе [23] показано, что задача нахождения коэффициентов нелинейной замены координат (31) имеет следующее решение:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{a}}_{ij} &= \frac{1}{2}(\bar{\mathbf{Z}}\mathbf{d}_{ij} + \bar{\mathbf{Z}}\mathbf{s}_{ij}), \quad \mathbf{b}_{ij} = \frac{1}{2\omega_i\omega_j}(\bar{\mathbf{Z}}\mathbf{d}_{ij} - \bar{\mathbf{Z}}\mathbf{s}_{ij}), \\ \gamma_{ij} &= \frac{\omega_j - \omega_i}{\omega_j}\bar{\mathbf{Z}}\mathbf{d}_{ij} + \frac{\omega_j + \omega_i}{\omega_j}\bar{\mathbf{Z}}\mathbf{s}_{ij}, \end{aligned} \quad (32)$$

где

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{Z}}\mathbf{s}_{ij} &= \left[(+\omega_i + \omega_j)^2 \mathbf{M} - \mathbf{K} \right]^{-1} \mathbf{G}(\phi_i, \phi_j), \\ \bar{\mathbf{Z}}\mathbf{d}_{ij} &= \left[(-\omega_i + \omega_j)^2 \mathbf{M} - \mathbf{K} \right]^{-1} \mathbf{G}(\phi_i, \phi_j). \end{aligned} \quad (33)$$

В отношении метода вычисления векторов $\bar{\mathbf{Z}}\mathbf{s}_{ij}, \bar{\mathbf{Z}}\mathbf{d}_{ij}$ прежде всего отметим, что векторы квадратичных компонент узловых сил реакции $\mathbf{G}(\phi_i, \phi_j)$, входящие в правую часть, есть результат ранее описанной процедуры идентификации нелинейной жесткости STER. Необходимость работы с полноразмерными матрицами масс и жесткостей КЭ-модели, следующая из выражений (33), в практической реализации не представляет трудностей, так как может выполняться посредством вычислительно эффективных численных алгоритмов используемой программной системы КЭ-анализа. В частности, вместо вычисления обратных матриц размерности N , входящих в правые части выражений (33), можно формально поставить задачу статического нагружения силами $\mathbf{G}(\phi_i, \phi_j)$ некоторой «механической» системы с соответствующей матрицей жесткости

$$\left[(\pm\omega_i + \omega_j)^2 \mathbf{M} - \mathbf{K} \right].$$

Также отметим, что из выражений (33) следует вырожденность получаемых соотношений в случае внутреннего резонанса второго порядка, т.е. в случае

$$\pm\omega_i + \omega_j \cong \omega_k$$

для некоторых $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$ и $k \in \{1, 2, \dots, N\}$.

Здесь нумерация собственных частот такова, что первые n частот из них есть главные; для них и происходит вычисление нормальной формы Пуанкаре.

Динамика нелинейных нормальных мод во втором приближении, в рамках подхода DNF, описывается уравнениями вида

$$\ddot{R}_r + \omega_r^2 R_r + \sum_{i,j,k=1}^n \left[(A_{ijk}^r + h_{ijk}^r) R_i R_j R_k + B_{ijk}^r R_i \dot{R}_j \dot{R}_k \right] = 0, \quad r = 1, 2, \dots, n \quad (34)$$

где

$$\bar{\mathbf{A}}_{ijk} = 2\mathbf{G}(\phi_i, \bar{\mathbf{a}}_{jk}), \quad \mathbf{A}_{ijk} = \Phi^T \bar{\mathbf{A}}_{ijk}, \quad \bar{\mathbf{B}}_{ijk} = 2\mathbf{G}(\phi_i, \bar{\mathbf{b}}_{jk}), \quad \mathbf{B}_{ijk} = \Phi^T \bar{\mathbf{B}}_{ijk}. \quad (35)$$

Существенно, что в отличие от построения нормальной формы в модальном базисе, вычисление коэффициентов $\mathbf{A}_{ijk}, \mathbf{B}_{ijk}$ по формулам (35) требует знания лишь главных форм колебаний, а также проведения дополнительного этапа процедуры STER на расширенном пространстве базисных векторов $\{\phi_i, \bar{\mathbf{a}}_{jk}\}_{i,j,k=1}^n$.

Изложенный численный алгоритм построения прямой нормальной формы был реализован авторами настоящей работы на базе программной системы КЭ-анализа ABAQUS с применением языков программирования Python и Matlab. Далее представлены

результаты верификации алгоритма на основе приближенного аналитического решения модельной задачи об изгибных колебаниях балки, защемленной с двух концов.

Пролетная балка: модель продольно-изгибных колебаний

В рамках механической модели Бернулли – Эйлера для балки постоянного сечения, связанные продольно-изгибные колебания малой, но конечной амплитуды описываются следующей системой нелинейных уравнений в частных производных [25]:

$$\begin{aligned} m\ddot{u} - EAu'' &= EA\left(\frac{1}{2}v'^2 - u'v'^2\right)' + EI\left[v'(v'' - u''v' - 2u''v'' - 3u'v''')\right]', \\ m\ddot{v} - j_3\ddot{v}'' + EIV^{IV} &= EA\left(u'v' - u'^2v' + \frac{1}{2}v'^3\right)' + \\ &+ EI\left[u'v'' + (u'v')'' - (u'^2 - v'^2)v'' - u'(u'v')'' - \left(u'^2v' - \frac{1}{3}v'^3\right)''\right]' + F, \end{aligned} \quad (36)$$

где $u(x, t)$, $v(x, t)$ – продольная и поперечная компоненты вектора перемещений; m , A – погонная масса и площадь сечения; E – модуль Юнга материала; I , j_3 – геометрический и массовый моменты инерции сечения; штрихом и точкой обозначены производные по продольной координате x и времени t , соответственно.

Принято, что внешние нагрузки действуют на балку только в поперечном направлении и имеют распределение $F(x, t)$.

В предположении о малости амплитуд продольных перемещений, по сравнению с поперечными, т. е. $u = O(v^2)$, и тонкости стержня $h \ll L$ (h – толщина стержня, т.е. высота сечения в плоскости изгиба, L – длина стержня) можно пренебречь силами инерции сечения на поворот и записать упрощенную асимптотически корректную модель системы:

$$\begin{aligned} m\ddot{v} + EIV^{IV} - EA\left[u'v' + \frac{1}{2}v'^3\right] &= F(x, t), \\ m\ddot{u} - EA(u'' + v'v'') &= 0. \end{aligned} \quad (37)$$

Перейдем к безразмерным величинам и параметрам:

$$\begin{aligned} \bar{v} &= \frac{v}{h}, \quad \bar{x} = \frac{x}{L}, \quad \bar{u} = \frac{L}{h^2}u, \quad \bar{t} = \frac{t}{T_0}, \quad T_0 = L^2\sqrt{\frac{m}{EI}}, \\ f(\bar{x}, \bar{t}) &= \frac{L^4}{EI(h)}F(L\bar{x}, T_0\bar{t}), \quad \beta = \frac{Ah^2}{I}, \quad \mu = \frac{1}{AL^2}. \end{aligned} \quad (38)$$

Затем получим уравнения в безразмерном виде:

$$\ddot{v} + v^{IV} - \beta\left[u'v' + \frac{1}{2}v'^3\right]' = f(x, t), \quad \mu\ddot{u} - (u'' + v'v'') = 0. \quad (39)$$

Здесь опущена черта в обозначениях безразмерных величин; точкой и штрихом отмечены производные по безразмерному времени и продольной координате.

Далее выполним модальную дискретизацию континуальной системы методом Галёркина. Функции поперечных и продольных перемещений представляются в виде рядов по собственным формам колебаний:

$$v(x, t) = \sum_{r=1}^{n_b} \Phi_r(x)\eta_r(t), \quad u(x, t) = \sum_{s=n_b+1}^n \Psi_s(x)p_s(t). \quad (40)$$

Формы свободных изгибных и продольных колебаний балки (стержня), защемленной с двух концов, имеют следующий вид:



$$\Phi_r(x) = A_r \begin{bmatrix} (\sin \alpha_r - \sinh \alpha_r)(\cos \alpha_r x - \cosh \alpha_r x) - \\ -(\cos \alpha_r - \cosh \alpha_r)(\sin \alpha_r x - \sinh \alpha_r x) \end{bmatrix}, \quad (41)$$

$$\Psi_s(x) = B_s \sin(s\pi x),$$

где α_r являются корнями трансцендентного уравнения

$$\cos(\alpha_r) \cdot \cosh(\alpha_r) - 1 = 0, \quad (42)$$

а амплитудные множители A_r , B_s определяются из условия нормировки собственных функций по модальной массе:

$$\int_0^1 \Phi_r^2 dx = \int_0^1 \Psi_s^2 dx = 1. \quad (43)$$

Подставив ряды (40) в уравнения (39) и записав условия минимизации невязки, приходим к системе нелинейных дифференциальных уравнений в модальных координатах:

$$\ddot{\eta}_r + \omega_r^2 \eta_r + \sum_{i=1}^{n_b} \sum_{j=n_b+1}^n g_{ij}^r \eta_i p_j + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n h_{ijk}^r \eta_i \eta_j \eta_k = Q_r, \quad r = 1, 2, \dots, n_b, \quad (44)$$

$$\ddot{p}_s + \omega_s^2 p_s + \sum_{i=1}^{n_b} \sum_{j=1}^{n_b} g_{ij}^s \eta_i \eta_j = 0, \quad s = n_b + 1, n_b + 2, \dots, n,$$

где модальные нагрузки

$$Q_r(t) = \int_0^1 \Phi_r(x) F(x, t) dx, \quad \omega_r = \alpha_r^2, \quad \omega_s = \mu^{-0.5} \pi s,$$

а квадратичные и кубические коэффициенты жесткости имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} g_{ij}^r &= -\beta \int_0^1 (\Psi_r \Phi'_i)' \Phi_r dx, \quad r = 1, 2, \dots, n_b, \\ h_{ijk}^r &= -\frac{\beta}{2} \int_0^1 (\Phi'_i \Phi'_j \Phi'_k)' \Phi_r dx, \quad r = 1, 2, \dots, n_b, \\ g_{ij}^s &= -\frac{1}{\mu} \int_0^1 \Psi_s \Phi'_i \Phi''_j dx, \quad s = n_b + 1, n_b + 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (45)$$

Следуя общей теории, изложенной в первой части статьи, отметим, что модель (44) представляет собой конкретный пример тонкостенной упругой системы с существенной нелинейной связанностью между изгибными и продольными формами колебаний (см. уравнения (22)). Численную идентификацию коэффициентов мультилинейных форм \mathbf{g} и \mathbf{h} можно выполнить с помощью процедуры STEP, что позволяет верифицировать разработанный алгоритм определения нелинейной жесткостной характеристики путем сопоставления результатов с аналитическими выражениями для этих коэффициентов.

Далее представлены результаты такой верификации в случае редукции континуальной системы к трем нижним изгибным формам. В качестве примера рассмотрена балка длиной 1 м, шириной 50 мм и толщиной 1 мм, изготовленная из стали с модулем Юнга, равным 210 ГПа и объемной плотностью 7800 кг/м³.

Зависимость результатов от величины коэффициента Пуассона ν далее рассматривается отдельно; на первом этапе, в целях прямого сопоставления численного и аналитического решений принималось значение $\nu = 0$. Аналитическое решение было получено на основе моделей продольных колебаний стержня и изгибных колебаний балки Бернулли – Эйлера.

На рис. 1 показаны поля перемещений конструкции, сообщаемых ей кинематически в ходе некоторых из внутренних этапов процедуры STEP.

В табл. 1 и 2 приведены значения коэффициентов трилинейной формы h , полученные аналитически и численно методом STEP в оболочечной (конечный элемент первого порядка S4R программной системы ABAQUS) и объемной (элемент второго порядка C3D20R) конечно-элементных (КЭ) постановках, а также величины относительных

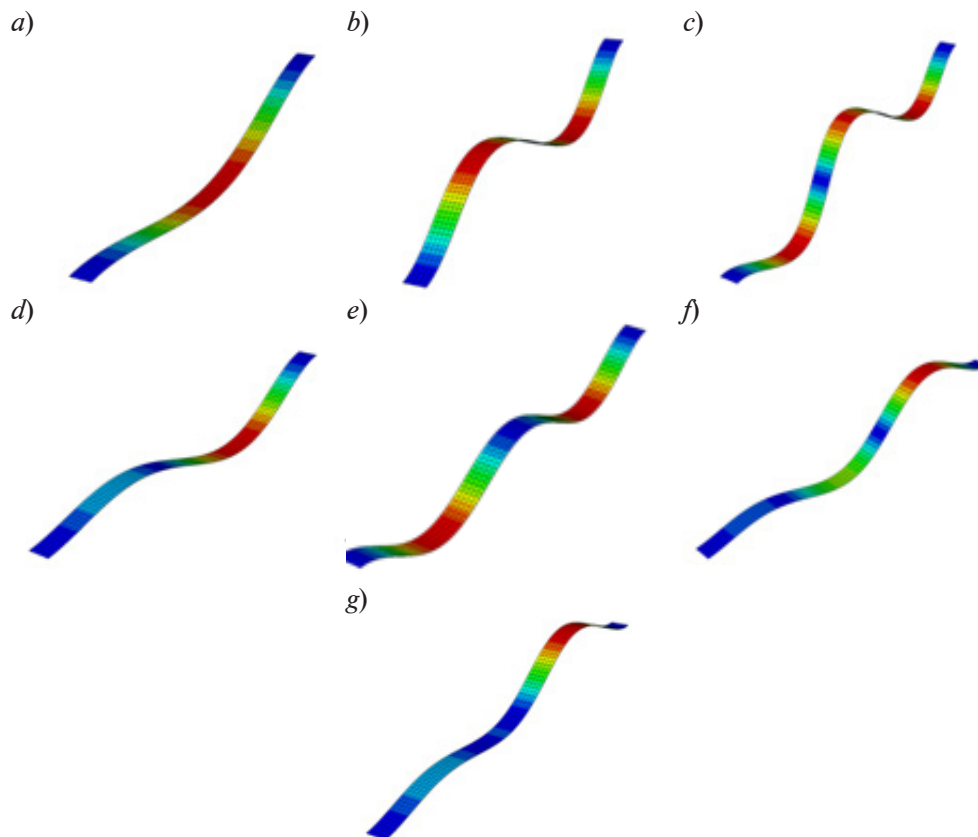


Рис. 1. Сценарии кинематического нагружения конструкции по ее формам колебаний:
 $-\phi_1 q_1$ (a), $-\phi_2 q_2$ (b), $-\phi_3 q_3$ (c), $-\phi_1 q_1 - \phi_2 q_2$ (d), $-\phi_1 q_1 - \phi_3 q_3$ (e),
 $\phi_3 q_3 + \phi_2 q_2$ (f), $\phi_1 q_1 + \phi_3 q_3 + \phi_2 q_2$ (g)

Таблица 1

Коэффициенты трилинейной формы h
(в модальных координатах), полученные аналитически

h_{ijk}	Значение коэффициента		
	Форма 1	Форма 2	Форма 3
h_{111}	1334	–	–936,0
h_{112}	–	2432	–
h_{113}	–935,9	–	7230
h_{122}	2432	–	–248,0
h_{133}	7230	–	–14847
h_{222}	–	21284	–
h_{223}	–248,0	–	23971
h_{132}	–	–248,0	–
h_{333}	–14847	–	95642

Таблица 2

Коэффициенты трилинейной формы h
(в модальных координатах), полученные численно
методом STEP в оболочечной и объемной КЭ-постановках

h_{ijk}	Значения коэффициента и погрешности					
	Форма 1		Форма 2		Форма 3	
	<u>SF</u> $\delta, \%$	<u>BF</u> $\delta, \%$	<u>SF</u> $\delta, \%$	<u>BF</u> $\delta, \%$	<u>SF</u> $\delta, \%$	<u>BF</u> $\delta, \%$
h_{111}	<u>1332</u> 0,1	<u>2645</u> 98,2	–	–	<u>–937,9</u> 0,2	<u>–1852</u> 97,9
h_{112}	–	–	<u>2432</u> 0,01	<u>4821</u> 98,2	–	–
h_{113}	<u>–941,1</u> 0,6	<u>–1857</u> 98,4	–	–	<u>7257</u> 0,3	<u>14333</u> 98,2
h_{122}	<u>2416</u> 0,6	<u>4802</u> 97,4	–	–	<u>–260,5</u> 5,0	<u>–490,9</u> 97,9
h_{133}	<u>7286</u> 0,8	<u>14372</u> 98,8	–	–	<u>–15028</u> 1,2	<u>–29469</u> 98,5
h_{222}	–	–	<u>21217</u> 0,3	<u>42032</u> 97,5	–	–
h_{223}	<u>–260,9</u> 5,2	<u>–490,3</u> 97,7	–	–	<u>23944</u> 0,1	<u>41335</u> 72,4
h_{132}	–	–	<u>–263,1</u> 6,1	<u>–490,6</u> 97,8	–	–
h_{333}	<u>–15088</u> 1,6	<u>–29552</u> 99,1	–	–	<u>96930</u> 1,3	<u>190132</u> 98,8

Обозначения: SF, BF – оболочечная и объемная постановки (англ. Shell & Bulk Formulations) задачи; δ – относительная погрешность в сопоставлении с аналитическими значениями коэффициентов (см. табл. 1).

Примечание. Прочерки в табл. 1 и 2 заменяют пренебрежимо малые значения коэффициентов.

погрешностей в сопоставлении с аналитическими значениями коэффициентов. Прочерки во всех таблицах заменяют пренебрежимо малые значения данных коэффициентов.

Из представленных результатов следует, что численная реализация процедуры STEP в применении к оболочечным конечным элементам характеризуется высокой точностью; наблюдаемые погрешности порядка долей и единиц процентов могут быть вызваны сеточной дискретизацией, с одной стороны, и кинематическими допущениями балочной модели Бернулли – Эйлера, с другой. В то же время расчет в объемной конечно-элементной постановке приводит к завышенным (примерно в два раза) значениям коэффициентов нелинейной жесткости. Это вызвано отмеченной выше существенной деформационной связанностью рассматриваемых нижних изгибных форм колебаний с множеством форм объемного деформирования твердого тела. Подробное обсуждение и теоретическое обоснование этих эффектов приведено в статье [14].

Ключевым соображением здесь выступает следующее: в оболочечной КЭ-постановке модель обладает существенно менее полным спектром собственных частот колебаний, по сравнению с объемной постановкой, в связи с выполнением кинематических гипотез теории оболочек Рейсснера – Миндлина.

Поэтому жесткое кинематическое нагружение конструкции по некоторой форме изгибных колебаний вызывает внутренние силы упругого сопротивления деформированию по меньшему, для оболочечной постановки, числу высших форм колебаний, чем в случае прямого трехмерного моделирования твердого тела.

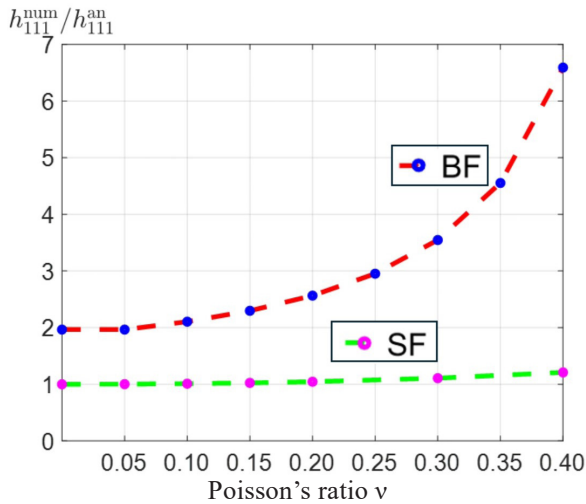


Рис. 2. Отношение кубического коэффициента h_{111}^{num} к своему аналитическому значению h_{111}^{an} при вариации значения коэффициента Пуассона ν для двух постановок

Следует также отметить зависимость коэффициентов нелинейной жесткости от величины коэффициента Пуассона. На рис. 2 показано отношение кубического коэффициента h_{111}^1 к полученному аналитическому значению для оболочечной (Shell) и объемной (Bulk) КЭ-постановок в виде функции от величины ν .

Таким образом, проведена верификация процедуры определения коэффициентов нелинейной восстанавливающей силы в модальном базисе STEP. Как отмечено выше, наличие сильных нелинейных связей нижних изгибных форм колебаний с высокочастотными формами деформирования конструкций как в объемной, так и в оболочечной КЭ-постановках, приводит к медленной сходимости модального разложения при определении нелинейной жесткостной характеристики. Далее выполняется верификация численного алгоритма построения

прямой нормальной формы DNF, позволяющего строить корректные модели пониженного порядка для континуальных упругих систем.

Пролетная балка: учет растяжимости срединной линии

При рассмотрении изгибных колебаний тонких балок, силы инерции в продольном направлении, выражающиеся как $m\ddot{u}$, можно считать пренебрежимо малыми в отсутствие внутренних комбинационных продольно-изгибных резонансов. Это допущение позволяет квазистатически разрешить во втором уравнении (39) продольные перемещения u через поперечные перемещения v :

$$u'' = -\left(\frac{1}{2}v'^2\right)', \quad u = -\frac{1}{2}\int_0^x v'^2 ds + c_1(t)x + c_2(t), \quad (46)$$

что с учетом граничных условий $u(0, t) = u(1, t) = 0$ дает

$$c_2 = 0, \quad c_1 = \frac{1}{2}\int_0^1 v'^2 ds. \quad (47)$$

Подстановка выражений (46) в первое уравнение (39) приводит к интегродифференциальному уравнению изгибных колебаний пролетной балки с учетом фактора растяжимости срединной линии:

$$\ddot{v} + v^{IV} = \frac{\beta}{2}\left(\int_0^1 v'^2 dx\right) \cdot v'' + f(x, t). \quad (48)$$

Используем модальную дискретизацию методом Галёркина. Функции поперечных перемещений представляются в виде ряда по собственным формам колебаний (см. первое уравнение (41)):

$$v(x, t) = \sum_{i=1}^{n_b} \Phi_i(x)\eta_i(t). \quad (49)$$

Приходим к системе нелинейных дифференциальных уравнений в модальных координатах:



$$\ddot{\eta}_r + \omega_r^2 \eta_r + \sum_{i=1}^{n_b} \sum_{j=1}^{n_b} \sum_{l=1}^{n_b} \Gamma_{ijl}^r \eta_i \eta_j \eta_l = Q_r, \quad r = 1, 2, \dots, n_b, \quad (50)$$

где

$$\Gamma_{ijk}^r = -\frac{\beta}{2} \int_0^1 \Phi_r \Phi''_i dx \int_0^1 \Phi'_j \Phi'_k dx. \quad (51)$$

Система (50) демонстрирует конкретный пример уравнений типа (24), учитывающих квазистатический вклад деформирования по высшим формам колебаний в нелинейную динамику низкомодовых изгибных колебаний. Как показано выше, такая модель служит аналитическим эталоном для верификации численного алгоритма DNF построения нормальной формы Пуанкаре на базе метода конечных элементов.

Верификация заключается в сопоставлении динамических систем (34) и (50). Существенно, что эти системы описывают нелинейную динамику конструкции в разных обобщенных координатах – нормальных (\mathbf{R}, \mathbf{S}) и модальных (η) соответственно, связь между которыми можно найти путем проецирования общего представления (31) на линейное подпространство рабочих собственных форм Φ :

$$\phi_r^T \mathbf{M} \mathbf{U} \equiv \eta_r = R_r + \phi_r^T \mathbf{M} \sum_{i,j=1}^{n_b} \bar{\mathbf{a}}_{ij} R_i R_j + \phi_r^T \mathbf{M} \sum_{i,j=1}^{n_b} \bar{\mathbf{b}}_{ij} S_i S_j. \quad (52)$$

Подстановка в систему (50) выражений для η_r и $\dot{\eta}_r$ (согласно равенствам (52)) и последующее разрешение полученных дифференциальных уравнений относительно старших производных с помощью разложений нелинейных членов в ряд Тейлора позволяет прийти к уравнениям в нормальных координатах типа (34):

$$\ddot{R}_r + \omega_r^2 R_r + \sum_{i=1}^{n_b} \sum_{j=i}^{n_b} \sum_{k=l}^{n_b} \tilde{\Gamma}_{ijk}^r R_i R_j R_k + \dots = Q_r, \quad r = 1, 2, \dots, n, \quad (53)$$

где для краткости используется верхнедиагональная форма индексации коэффициентов нелинейной восстанавливающей силы; явно выписаны лишь те основные мономы третьей степени, присутствующие в аналитической модели (50).

Таблица 3

Сопоставление значений коэффициентов нелинейной жесткости (в нормальных координатах инвариантного подмногообразия), полученных аналитически и численно методом STEP в объемной КЭ-постановке

Γ_{ijk}	Значения коэффициента и погрешности					
	Форма 1		Форма 2		Форма 3	
	AS	BF(δ ,%)	AS	BF(δ ,%)	AS	BF(δ ,%)
Γ_{111}	908,1	907.6(0,06)	–	–	–718,3	–717,0(0,18)
Γ_{112}	–	–	3399	3397(0,06)	–	–
Γ_{113}	–2155	–2157(0,09)	–	–	8437	8432(0,06)
Γ_{122}	3399	3384(0,44)	–	–	–2689	–2673(0,60)
Γ_{133}	8437	8460(0,27)	–	–	–17324	–17335(0,06)
Γ_{222}	–	–	12724	12670(0,42)	–	–
Γ_{223}	–2689	–2683(0,22)	–	–	27327	27210(0,43)
Γ_{233}	–	–	27327	27391(0,23)	–	–
Γ_{333}	–5775	–5893(2,04)	–	–	58693	58826(0,23)

Обозначения: AS – аналитическое решение (англ. Analytical Solution), BF – объемная постановка задачи (англ. Bulk Formulation); δ – относительная погрешность в сопоставлении с аналитическим значением коэффициента.

Примечание. Прочерки в клетках табл. 3 заменяют пренебрежимо малые значения коэффициентов.

Как следует из данных табл. 3, наблюдается хорошее совпадение аналитических и численных результатов (отклонение в значениях коэффициентов составляет не более 2,1%). Для диагональных коэффициентов нелинейной жесткости Γ_{rr}^r можно заметить их существенное снижение, по сравнению с результатами процедуры STEP (см. табл. 2), что отражает факт сильного межмодального взаимодействия изгибных и объемных форм колебаний. Столь же заметны различия в значениях и внедиагональных коэффициентов. В целом полученные результаты показывают на конкретном примере невозможность прямой редукции упругой системы к своему модальному линейному подпространству при исследовании нелинейной динамики и подтверждают точность и универсальность метода понижения порядка путем сведения многомерной динамической системы (конечно-элементной модели конструкции) к своему инвариантному подмножеству, связанному с рабочими нелинейными нормальными модами.

Нелинейный статический расчет конструкции на внешнее силовое воздействие

Для демонстрации возможностей изложенных методов моделирования был проведен статический расчет рассмотренной тестовой конструкции (тонкой защемленной балки) на равномерно распределенное поперечное силовое воздействие. Расчет проводился классическим методом конечных элементов в ПС ABAQUS в геометрически линейной и нелинейной постановках, а также на основе рассмотренных вариантов синтеза компактных моделей: методом модальной редукции STEP в оболочечной и объемной КЭ-постановках и методом построения прямой нормальной формы DNF на базе модели с объемными конечными элементами.

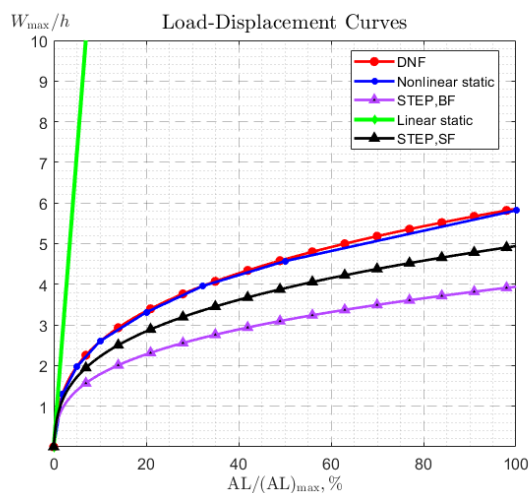


Рис. 3. Диаграммы «нагрузка-перемещение», полученные для тестовой конструкции (тонкой защемленной балки толщиной h) путем различных расчетных подходов (см. пояснения в тексте).

Обозначения: SF, BF – оболочечная и объемная постановки (*англ.* Shell & Bulk Formulations) задачи; DNF – “Direct Normal Form”; STEP – “Stiffness Evaluation Procedure”; Nonlinear & Linear statics – нелинейный и линейный статические расчеты; AL (Applied Load) – приложенная нагрузка

На рис. 3 приведено сравнение кривых «сила-перемещение» для перечисленных расчетных подходов. Прогиб в центральном сечении балки отнесен к ее толщине; амплитуда внешней нагрузки указана в процентах по отношению к своему максимальному значению. Видно, что, для рассмотренного диапазона значений прогиба фактор геометрической нелинейности имеет определяющее значение. При этом нелинейная жесткость конструкции, вычисленная по методу STEP, существенно превышает свою истинную величину (линия “Nonlinear static”). Также явно наблюдается отмеченное ранее различие между оболочечной и объемной постановками при проведении прямой модальной редукции. Метод построения нормальной формы демонстрирует, как и ожидалось, практически полное совпадение с результатом прямого нелинейного конечно-элементного расчета. При этом необходимо отметить вычислительную эффективность построенной модели пониженного порядка: ее размерность в данном случае равна трем, в то время как исходная КЭ-модель имеет 8295 степеней свободы.

Заключение

Таким образом, была разработана и верифицирована методика автоматизированного синтеза динамических моделей пониженного порядка для континуальных упругих систем в геометрически нелинейной постановке на базе метода конечных элементов. В основе рассмотренного подхода лежит идея идентификации нелинейной (квадратично-



кубической) жесткостью характеристики упругой системы в ее модальных координатах с последующим применением аппарата теории нелинейных нормальных мод и нормальных форм Пуанкаре для построения инвариантного многообразия, касательного к выбранному модальному подпространству.

Показано, что получаемая таким образом динамическая модель пониженного порядка учитывает нелинейную упругую связанность рабочих форм колебаний с высокочастотными продольными и объемными модами конструкции, что обеспечивает корректность вычисляемой нелинейной жесткостью характеристики системы по выбранным главным координатам. Разработанный алгоритм был использован для построения нелинейной модели продольно-изгибных колебаний пролетной балки и ее верификации на базе приближенного аналитического решения методом Галёркина.

Продемонстрирована вычислительная эффективность, точность и универсальность реализованного подхода к построению моделей пониженного порядка для упругих конструкций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Benner P., Grivet-Talocia S., Quarteroni A., Rozza G., Schilders W., Silveira L.** (Eds.) Model order reduction. Vol. 1: System- and data-driven methods and algorithms. Berlin, Boston: Walter De Gruyter, 2021. 388 p.
2. In the same edition. Vol. 2: Snapshot-based methods and algorithms. Berlin, Boston: Walter De Gruyter, 2021. 348 p.
3. In the same edition. Vol. 3: Applications. Berlin, Boston: Walter De Gruyter, 2021. 466 p.
4. **Cenedese M., Marconi J., Haller G., Jain S.** Data-assisted non-intrusive model reduction for forced nonlinear finite elements models // *Nonlinear Dynamics*. 2025. Vol. 113. No. 7. Pp. 6465–6489.
5. **Chen W., Henneron T., Clénet S., Delagnes T., Zou J.** Model order reduction of an electro-quasistatic problem using CLN method // *Finite Elements in Analysis and Design*. 2024. Vol. 238. 1 October. P. 104185.
6. **Flament T., Deü J. F., Placzek A., Balmaseda M., Tran D. M.** Reduced-order model of geometrically nonlinear flexible structures for fluid–structure interaction applications // *International Journal of Non-Linear Mechanics*. 2024. Vol. 158. January. P. 104587.
7. **Gazzola C., Zega V., Corigliano A., Lotton P., Melon M.** A reduced-order-model-based equivalent circuit for piezoelectric micro-electro-mechanical-system loudspeakers modeling // *The Journal of the Acoustical Society of America*. 2024. Vol. 155. No. 2. Pp. 1503–1514.
8. **Лурье А. И.** Нелинейная теория упругости. М.: Наука. Главная редакция физико-механической литературы, 1980. 512 с.
9. **Muravyov A. A., Rizzi S. A.** Determination of nonlinear stiffness with application to random vibration of geometrically nonlinear structures // *Computers and Structures*. 2023. Vol. 81. No. 15. Pp. 1513–1523.
10. **Mignolet M. P., Przekop A., Rizzi S. A., Spottswood S. M.** A review of indirect/non-intrusive reduced order modeling of nonlinear geometric structures // *Journal of Sound and Vibration*. 2013. Vol. 332. No. 10. Pp. 2437–2460.
11. **Touzé C., Vizzaccaro A., Thomas O.** Model order reduction methods for geometrically nonlinear structures: a review of nonlinear techniques // *Nonlinear Dynamics*. 2021. Vol. 105. No. 2. Pp. 1141–1190.
12. **Perez R., Wang X. Q., Mignolet M. P.** Nonintrusive structural dynamic reduced order modeling for large deformations: Enhancements for complex structures // *Journal of Computational and Nonlinear Dynamics*. 2014. Vol. 9. No. 3. P. 031008.
13. **Givois A., Grolet A., Thomas O., Deü J. F.** On the frequency response computation of geometrically nonlinear flat structures using reduced-order finite element models // *Nonlinear Dynamics*. 2019. Vol. 97. No. 2. Pp. 1747–1781.
14. **Vizzaccaro A., Givois A., Longobardi P., Shen Y., Deü J. F., Salles L., Touzé C., Thomas O.** Non-intrusive reduced order modelling for the dynamics of geometrically nonlinear flat structures using three-dimensional finite elements // *Computational Mechanics*. 2020. Vol. 66. No. 6. Pp. 1293–1319.

15. **Kuznetsov Y. A.** Elements of applied bifurcation theory. 4th ed. (Book Series: Applied Mathematical Sciences, Vol. 112). Cham, Switzerland: Springer Nature, 2023. p.
16. **Touzé C.** Normal form theory and nonlinear normal modes: Theoretical settings and applications (Chapter) // G. Kerschen (Ed.) Modal analysis of nonlinear mechanical systems (Book Series “CISM International Centre for Mechanical Sciences, Courses and Lectures”, Vol. 555). Vienna: Springer International Publishing, 2014. Pp. 75–160.
17. **Ляпунов А. М.** Общая задача об устойчивости движения. Москва – Ленинград: Гос. изд-во технико-теоретической литературы, 1950. (Серия: Классики естествознания). 472 с.
18. **Vakakis A. F., Rand R. H.** Normal modes and global dynamics of a two-degree-of-freedom non-linear system-I. Low energies // International Journal of Non-Linear Mechanics. 1992. Vol. 27. No. 5. Pp. 861–874.
19. **Shaw S. W., Pierre C.** Non-linear normal modes and invariant manifolds // Journal of Sound and Vibration. 1991. Vol. 150. No. 1. Pp. 170–173.
20. **Haller G., Ponsioen S.** Nonlinear normal modes and spectral submanifolds: existence, uniqueness and use in model reduction // Nonlinear Dynamics. 2016. Vol. 86. No. 3. Pp. 1493–1534.
21. **Арнольд В. И.** Геометрические методы в теории обыкновенных дифференциальных уравнений. 2-е изд. М.: Ижевская республиканская типография, 2000. 400 с.
22. **Nayfeh A. H.** The method of normal forms. 2nd ed. Berlin: Wiley-VCH, 2011. 330 p.
23. **Vizzaccaro A., Shen Y., Salles L., Blahoš J., Touzé C.** Direct computation of nonlinear mapping via normal form for reduced-order models of finite element nonlinear structures // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2021. Vol. 384. 1 October. P. 113957.
24. **Touzé C., Thomas O., Chaigne A.** Hardening/softening behaviour in non-linear oscillations of structural systems using non-linear normal modes // Journal of Sound and Vibration. 2004. Vol. 273. No. 1–2. Pp. 77–101.
25. **Nayfeh A. H., Pai P. F.** Linear and nonlinear structural mechanics. New York: John Wiley & Sons, Inc. 2004. 763 p.

REFERENCES

1. **Benner P., Grivet-Talocia S., Quarteroni A., et al.** (Eds.), Model order reduction. Vol. 1: System- and data-driven methods and algorithms, Walter De Gruyter, Berlin, Boston, 2021.
2. In the same edition: Vol. 2: Snapshot-based methods and algorithms. Walter De Gruyter, Berlin, Boston, 2021.
3. In the same edition: Vol. 3: Applications. Walter De Gruyter, Berlin, Boston, 2021.
4. **Cenedese M., Marconi J., Haller G., Jain S.,** Data-assisted non-intrusive model reduction for forced nonlinear finite elements models, Nonlinear Dyn. 113 (7) (2025) 6465–6489.
5. **Chen W., Henneron T., Clénet S., et al.,** Model order reduction of an electro-quasistatic problem using CLN method, Finite Elem. Anal. Des. 238 (1 Oct) (2024) 104185.
6. **Flament T., Deü J. F., Placzek A., et al.,** Reduced-order model of geometrically nonlinear flexible structures for fluid–structure interaction applications, Int. J. NonLin. Mech. 158 (Jan) (2024) 104587.
7. **Gazzola C., Zega V., Corigliano A., et al.,** A reduced-order-model-based equivalent circuit for piezoelectric micro-electro-mechanical-system loudspeakers modeling, J. Acoust. Soc. Am. 155 (2) (2024) 1503–1514.
8. **Lurie A. I.,** Nonlinear theory of elasticity (North-Holland Ser. in Applied Mathematics and Mechanics, Vol. 36), Elsevier Science Publishers, Amsterdam, New York, Oxford, Tokyo, 1990.
9. **Muravyov A. A., Rizzi S. A.,** Determination of nonlinear stiffness with application to random vibration of geometrically nonlinear structures, Comput. Struct. 81 (15) (2023) 1513–1523.
10. **Mignolet M. P., Przekop A., Rizzi S. A., Spottswood S. M.,** A review of indirect/non-intrusive reduced order modeling of nonlinear geometric structures, J. Sound Vib. 332 (10) (2013) 2437–2460.
11. **Touzé C., Vizzaccaro A., Thomas O.,** Model order reduction methods for geometrically nonlinear structures: a review of nonlinear techniques, Nonlinear Dyn. 105 (2) (2021) 1141–1190.
12. **Perez R., Wang X. Q., Mignolet M. P.,** Nonintrusive structural dynamic reduced order modeling for large deformations: Enhancements for complex structures, J. Comput. Nonlinear. Dyn. 9 (3) (2014) 031008.



13. Givois A., Grolet A., Thomas O., Deü J. F., On the frequency response computation of geometrically nonlinear flat structures using reduced-order finite element models, *Nonlinear Dyn.* 97 (2) (2019) 1747–1781.
14. Vizzaccaro A., Givois A., Longobardi P., et al., Non-intrusive reduced order modelling for the dynamics of geometrically nonlinear flat structures using three-dimensional finite elements, *Comput. Mech.* 66 (6) (2020) 1293–1319.
15. Kuznetsov Y. A., *Elements of applied bifurcation theory*, 4th ed. (Book Ser.: Applied Mathematical Sciences, Vol. 112). Springer Nature, Cham, Switzerland, 2023.
16. Touzé C. Normal form theory and nonlinear normal modes: Theoretical settings and applications (Chapter), In book: G. Kerschen (Ed.), *Modal analysis of nonlinear mechanical systems* (Book Ser. “CISM International Centre for Mechanical Sciences, Courses and Lectures”, Vol. 555). Springer International Publishing, Vienna (2014) 75–160.
17. Lyapunov A. M., *The general problem of the stability of motion*, Taylor & Francis, London, Washington, DC, 1992.
18. Vakakis A. F., Rand R. H., Normal modes and global dynamics of a two-degree-of-freedom non-linear system-I. Low energies, *Int. J. Non-Linear Mech.* 27 (5) (1992) 861–874.
19. Shaw S. W., Pierre C., Non-linear normal modes and invariant manifolds, *J. Sound Vib.* 150 (1) (1991) 170–173.
20. Haller G., Ponsioen S., Nonlinear normal modes and spectral submanifolds: existence, uniqueness and use in model reduction, *Nonlinear Dyn.* 86 (3) (2016) 1493–1534.
21. Arnold V. I., *Geometrical methods in the theory of ordinary differential equations*, 2-nd ed., New York: Springer-Verlag, 1988.
22. Nayfeh A. H., *The method of normal forms*. 2nd ed., Wiley-VCH, Berlin, 2011.
23. Vizzaccaro A., Shen Y., Salles L., et al., Direct computation of nonlinear mapping via normal form for reduced-order models of finite element nonlinear structures, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 384 (1 Oct) (2021) 113957.
24. Touzé C., Thomas O., Chaigne A., Hardening/softening behaviour in non-linear oscillations of structural systems using non-linear normal modes, *J. Sound Vib.* 273 (1–2) (2004) 77–101.
25. Nayfeh A. H., Pai P. F., *Linear and nonlinear structural mechanics*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 2004.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛУКИН Алексей Вячеславович – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы механики и процессов управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
lukin_av@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-2016-8612

ПОПОВ Иван Алексеевич – ведущий инженер Высшей школы передовых цифровых технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
popov_ia@spbstu.ru

ПИСКУН Никита Дмитриевич – инженер Высшей школы передовых цифровых технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
piskun_nd@spbstu.ru

АНТУФЬЕВ Денис Викторович – инженер Высшей школы механики и процессов управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

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

antufiev_dv@spbstu.ru

ORCID: 0009-0000-6354-9621

THE AUTHORS

LUKIN Aleksei V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

lukin_av@spbstu.ru

ORCID: 0000-0003-2016-8612

ПОПОВ Иван А.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

popov_ia@spbstu.ru

PISKUN Nikita D.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

piskun_nd@spbstu.ru

ANTUFIEV Denis V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

antufiev_dv@spbstu.ru

ORCID: 0009-0000-6354-9621

*Статья поступила в редакцию 03.06.2025. Одобрена после рецензирования 05.09.2025.
Принята 05.09.2025.*

Received 03.06.2025. Approved after reviewing 05.09.2025. Accepted 05.09.2025.

Научное издание

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

**«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»**

ТОМ 19, № 1, 2026

Учредитель и издатель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор).
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11.12.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор *В. К. Иванов* – председатель ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *А. Э. Фотиади* – зам. председателя ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *В. В. Дубов*
д-р физ.-мат. наук, профессор *П. А. Карасёв*
канд. физ.-мат. наук, доцент *В. М. Капралова*
канд. физ.-мат. наук *О. А. Яцуржинская* – научный редактор, корректор
А. С. Колгатина – переводчик
Н. А. Бушманова – ответственный секретарь

Телефон редакции 8 (812) 552-62-16

Сайт <https://physmath.spbstu.ru/>

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *Н. А. Бушмановой*

Подписано в печать 30.03.2026 г. Дата выхода в свет 30.04.2026 г.

Формат 60x84/8. Печать цифровая.

Усл. печ. л. Тираж 1000. Заказ .

Цена: Бесплатно.

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**.

E-mail: physics@spbstu.ru,

Тел. редакции 8 (812) 552-62-16.

Сайт журнала: <https://physmath.spbstu.ru/>