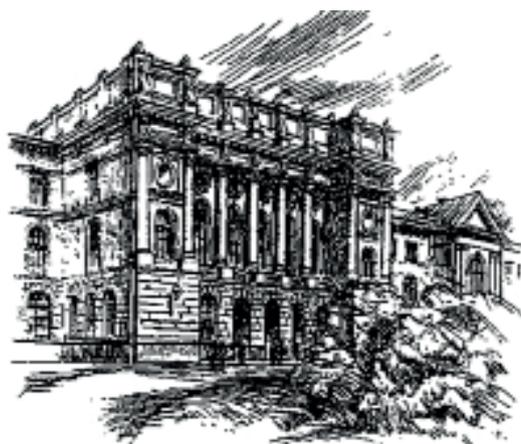


МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

ТОМ 12, №4
2019

Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого
2019

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

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Алферов Ж.И., академик РАН – председатель;
Боровков А.И., проректор по перспективным проектам;
Варшалович Д.А., академик РАН;
Глухих В.А., академик РАН;
Жуков А.Е., чл.-кор. РАН – зам. председателя;
Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Индейцев Д.А., чл.-кор. РАН;
Рудской А.И., академик РАН – зам. председателя;
Суриц Р.А., академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – главный редактор;
Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – зам. главного редактора;
Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия, – ответственный секретарь;
Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Безпрозванный И.Б., д-р биол. наук, профессор, Юго-Западный медицинский центр
Техасского университета, Даллас, США;
Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Донецкий Д.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, университет штата Нью-Йорк в Стоуни-Брук, США;
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;
Тропп Э.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Хейфец А.С., Ph.D. (Physics), профессор, Австралийский национальный университет,
Канберра, Австралия;
Черепанов А.С., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия.

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

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

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

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

Распространяется по Каталогу стран СНГ, Объединенному каталогу «Пресса России» и по Интернет-каталогу «Пресса по подписке». Подписной индекс **71823**.

Журнал индексируется в базе данных **Web of Science** (Emerging Sources Citation Index), а также включен в базу данных «**Российский индекс научного цитирования**» (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте

<http://www.elibrary.ru>

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства:

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

Тел. редакции (812) 294-22-85.

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

THE MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE
POLYTECHNICAL UNIVERSITY
JOURNAL

Physics
and Mathematics

**VOLUME 12, No.4,
2019**

Peter the Great St. Petersburg
Polytechnic University
2019

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

Zh.I. Alferov – full member of RAS, head of the editorial council;
A.I. Borovkov – vice-rector for perspective projects;
V.A. Glukhikh – full member of RAS;
D.A. Indeitsev – corresponding member of RAS;
V.K. Ivanov – Dr. Sci.(phys.-math.), prof.;
A.I. Rudskoy – full member of RAS, deputy head of the editorial council;
R.A. Suris – full member of RAS;
D.A. Varshalovich – full member of RAS;
A.E. Zhukov – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council.

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

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

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

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

The journal is registered with the Federal Service for Supervision in the Sphere of Telecom, Information Technologies and Mass Communications (ROSKOMNADZOR). Certificate ПИ № ФС77-52144 issued December 11, 2012.

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

The journal is in the **Web of Science** (Emerging Sources Citation Index) and the **Russian Science Citation Index** (RSCI) databases.

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

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

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

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

Phone: (812) 294-22-85.

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

© Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 2019

Содержание

Физика конденсированного состояния

- Гулякова А.А., Гороховатский Ю.А., Галиханов М.Ф., Фрюбинг П.** Термоактивационная спектроскопия композитных полимерных пленок на основе ударопрочного полистирола (статья на английском языке)..... 9
- Барышников С.В., Стукова Е.В., Меределина Т.А.** Сегнетоэлектрические свойства композитов на основе бромида диизопропиламмония и титаната свинца..... 17
- Баранов М.А., Величко Е.Н., Розов С.В.** Структурные свойства дегидратированных пленок белковых растворов..... 25
- Лебедева О.С., Лебедев Н.Г., Ляпкосова И.А.** Эластопроводимость силиценовых и германеновых нанолент..... 38

Математическое моделирование физических процессов

- Синицына Д.Э., Юхнев А.Д., Зайцев Д.К., Туркина М.В.** Ультразвуковое и численное исследование структуры течения в трехмерной модели бифуркации брюшной аорты..... 50
- Маннанов Э.Р., Галунин С.А.** Параметрическое моделирование процесса нагрева демпферной пружины индукционным методом..... 61

Приборы и техника физического эксперимента

- Кулешова Т.Э., Павлова Е.С., Титов Ю.А., Кузьмин А.Г., Галль Н.Р.** Пробоподготовка для масс-спектрометрического анализа фракционирования изотопов $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ из окружающей среды в углеродный пул растений..... 69
- Аладов А.В., Валухов В.П., Закгейм А.Л., Купцов В.Д., Мамошин А.В., Потапова Е.В., Черняков А.Е., Фотиади А.Э.** Оптимизация освещения операционного поля с целью получения максимального контраста при визуализации биологических объектов..... 79
- Вакуленко А.Ф., Вахрушев С.Б., Филимонов А.В., Чжан Н.** Установка для измерения петель сегнетоэлектрического гистерезиса на основе модифицированного метода Сойера – Тауэра..... 89

Физическая электроника

- Кожевников В.А., Привалов В.Е., Фотиади А.Э.** Положительный столб разряда постоянного тока в лазерных трубках переменного диаметра..... 97

Теоретическая физика

- Павлов А.В., Иванов В.К., Король А.В., Соловьев А.В.** Излучение позитронов и электронов с энергией 375 МэВ при каналировании в прямых и периодически изогнутых кристаллах алмаза..... 108

Математика

Тимофеев С.В., Суходолов А.П. *Модель распространения новой информации в обществе....* 119

Механика

Булович С.В., Масюкевич А.В. *Экспериментальное исследование взаимодействия ударной волны со слоем проницаемого материала.....* 135

Авторский указатель..... 145

Contents

Condensed matter physics

- Guliakova A.A., Gorokhovatsky Yu.A., Galikhanov M.F., Frübing P.** *Thermoactivational spectroscopy of the high-impact polystyrene based composite films*..... 9
- Baryshnikov S.V., Stukova E.V., Meredelina T.A.** *Ferroelectric properties of composites based on diisopropylammonium bromide and lead titanate*..... 17
- Baranov M.A., Velichko E.N., Rozov S.V.** *Dehydrated films of protein solutions: structural properties* 25
- Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A.** *Elastic conductivity of silicene and germanene nanoribbons*..... 38

Simulation of physical processes

- Sinitsyna D.E., Yukhnev A.D., Zaitsev D.K., Turkina M.V.** *The flow structure in a three-dimensional model of abdominal aortic bifurcation: ultrasonic and numerical study*..... 50
- Mannanov E.R., Galunin S.A.** *The heating of a diaphragm spring using induction technique: parametric modeling*..... 61

Experimental technique and devices

- Kuleshova T.E., Pavlova E.S., Titov Yu.A., Kuzmin A.G., Gall N.R.** *Sample preparation for a mass-spectrometric analysis of $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ isotope fractionation from environment to the plant carbon pool*..... 69
- Aladov A.V., Valyukhov V.P., Zakgeim A.L., Kuptsov V.D., Mamoshin A.V., Potapova E.V., Chernyakov A.E., Fotiadi A.E.** *Optimization of surgical field illumination to maximize the contrast when biological objects being visualized*..... 79
- Vakulenko A.F., Vakhrushev S.B., Filimonov A.V., Zhang N.** *An automatic system for measuring the ferroelectric hysteresis loops using the modified Sawyer – Tower circuit*..... 89

Physical electronics

- Kozhevnikov V.A., Privalov V.E., Fotiadi A.E.** *Positive column of a direct current discharge in laser tubes of variable diameter*..... 97

Theoretical physics

- Pavlov A.V., Ivanov V.K., Korol A.V., Solov'yov A.V.** *Radiation of 375 MeV electrons and positrons during channeling in straight and periodically bent diamond crystals*..... 108

Mathematics

Timofeev S.V., Sukhodolov A.P. *A model of new information dissemination in the society.....* 119

Mechanics

Bulovich S.V., Masiukevich A.V. *The interaction of a shock wave with a permeable layer: an experimental study.....* 135

Author index 145

DOI: 10.18721/JPM.12401
UDC 541.64: 678

THERMOACTIVATIONAL SPECTROSCOPY OF THE HIGH IMPACT POLYSTYRENE BASED COMPOSITE FILMS

A.A. Guliakova¹, Yu.A. Gorokhovatsky¹, M.F. Galikhanov², P. Frübing³

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

² Kazan National Research Technological University,
Kazan, Republic of Tatarstan, Russian Federation;

³ University of Potsdam, Potsdam, Germany

The relaxation processes in the high impact polystyrene (HIPS) films filled with 2, 4, 6 vol.% of titanium dioxide (TiO₂) of the rutile modification have been studied using the thermally stimulated depolarization current (TSDC) technique. Three relaxation processes were observed in the composite HIPS films. The first one (α -relaxation peak) appeared at about 93 °C and represented the glass transition. The second peak ρ was a high-temperature part of the first one and overlapped it. The ρ peak was caused by the release and subsequent motion of excess charges deposited during the electret preparation or the polarization process. The third peak appeared at about 150 °C and occurred only in the spectra of the composite films. The overlapping peaks were separated by the thermal cleaning technique. The subsequent application of the numerical methods (the Tikhonov regularization technique) allowed to determine the activation energy of the second process and to compare the obtained value with the corresponding data on the dielectric relaxation.

Keywords: thermoactivational spectroscopy, high impact polystyrene, titanium dioxide

Citation: Guliakova A.A., Gorokhovatsky Yu.A., Galikhanov M.F., Frübing P., Thermoactivational spectroscopy of the high impact polystyrene based composite films, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (4) (2019) 9–16. DOI: 10.18721/JPM.12401

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

ТЕРМОАКТИВАЦИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ КОМПОЗИТНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ УДАРОПРОЧНОГО ПОЛИСТИРОЛА

А.А. Гулякова¹, Ю.А. Гороховатский¹, М.Ф. Галиханов², П. Фрюбинг³

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

² Казанский национальный исследовательский технологический университет,
г. Казань, Республика Татарстан, Российская Федерация;

³ Потсдамский университет, г. Потсдам, Германия

С помощью метода токов термостимулированной деполяризации (ТСД) исследованы релаксационные процессы в пленках ударопрочного полистирола (УПС) без наполнителя и с различным содержанием диоксида титана TiO₂ (2, 4, 6 об.%). На кривых тока ТСД, полученных для композитных пленок, обнаружено три пика. Первый (α -релаксация) возникает при температуре около 93 °C и соответствует переходу вещества из стеклообразного состояния в высокоэластическое. Второй (ρ -пик) появляется как высокотемпературное плечо α -пика и соответствует процессу высвобождения и

движения избыточных носителей заряда. Наличие третьего пика при температуре около 150 °C характерно только для композитных пленок УПС. Разделение перекрывающихся α - и ρ -пиков проведено методом частичной термоочистки. Последующее применение регуляризирующих алгоритмов Тихонова позволило определить энергию активации второго процесса и сравнить полученное значение с результатом, полученным методом диэлектрической спектроскопии.

Ключевые слова: термоактивационная спектроскопия, ударопрочный полистирол, диоксид титана

Ссылка при цитировании: Гулякова А.А., Гороховатский Ю.А., Галиханов М.Ф., Фрюбинг П. Термоактивационная спектроскопия композитных полимерных пленок на основе ударопрочного полистирола // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 9–16. DOI: 10.18721/JPM.12401

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

Introduction

The thermally stimulated depolarisation current (TSDC) technique is commonly used for the investigation of charge carrier relaxation in dielectrics. It is widely applied as a complement to the frequency domain and the time domain dielectric spectroscopy.

The basic experiment includes two main steps:

the first one is that sample material is polarised in a D.C. field E_p for a time t_p at a high temperature T_p . At this temperature T_p particular dipolar units p or charge carriers are free to move, the former orient in the field and the latter drive towards the electrodes or internal boundaries in heterogeneous materials forming a space charge;

the second one is that the sample is shorted at a low temperature. Under this condition the relaxation times of the species of interest are much longer than the measuring time, and finally it is linearly heated, while the depolarisation current is recorded. During the heating, oriented dipolar units turn back to their equilibrium position and accumulated charge carriers return to a uniform distribution. Due to thermal stimulation, the polarisation decay is more and more accelerated [1 – 3].

A TSDC measurement corresponds to a loss-versus-temperature measurement at a very low equivalent frequency of 10^{-2} to 10^{-3} Hz [4]. Here, an attempt is made for a more detailed description of the relaxation processes in the composite high-impact polystyrene films by means of the thermally stimulated depolarization currents (TSDC) method.

Experimental details

High impact polystyrene (HIPS-0801, GOST (Russian State Standard) 28250-89E) without filler as well as composite HIPS films

were used in the present study. HIPS contains 4 to 6 % butadiene rubber, the butadiene rubber particles form agglomerates from 0.1 to 1 μm in size, and they are embedded in the polystyrene matrix [5].

Titanium dioxide (TiO_2) powder of the rutile modification (R-01, GOST 9808-65, specific surface area is 15 m^2/g , particle size is from 0.1 to 0.8 μm) was used as a filler. Mixing of HIPS and TiO_2 was performed using a laboratory rolling mill under heating at (175 ± 5) °C for 3 min. Films of pure HIPS as well as HIPS with TiO_2 contents of 2, 4, 6 vol.% were manufactured by melt pressing according to GOST 12019-66 at (170 ± 5) °C for 5 min. The films with thicknesses ranging from 350 to 450 μm were investigated.

For electrical measurements, circular aluminum electrodes (12 mm in diameter, about 50 nm thick) were evaporated onto both sides of the films.

Thermally stimulated depolarization currents (TSDC) were recorded with a Keithley model 5617 electrometer and the Novocontrol QUATRO cryosystem. TSDC measurements (heating rate was 2.8 K/min) were performed after poling with the field $E_p = 0.67 \cdot 10^6$ V/m at $T_p = 110$ °C for $t_p = 10^p$ min, subsequent rapid p cooling to room p temperature and short-circuiting.

Experimental results

TSDC thermograms of unfilled HIPS and HIPS with 2 and 4 vol.% TiO_2 are shown in Fig. 1. Three peaks could be observed for composite HIPS films. The α peak appears at about 93 °C and denotes the glass transition [6, 7]. The second ρ peak is caused by the release and subsequent motion of excess charges deposited during the electret preparation or the polarization process [3]. It is a high-temperature

part of the α peak and overlaps it. The third peak appeared at about 150 °C occurs only in the composite films.

In order to separate the α and ρ peaks the peak-cleaning technique was applied according to the following procedure: after passing the first peak the heating was interrupted. Then, the sample was quickly cooled down followed by a second heating where only the response of the second process was expected [6].

The results of the peak-cleaning technique applied to the pure HIPS samples with an

attempt to separate the α relaxation (related to the glass transition) and the higher-temperature relaxation process is shown in Fig. 2 (blue curves). Fig. 3 represents the results for composite HIPS films with 4 vol.% of TiO_2 .

After the ρ peak was separated from the α peak, the activation energy E for the ρ peak was determined using the Tikhonov regularization technique [8, 9]. For this purpose, the TSDC measurement was performed for two different heating rates under identical conditions for composite HIPS films with 4 vol.% of TiO_2 (Fig. 4).

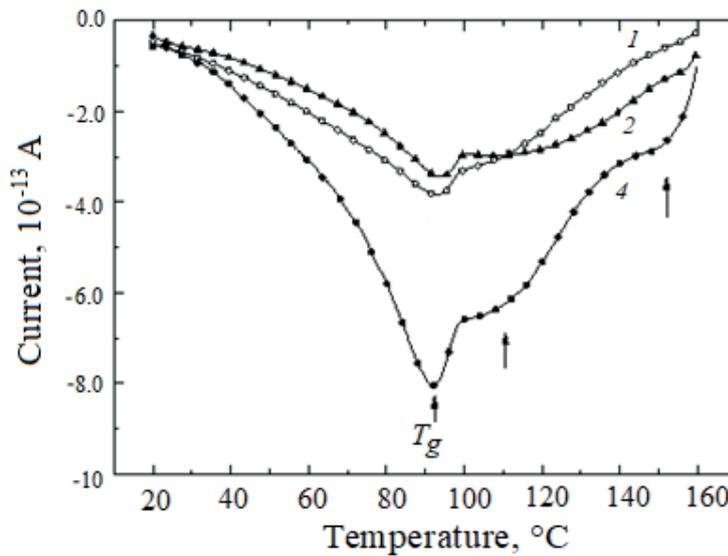


Fig. 1. Thermally stimulated depolarization current (TSDC) spectra of pure HIPS (1) as well as of the HIPS with 2 (2) and 4 (4) vol.% of TiO_2 (heating rate $\beta = 3$ K/min); T_g is the glass transition temperature

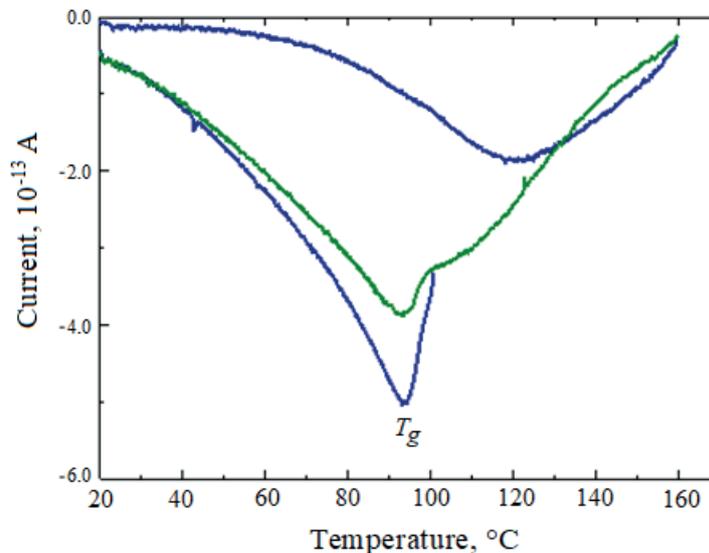


Fig. 2. The peak cleaning technique (blue curves) applied to the pure HIPS samples (heating rate $\beta = 3$ K/min) and shown together with the initial TSDC spectrum (a green curve)

This method allows one to obtain information about values of the activation energy E_a and the effective frequency factor ω_e . The energy distribution $G(E)$ was calculated from the current density $J(T)$. The determination of the distribution function $G(E)$ using the experimental TSDC curves represents the ill-posed problem and could be solved by means of numerical calculations (here the Tikhonov regularization technique was used) [8, 9].

The effective frequency factor ω_e was varied

until the peak positions of the energy distribution functions $G(E)$ coincide. This procedure was the criterion for the correct choice of the effective frequency factor ω_e . The calculated activation energy value yields $E_a = 1.10 \pm 0.05$ eV for the composite HIPS films with 4, 6 vol.% (Figs. 5 and 6). This value was in a good agreement with the activation energy calculated by means of the dielectric relaxation spectroscopy (DRS). At temperatures from 105 to 130 °C the activation energy of 1.1 eV was found [6, 10].

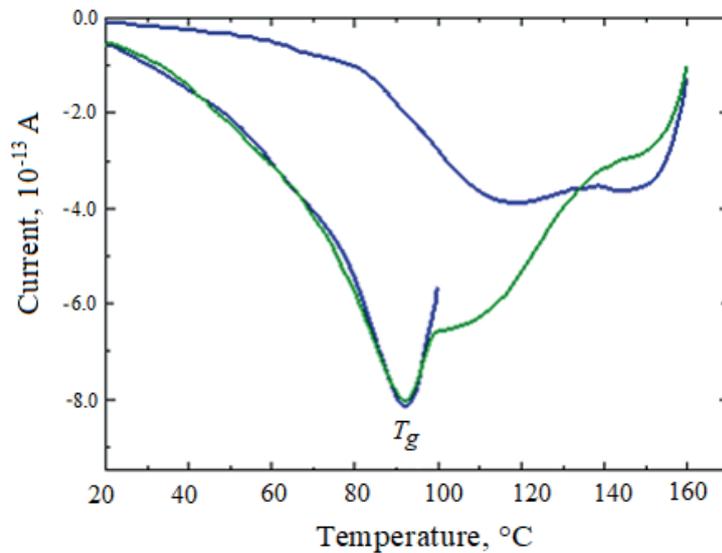


Fig. 3. The peak cleaning technique (blue curves) applied to the HIPS samples with 4 vol.% of TiO_2 (heating rate $\beta = 3$ K/min) and shown together with the initial TSDC spectra (a green curve)

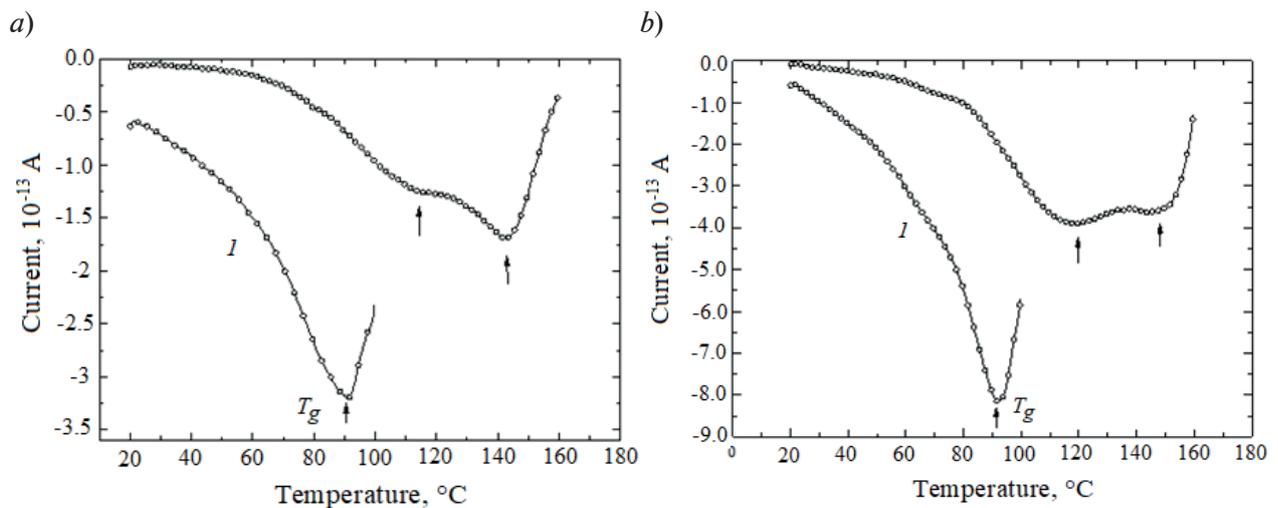


Fig. 4. Thermally stimulated depolarization current (TSDC) spectra (both curves) of the HIPS with 4 vol.% of TiO_2 for two different heating rates β : 1 K/min (a) and 3 K/min (b); curves *I* show the α peaks obtained before (see explanation in the text)

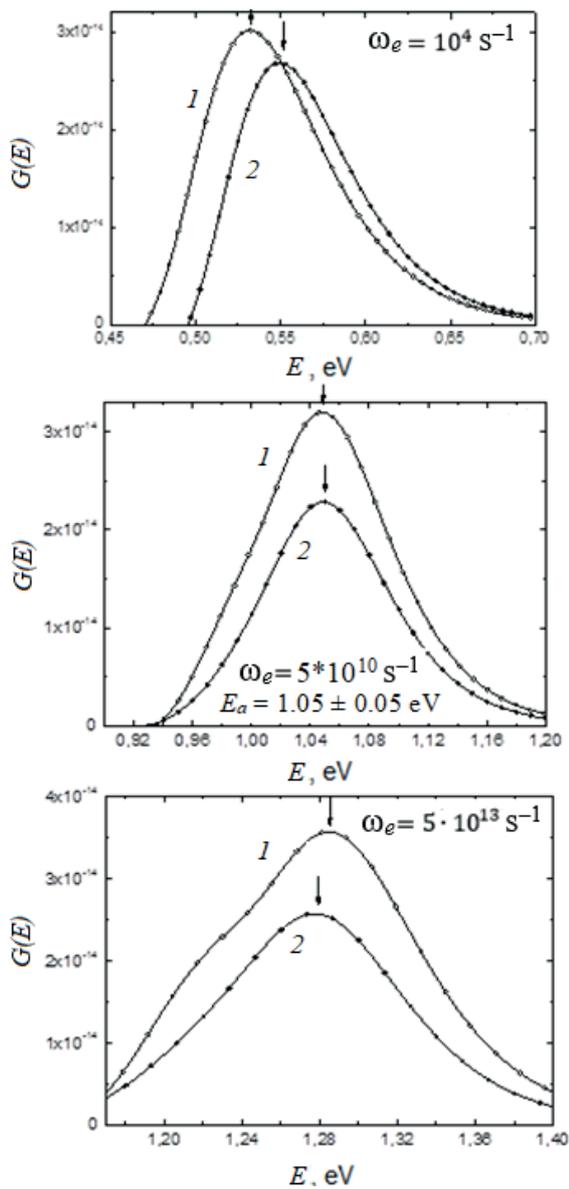


Fig. 5. Determination of the activation energy by means of the Tikhonov regularization technique for HIPS with 4 vol.% of TiO_2 using TSDC curves for 2 heating rates β , K/min: 1.0 (1) and 2.8 (2); ω_e is the obtained effective frequency factor; $E_a = 1.05 \pm 0.05$ eV

Summary

Three relaxation peak processes have been observed in composite HIPS films with TiO_2 inclusions using the TSDC method:

- (i) the α peak at about 93 °C which denotes the glass transition;
- (ii) the ρ peak appears as the high-temperature side of the α peak;
- (iii) the peak at about 150 °C for composite HIPS films.

The peak-cleaning technique allowed

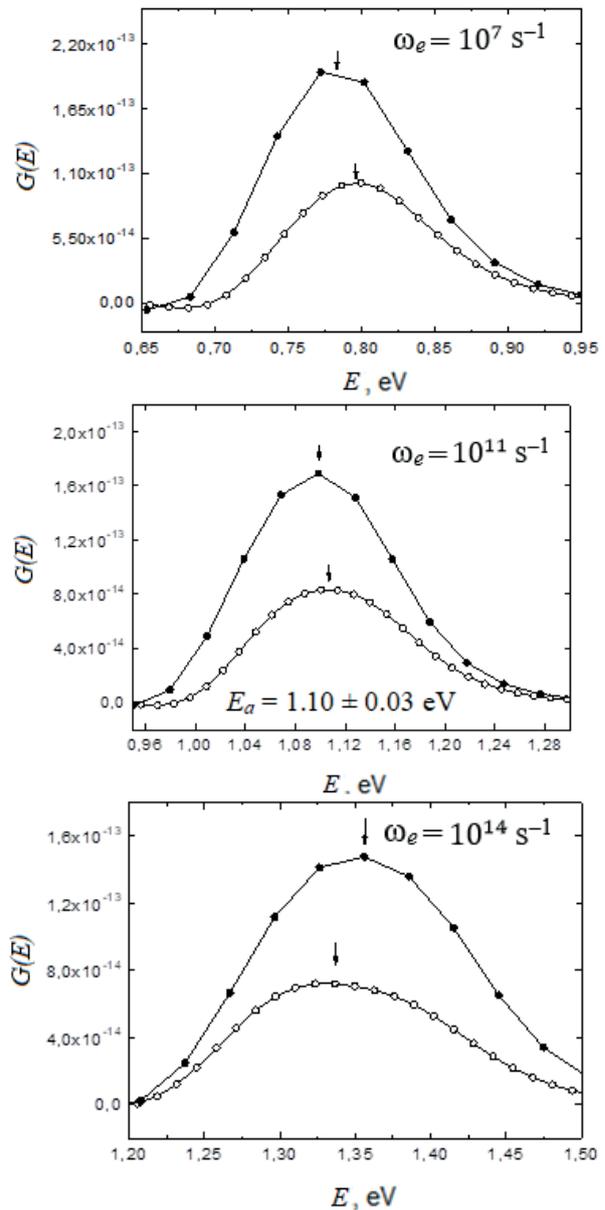


Fig. 6. The data similar to those shown in Fig. 5 but for HIPS with 6 vol.% of TiO_2 ; $E_a = 1.10 \pm 0.03$ eV

separating the two (α and ρ) superimposed peaks. The Tikhonov regularization technique was applied in order to determine the activation energy for the ρ peak:

$$E_a = 1.10 \pm 0.05 \text{ eV}$$

for HIPS films with 4 and 6 vol.% of TiO_2 .

The process with the same activation energy of 1.1 eV has been determined by means of the dielectric relaxation spectroscopy (DRS).

REFERENCES

1. **Frübing P., Weingärtner J., Brehmer L.**, Thermally stimulated depolarisation currents and pyroelectric measurements using the Novocontrol Cryosystem Quatro, Dielectrics Newsletter. Scientific Newsletter for Dielectric Spectroscopy. (November) (1997) 1–3.
2. **Teysedre G., Mezghani S., Bernes A., Lacabanne C.**, Thermally stimulated currents of polymers, In: J.P. Runt, J.J. Fitzgerald (Eds.), Dielectric spectroscopy of polymeric materials, Fundamentals and Applications. Washington, DC: American Chemical Society (1997) 227–258.
3. **Vanderschueren J., Gasiot J.**, Field-induced thermally stimulated currents, In: Bräunlich P. (Ed.), Thermally stimulated relaxation in solids, Part of the topics in Applied Physics book series, Vol. 37. Springer, Berlin, Heidelberg, New York (1979) 135–223.
4. **Van Turnhout J.**, Thermally stimulated discharge of electrets, In: G.M. Sessler (Ed.), Electrets, 2nd enlarged edition, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1987.
5. **Kuboki T., Ben Yar P.-Y., Takahashi K., Shinmura T.**, Observation of “black” and “white” crazes in high-impact polystyrene under transmission electron microscopy, *Macromolecules*. 33 (15) (2000) 5740–5742.
6. **Gulyakova A., Gorokhovatsky Yu., Frübing P., Gerhard R.**, Relaxation processes determining the electret stability of high-impact polystyrene/titanium-dioxide composite films, *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*. 24 (4) (2017) 2541–2548.
7. **Gulyakova A., Frübing P., Gorokhovatsky Yu.**, Relaxation processes and electret properties of titanium-dioxide filled high-impact polystyrene films, *IEEE 14th Int'l. Sympos. Electrets (ISE 14)*, Montpellier, France (2011) 139–140, 2011.
8. **Samarskii A.A., Vabishchevich P.N.**, Numerical methods for solving inverse problems of mathematical physics, Walter de Gruyter, Berlin (2007) 161.
9. **Tikhonov A.N., Arsenin V.Y.**, Solutions of ill-posed problems, V.H. Winston & Sons, Washington D.C., 1977.
10. **Gulyakova A., Gorokhovatsky Yu., Frübing P.**, Dielectric relaxation spectroscopy in the high-impact polystyrene/titanium-dioxide composite films, *St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics*. 12 (3) (2019) 9–16.

Received 26.09.2019, accepted 21.11.2019.

THE AUTHORS

GULIAKOVA Anna A.

Herzen State Pedagogical University of Russia
48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation
a.guliakova@gmail.com

GOROKHOVATSKY Yuriy A.

Herzen State Pedagogical University of Russia
48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation
yurig@fromru.com

GALIKHANOV Mansur F.

Kazan National Research Technological University
68, Karl Marx St., Kazan, 420015, Russian Federation
mgalikhanov@yandex.ru

FRÜBING Peter

University of Potsdam
9, Am Neuen Palais 10, Potsdam, 14469, Germany
frubing@uni-potsdam.de



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Frübing P., Weingärtner J., Brehmer L.** Thermally stimulated depolarisation currents and pyroelectric measurements using the Novocontrol Cryosystem Quatro // Dielectrics Newsletter. Scientific Newsletter for Dielectric Spectroscopy. 1997. November. Pp. 1–3.
2. **Teyssèdre G., Mezghani S., Bernès A., Lacabanne C.** Thermally stimulated currents of polymers // Runt J.P., Fitzgerald J.J. (Eds.). Dielectric spectroscopy of polymeric materials. Fundamentals and Applications. Washington, DC: American Chemical Society, 1997. Pp. 227–258.
3. **Vanderschueren J., Gasiot J.** Field-induced thermally stimulated currents // Bräunlich P. (Ed.). Thermally stimulated relaxation in solids. Part of the topics in Applied Physics book series. Vol. 37. Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1979. Pp. 135–223.
4. **Van Turnhout J.** Thermally stimulated discharge of polymer electrets: a study on nonisothermal dielectric relaxation phenomena // Sessler G.M. (Ed.). Electrets. 2nd enlarged edition. Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1987.
5. **Kuboki T., Ben Yar P.-Y., Takahashi K., Shinmura T.** Observation of “black” and “white” crazes in high-impact polystyrene under transmission electron microscopy // Macromolecules. 2000. Vol. 33. No. 15. Pp. 5740–5742.
6. **Gulyakova A., Gorokhovatsky Yu., Frübing P., Gerhard R.** Relaxation processes determining the electret stability of high-impact polystyrene/titanium-dioxide composite films // IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation. 2017. Vol. 24. No. 4. Pp. 2541–2548.
7. **Gulyakova A., Frübing P., Gorokhovatsky Yu.** Relaxation processes and electret properties of titanium-dioxide filled high-impact polystyrene films // IEEE 14th Int’l. Sympos. Electrets (ISE 14). Montpellier, France. 2011. Pp. 139–140.
8. **Samarskii A.A., Vabishchevich P.N.** Numerical methods for solving inverse problems of mathematical physics. Berlin: Walter de Gruyter, 2007. 161 p.
9. **Tikhonov A.N., Arsenin V.Y.** Solutions of ill-posed problems. Washington D.C.: V.H. Winston & Sons, 1977.
10. **Gulyakova A., Gorokhovatsky Yu., Frübing P.** Dielectric relaxation spectroscopy in the high-impact polystyrene/titanium-dioxide composite films, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (3) (2019) 9–16.

Статья поступила в редакцию 26.09.2019, принята к публикации 21.11.2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГУЛЯКОВА Анна Александровна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48
a.guliakova@gmail.com

ГОРОХОВАТСКИЙ Юрий Андреевич – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48
gorokh-yu@yandex.ru

ГАЛИХАНОВ Мансур Флоридович – кандидат технических наук, профессор кафедры технологии переработки полимеров и композиционных материалов Казанского национального исследовательского технологического университета, г. Казань, Республика Татарстан, Российская Федерация.

420015, Российская Федерация, Республика Татарстан, г. Казань, ул. К. Маркса, 68
mgalikhanov@yandex.ru

ФРЮБИНГ Петер – *научный сотрудник группы прикладной физики конденсированного состояния Потсдамского университета, г. Потсдам, Германия.*
9, Am Neuen Palais 10, Potsdam, 14469, Germany
frubing@uni-potsdam.de

DOI: 10.18721/JPM.12402
УДК 537.226

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ БРОМИДА ДИИЗОПРОПИЛАММОНИЯ И ТИТАНАТА СВИНЦА

С.В. Барышников¹, Е.В. Стукова², Т.А. Меределина¹

¹Благовещенский государственный педагогический университет,
г. Благовещенск, Российская Федерация;

²Амурский государственный университет, г. Благовещенск, Российская Федерация

В работе приведены результаты исследований линейных и нелинейных диэлектрических свойств, а также calorиметрических измерений сегнетоэлектрического композита $(C_6H_{16}NBr)_{1-x}/(PbTiO_3)_x$ с объемной долей частиц титаната свинца в композите $x = 0,1; 0,2; 0,3$. Показано, что добавка частиц титаната свинца к бромиду диизопропиламмония приводит к изменению последовательности структурных фазовых переходов в бромиде диизопропиламмония, увеличению эффективной диэлектрической проницаемости и значений $\tan\delta$ композита. В температурном интервале $150 - 138$ °C присутствуют две фазы $C_6H_{16}NBr$ (сегнетоэлектрическая $P2_1$ и несегнетоэлектрическая $P2_12_12_1$), соотношение между которыми зависит от доли частиц титаната свинца в композите.

Ключевые слова: сегнетоэлектрик, диэлектрическая проницаемость, композит, фазовый переход

Ссылка при цитировании: Барышников С.В., Стукова Е.В., Меределина Т.А. Сегнетоэлектрические свойства композитов на основе бромиде диизопропиламмония и титаната свинца // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 17–24. DOI: 10.18721/JPM.12402

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

FERROELECTRIC PROPERTIES OF COMPOSITES BASED ON DIISOPROPYLAMMONIUM BROMIDE AND LEAD TITANATE

S.V. Baryshnikov¹, E.V. Stukova², T.A. Meredelina¹

¹Blagoveshchensk State Pedagogical University, Blagoveshchensk, Russian Federation;

²Amur State University, Blagoveshchensk, Russian Federation

The results of a study of linear and nonlinear dielectric properties, as well as calorimetric measurements of a ferroelectric composite $(C_6H_{16}NBr)_{1-x}/(PbTiO_3)_x$ with a volume fraction $x = 0.1, 0.2, 0.3$ of lead titanate particles are presented. It has been shown that the addition of lead titanate particles to diisopropylammonium bromide leads to a change in the sequence of structural phase transitions in the diisopropylammonium bromide, an increase in the effective dielectric constant and $\tan\delta$ values. In a temperature range of $150 - 138$ °C, there were two $C_6H_{16}NBr$ phases (ferroelectric $P2_1$ and nonferroelectric $P2_12_12_1$). The proportion among these phases depended on the fraction of lead titanate particles in the composite.

Keywords: ferroelectric, dielectric constant, composite, phase transition

Citation: Baryshnikov S.V., Stukova E.V., Meredelina T.A., Ferroelectric properties of composites based on diisopropylammonium bromide and lead titanate, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (4) (2019) 17–24. DOI: 10.18721/JPM.12402

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

Введение

Большой интерес к исследованию сегнетоэлектрических композитов связан с тем, что неоднородные материалы могут демонстрировать необычные свойства, по сравнению с однородными веществами. Согласно теоретическим представлениям, за возникновение сегнетоэлектрического состояния отвечает диполь-дипольное взаимодействие, которое позволяет объяснять возникновение доменной структуры и влияние полярных примесей на свойства кристаллов [1 – 3]. В работах [2, 3] было показано, что введение полярных примесей в сильно поляризуемые матрицы может приводить к появлению сегнетоэлектрического состояния. В композитах, в отличие от кристаллов и твердых растворов, полярные частицы расположены на расстояниях порядка нескольких микрон, в связи с чем возникает вопрос, как в таких структурах будут проявляться электрические взаимодействия.

Исследованию взаимного влияния компонентов в сегнетоэлектрических композитах посвящен ряд публикаций (см., например, [4 – 7] и ссылки в них). Установлено, что для указанных объектов такое влияние возможно. Для таких композитов, как $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{BaTiO}_3)_x$, $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{KNbO}_3)_x$ наблюдалось расширение существования сегнетоэлектрической фазы нитрата калия [4, 5]. Для композита $(\text{NaNO}_2)_{1-x}/(\text{BaTiO}_3)_x$ эффект взаимодействия привел к расширению температурной области существования несоизмерной фазы нитрита натрия [6]. В работе [7] был обнаружен значительный сдвиг температуры Кюри для соединения $\text{AgNa}(\text{NO}_2)_2$ в композите $[\text{AgNa}(\text{NO}_2)_2]_{0,9}/[\text{BaTiO}_3]_{0,1}$.

В последние годы был открыт ряд органических соединений с полярной точечной группой при комнатной температуре и относительно высокой точкой плавления (около 177°C). К таким сегнетоэлектрикам относятся хлорид диизопропиламмония ($\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NCl}$, DIPAC) со значениями $P_s \approx 8,2$ мкКл/см², $T_c = 167^\circ\text{C}$ [8]; бромид диизопропиламмония ($\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr}$, DIPAB) с $P_s \approx 23$ мкКл/см², $T_c = 153^\circ\text{C}$ [9]; иодид диизопропиламмония ($\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NI}$, DIPAI) с $P_s \approx 5,17$ мкКл/см², $T_c = 105^\circ\text{C}$ [10]. В частности, DIPAB имеет спонтанную поляризацию, близкую к титанату бария, высокую температуру Кюри и демонстрирует хороший пьезоэлектрический отклик. Эти атрибуты делают его альтернативой перов-

скитоподобным сегнетоэлектрикам и сегнетоэлектрическим полимерам.

Данная работа посвящена исследованию влияния частиц PbTiO_3 на температуры фазовых переходов и диэлектрические свойства композита $(\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr})_{1-x}/(\text{PbTiO}_3)_x$.

Образцы и методика эксперимента

При комнатной температуре соединение $\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr}$ может существовать в двух различных полиморфных фазах – с пространственной симметрией $P2_1$ или $P2_12_12_1$, в зависимости от условий получения и термальной истории [10]. Сегнетоэлектрической является моноклинная фаза $P2_1$, которая при температуре выше $T_c \approx 152^\circ\text{C}$ переходит в неполярную фазу $P2_1^0/m$. Сегнетоэлектрический переход в $\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr}$ относится к переходам первого рода. Вторая фаза, стабильная при комнатной температуре, имеет ромбическую симметрию с пространственной группой $P2_12_12_1$ и сегнетоэлектрически неактивна; при нагреве она также переходит в неполярную моноклинную фазу $P2_1/m$, но с образованием промежуточной полярной структуры с симметрией $P2_1$, которая существует в интервале примерно от 148 до 152°C . В процессе охлаждения при 145°C структура $\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr}$ меняется непосредственно с $P2_1/m$ на $P2_1$ и ромбическая фаза больше не образуется.

В наших исследованиях бромид диизопропиламмония был получен реакцией диизопропиламина с 48%-м водным раствором HBr (молярное соотношение 1:1) по методике, приведенной в работе [11], с последующей перекристаллизацией из метилового спирта при комнатной температуре. Максимальные кристаллики имели размеры 2 – 3 мм.

Ниже температуры 490°C титанат свинца имеет тетрагональную фазу, изоморфную титанату бария и является сегнетоэлектриком первого рода. При комнатной температуре спонтанная поляризация PbTiO_3 составляет примерно $P_s \approx 70$ мкКл/см², что значительно выше, чем для BaTiO_3 ($P_s \approx 22$ мкКл/см²). Значение диэлектрической постоянной ϵ' вдоль полярной оси для PbTiO_3 при комнатной температуре лежит в пределах $(1,5 - 2,2) \cdot 10^2$, в то время как для BaTiO_3 оно составляет $(2 - 4) \cdot 10^3$ [12].

Для исследований использовались композитные образцы $(\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr})_{1-x}/(\text{PbTiO}_3)_x$, где x составляло 10, 20 и 30 об. %. В процессе приготовления образцов порошки тща-

тельно перемешивались и прессовались под давлением порядка 10^4 кг/см². Средний размер частиц в композите лежал в интервале 3 – 10 мкм. Образцы имели форму дисков диаметром 10 мм и толщиной 1,5 мм; на их поверхность наносились серебряные электроды.

Измерения характеристик исследуемых образцов проводились автоматически под управлением компьютера, в режимах нагрева и последующего охлаждения со скоростью 1 град/мин в температурном интервале 30 – 170 °С.

Для определения диэлектрических свойств применялся измеритель иммитанса E7-25. Измерения осуществлялись на частотах 10^3 , 10^4 и 10^5 Гц при напряжении 0,7 В. Погрешность измерения емкости образцов не превышала 5%. Значения температуры фиксировались цифровым термометром ТС-6621 с хромель-алюмелевой термопарой. Погрешность определения температуры не превышала 0,1 °С.

Установка для исследований нелинейных свойств композитов включала генератор колебаний с частотой 2 кГц. Напряженность электрического поля, налагаемого на образцы $C_6H_{16}NBr$ и композитов $(C_6H_{16}NBr)_{1-x}/(PbTiO_3)_x$, составляла около 10 В/мм. Сигнал снимался с резистора, включенного последовательно с образцом, и подавался на анализатор спектра. Коэффициенты второй и третьей гармоник определялись как отношения амплитуды гармоники к емкостной составляющей основного сигнала:

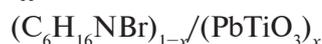
$$\gamma_{2\omega} = u_{2\omega}/u_{\omega}, \gamma_{3\omega} = u_{3\omega}/u_{\omega}.$$

Более подробно методика нелинейных измерений описана в работах [13, 14].

Для измерения теплоемкости применялся метод сканирующей дифференциальной калориметрии с разрешением по термоэдс около 5 мкВ. Скорость нагрева и охлаждения составляла 2 град/мин. Погрешность измерения температуры не превышала 0,2 °С.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

Результаты исследований диэлектрических свойств для поликристаллических образцов $C_6H_{16}NBr$ и композитов



при $x = 0,1; 0,2$ и $0,3$ представлены на рис. 1

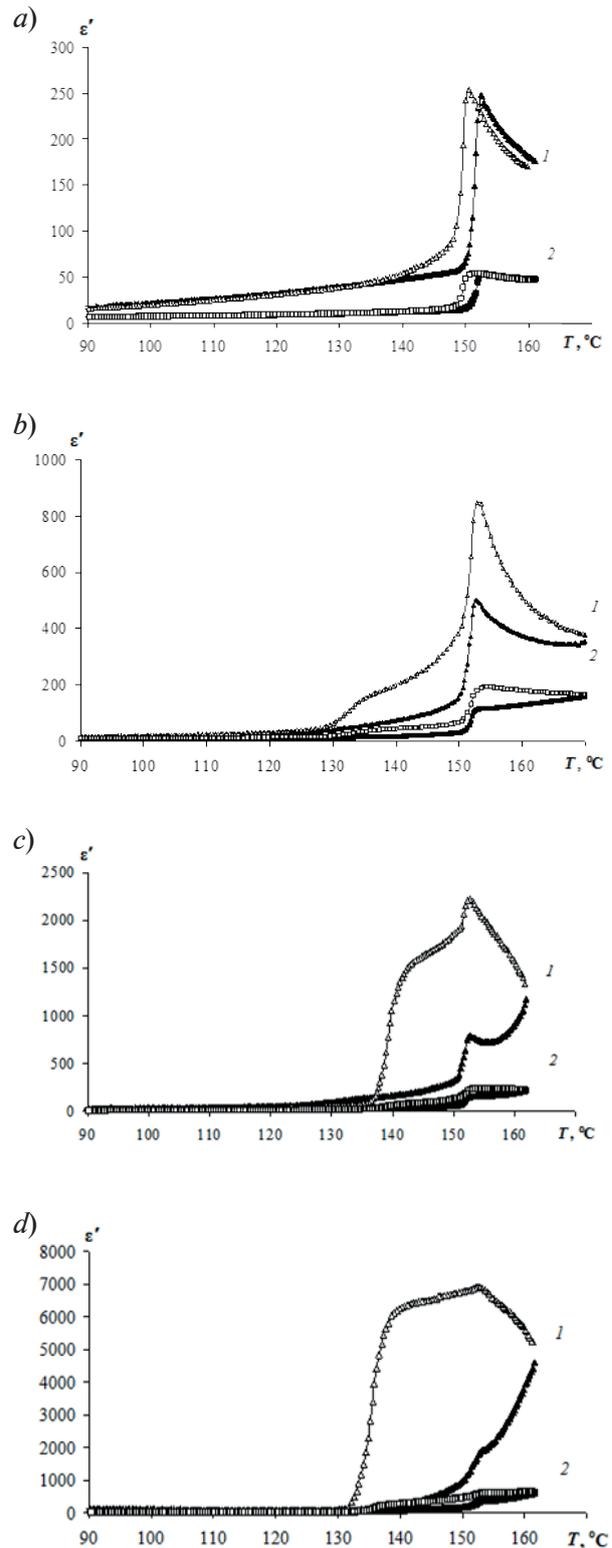


Рис. 1. Температурный ход диэлектрической проницаемости композита $(C_6H_{16}NBr)_{1-x}/(PbTiO_3)_x$ при значениях $x = 0$ (a), 0,1 (b), 0,2 (c), 0,3 (d), полученный на частотах 1 кГц (1) и 100 кГц (2) в режимах нагрева (темные маркеры) и охлаждения (светлые маркеры)

Таблица
Изменение диэлектрических свойств композитов
при увеличении содержания титаната свинца

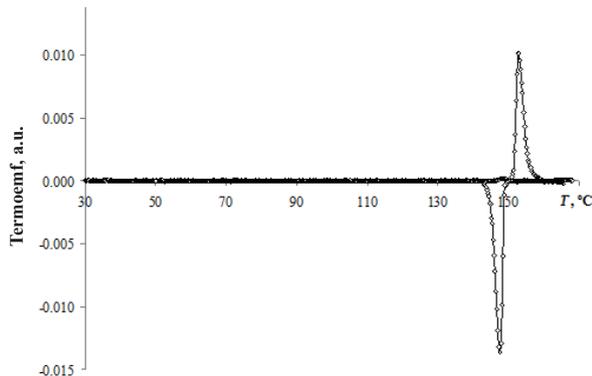
Состав	ϵ'_{\max}	$(\text{tg}\delta)_{\max}$	ϵ'_{\max}	$(\text{tg}\delta)_{\max}$
	10 ³ Гц		10 ⁵ Гц	
C ₆ H ₁₆ NBr	~250	~ 8	~55	~ 0,9
(C ₆ H ₁₆ NBr) _{0,9} /(PbTiO ₃) _{0,1}	~900	~ 30	~190	~ 2,6
(C ₆ H ₁₆ NBr) _{0,8} /(PbTiO ₃) _{0,2}	~2200	~ 40	~230	~ 3,5
(C ₆ H ₁₆ NBr) _{0,7} /(PbTiO ₃) _{0,3}	~7000	~ 90	~550	~ 6,0

Из приведенных зависимостей $\epsilon'(T)$ следует, что с увеличением содержания титаната свинца, во-первых, растет максимальное значение диэлектрической проницаемости ϵ'_{\max} , а во-вторых, для композитов на кривой $\epsilon'(T)$ при охлаждении появляется дополнительная аномалия в температурном интервале 133 – 137 °С,

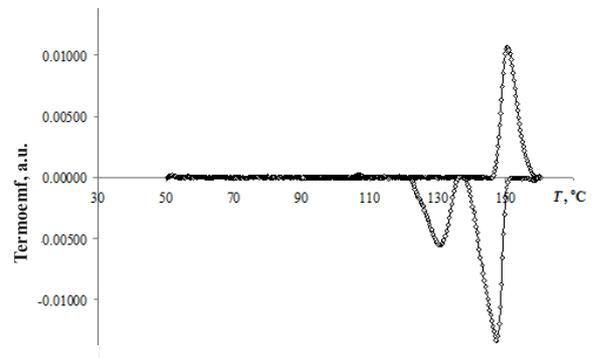
которая отсутствует на соответствующей кривой для чистого C₆H₁₆NBr.

В таблице приведены максимальные значения диэлектрической проницаемости ϵ'_{\max} композитов, имеющих состав с разным содержанием объемной доли частиц-включений титаната свинца, на частотах 10³ и 10⁵ Гц.

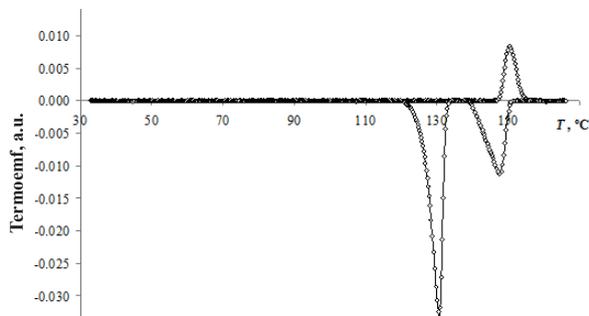
a)



b)



c)



d)

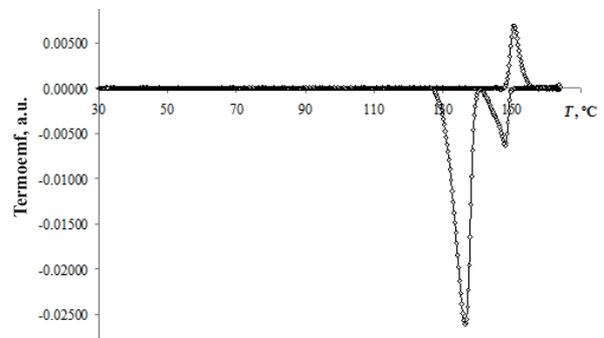


Рис. 2. Относительные изменения термоэдс для образцов композита (C₆H₁₆NBr)_{1-x}/(PbTiO₃)_x при значениях x = 0 (a), 0,1 (b), 0,2 (c), 0,3 (d); положительный сигнал – нагрев, отрицательный – охлаждение

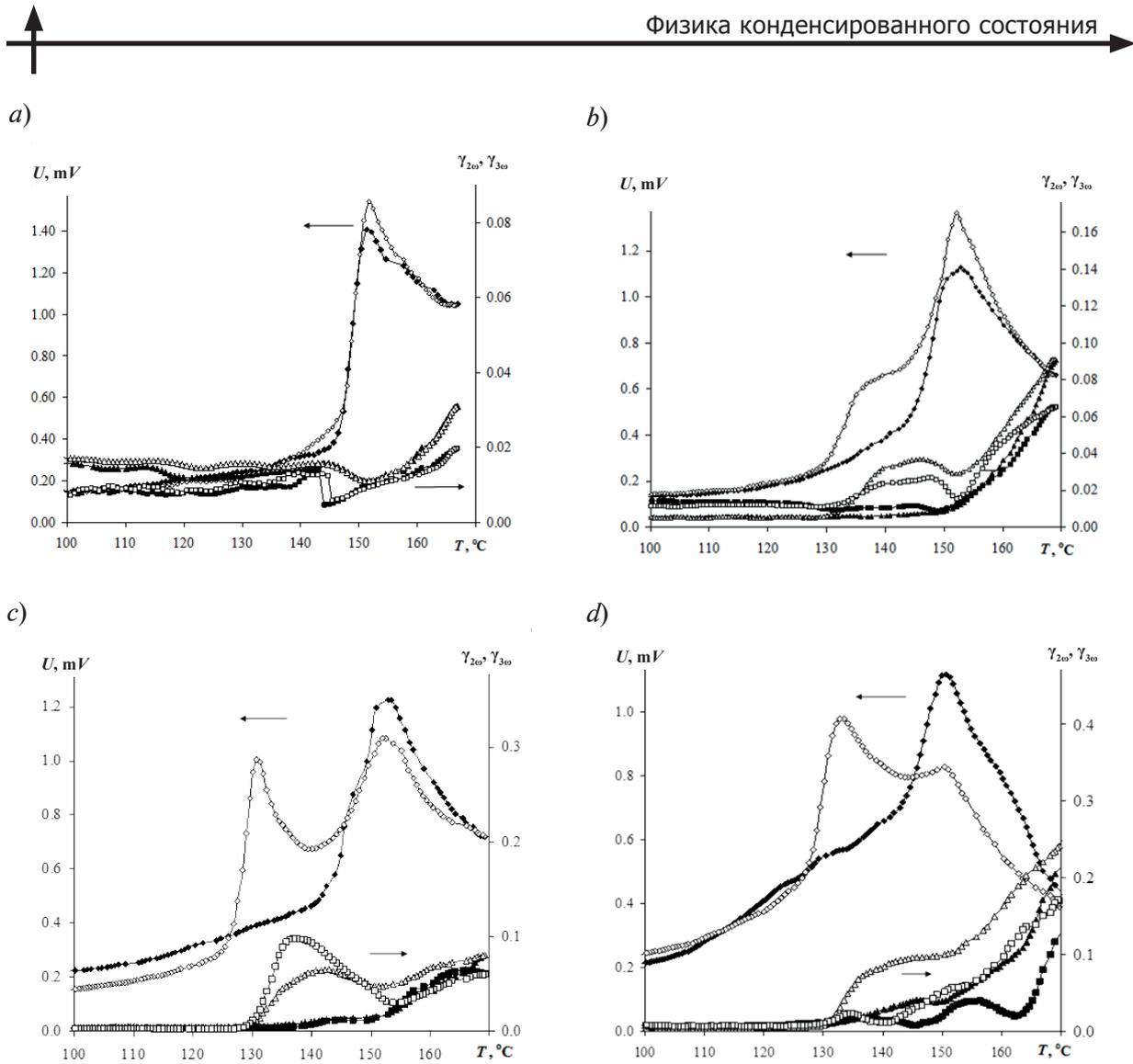


Рис. 3. Температурные зависимости емкостной составляющей сигнала на основной частоте ω (левые оси) и коэффициентов второй ($\gamma_{2\omega}$) и третьей ($\gamma_{3\omega}$) гармоник (правые оси) для композитов $(\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr})_{1-x}/(\text{PbTiO}_3)_x$ при значениях $x = 0$ (a), 0,1 (b), 0,2 (c), 0,3 (d); темные маркеры – нагрев, светлые – охлаждение

Как показали калориметрические исследования (рис. 2), добавление титаната свинца индуцирует дополнительный фазовый переход при охлаждении, природа которого пока не до конца понятна. При этом с увеличением доли частиц титаната свинца в композите интенсивность сигнала для этого дополнительного перехода возрастает.

Для определения характера структуры, возникающей между двумя фазовыми переходами при охлаждении, объекты были изучены методом нелинейной диэлектрической спектроскопии (НДС). На рис. 3 приведены температурные зависимости основного сигнала на частоте 2 кГц и коэффициентов второй (4 кГц) и третьей (6 кГц) гармоник.

Как было показано в работе [13] для сегнетоэлектриков с фазовым переходом первого рода, нелинейные диэлектрические проницаемости выражаются как

$$\varepsilon_2 = -(3\beta + 10\gamma P_s^2) P_s \chi_1^3; \quad (1)$$

$$\varepsilon_3 = \left[-\beta - P_s^2 (10\gamma + 18\beta^2 \chi_1 + 120\chi_1 \beta \gamma P_s^2) + 200\chi_1 \gamma^2 P_s^4 \right] \chi_1^4, \quad (2)$$

где χ_1 – диэлектрическая восприимчивость; P_s – спонтанная поляризация; β , γ – коэффициенты разложения Ландау.

Из выражения (2) можно видеть, что проницаемость третьего порядка значительно возрастает в полярной фазе за счет

возникновения спонтанной поляризации и имеет минимум в точке фазового перехода. Таким образом, исследование температурной зависимости генерации третьей гармоники является прямым методом регистрации сегнетоэлектрического состояния.

Из графиков, приведенных на рис. 3, следует, что в поведении величины $\gamma_{3\omega}$ для чистого $C_6H_{16}NBr$ наблюдается некоторая аномалия, которая вблизи сегнетоэлектрического фазового перехода равна примерно 1,5 %. Для состава $(C_6H_{16}NBr)_{0,9}/(PbTiO_3)_{0,1}$ в температурном интервале 133 – 137 °С, значение $\gamma_{3\omega}$ при охлаждении составляет около 2,5 %, а $\gamma_{2\omega}$ – примерно 7,5%. Для состава $(C_6H_{16}NBr)_{0,8}/(PbTiO_3)_{0,2}$ величина $\gamma_{3\omega}$ в температурном интервале 133 – 137 °С достигает значения около 30%, а $\gamma_{2\omega}$ – примерно 5 %. При дальнейшем увеличении содержания титаната свинца в композите, для состава $(C_6H_{16}NBr)_{0,7}/(PbTiO_3)_{0,3}$ значение $\gamma_{3\omega}$ снижается примерно до 5%, а $\gamma_{2\omega}$ возрастает до 20%.

Полученные экспериментальные данные по НДС позволяют утверждать, что в интервале 137 – 133 °С, при охлаждении, в композите присутствуют две фазы соединения $C_6H_{16}NBr$: сегнетоэлектрическая $P2_1$ и не сегнетоэлектрическая $P2_1/m$. Наличие более четких аномалий на фазовых переходах для емкостной составляющей сигнала через образец, по сравнению с зависимостью $\epsilon'(T)$, обусловлено образованием в компо-

зите барьерных переходов на границах соединений $C_6H_{16}NBr$ и $PbTiO_3$, которые при малых значениях подаваемого напряжения работают как емкости, давая значительный вклад в эффективную диэлектрическую проницаемость. При измерительном напряжении свыше 3 В, этот механизм включается и эффективная диэлектрическая проницаемость снижается.

Заключение

Как показали исследования диэлектрических свойств композита $(C_6H_{16}NBr)_{1-x}/(PbTiO_3)_x$, увеличение значения x приводит к размытию фазовых переходов и росту величин ϵ' и $\text{tg}\delta$ (см. таблицу). Возрастание проницаемости, вероятно, обусловлено барьерными механизмами, о чем свидетельствует зависимость диэлектрических свойств от амплитуды измерительного поля и его частоты. Анализ данных калориметрических измерений позволил обнаружить возникновение дополнительного фазового перехода, удельная теплота которого растет с увеличением значения x . Появление дополнительного фазового перехода можно объяснить электрическим взаимодействием частиц бромида диизопропиламония и титаната свинца в композите.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ. Грант № 19-29-03004.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Исупов В.А. Природа физических явлений в сегнеторелаксорах // ФТТ. 2003. Т. 45. № 6. С. 1056–1060.
2. Вугмейстер Б.Е., Глинчук М.Д. Особенности кооперативного поведения параэлектрических дефектов в сильно поляризуемых кристаллах // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. № 3. С. 947–952.
3. Вугмейстер Б.Е., Глинчук М.Д. Кооперативные явления в кристаллах с нецентральными ионами – дипольное стекло и сегнетоэлектричество // УФН. 1985. Т. 146. № 3. С. 459–491.
4. Stukova E.V., Baryshnikov S.V. Stabilization of the ferroelectric phase in $(KNO_3)_{1-x}-(BaTiO_3)_x$ composites // Inorganic Materials: Applied Research. 2011. Vol. 2. No. 5. Pp. 434–438.
5. Стукова Е.В., Барышников С.В. Диэлектрические исследования сегнетоэлектрических композитов на основе $(KNO_3)_{1-x}$ - $(KNbO_3)_x$ // Перспективные материалы. 2011. № 13. С. 801–805.
6. Baryshnikov S.V., Stukova E.V., Koroleva E.Yu. Dielectric properties of the ferroelectric composite $(NaNO_2)_{0,9}/(BaTiO_3)_{0,1}$ // Composites. Part B. 2014. Vol. 66. November. Pp. 190–193.
7. Baryshnikov S., Milinskiy A., Stukova E. Dielectric properties of the ferroelectric composites $[AgNa(NO_2)_2]_{0,9}/[NaNO_2]_{0,1}$ and $[AgNa(NO_2)_2]_{0,9}/[BaTiO_3]_{0,1}$ // Ferroelectrics. 2018. Vol. 536. No. 1. Pp. 91–98.
8. Fu D.-W., Zhang W., Cai H.-L., Ge J.-Z., Zhang Y., Xiong R.-G. Diisopropylammonium chloride: a ferroelectric organic salt with a high phase transition temperature and practical utilization level of spontaneous polarization // Advanced Materials. 2011. Vol. 23. No. 47. Pp. 5658–5662.
9. Fu D.-W., Cai H.-L., Liu Y., Ye Q., Zhang W., Zhang Y., Chen X.-Y., Giovannetti G., Capone



M., Li J., Xiong R.-G. Diisopropylammonium bromide is a high-temperature molecular ferroelectric crystal // Science. 2013. Vol. 339. No. 6118. Pp. 425–428.

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

11. Piecha A., Gagor A, Jakubas R., Szklarz P. Room-temperature ferroelectricity in diisopropylammonium bromide // CrystEngComm. 2013. Vol. 15. No. 5. Pp. 940–944.

12. Лайнс М., Гласс А. Сегнетоэлектрики и

родственные им материалы. Пер. с англ. под ред. Леманова В.В., Смоленского Г.А. М.: Мир, 1981. 736 с.

13. Ikeda S., Kominami H., Koyama K., Wada Y.J. Nonlinear dielectric constant and ferroelectric-to-paraelectric phase transition in copolymers of vinylidene fluoride and trifluoroethylene // Appl. Phys. 1987. Vol. 62. No. 8. Pp. 3339–3342.

14. Барышников С.В., Чарная Е.В., Миллинский А.Ю., Шацкая Ю.А., Michel D. Диэлектрические и калориметрические исследования KNO_3 в порах наноразмерных силикатных матриц МСМ-41 // ФТТ. 2012. Т. 54. № 3. С. 594–599.

Статья поступила в редакцию 30.09.2019, принята к публикации 22.10.2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

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

675000, Российская Федерация, Амурская область, г. Благовещенск, ул. Ленина, 104
svbar2003@list.ru

СТУКОВА Елена Владимировна – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Амурского государственного университета, г. Благовещенск, Российская Федерация.

675027, Российская Федерация, Амурская область, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21
lenast@bk.ru

МЕРЕДЕЛИНА Татьяна Александровна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физического и математического образования Благовещенского государственного педагогического университета, г. Благовещенск, Российская Федерация.

675000, Российская Федерация, Амурская область, г. Благовещенск, ул. Ленина, 104
biofirm@mail.ru

REFERENCES

1. Isupov V.A., Nature of physical phenomena in ferroelectric relaxors, Physics of the Solid State. 45 (6) (2003) 1107–1111.

2. Vugmeister B.E., Glinchuk M.D., Some features of the cooperative behavior of paraelectric defects in strongly polarizable crystals, JETP. 52 (3) (1980) 482–484.

3. Vugmeister B.E., Glinchuk M.D., Cooperative phenomena in crystals containing off-center ions-dipole glass and ferroelectricity, Physics-Uspekhi. 28 (7) (1985) 589–607.

4. Stukova E.V., Baryshnikov S.V., Stabilization of the ferroelectric phase in $(\text{KNO}_3)_{1-x}-(\text{BaTiO}_3)_x$ composites, Inorganic Materials: Applied Research. 2 (5) (2011) 434–438.

5. Stukova E.V., Baryshnikov S.V., Dielektricheskiye issledovaniya segnetoelektricheskikh kompozitov na osnove $(\text{KNO}_3)_{1-x}-(\text{KNbO}_3)_x$ [Dielectric studies of ferroelectric composites based on $(\text{KNO}_3)_{1-x}-(\text{KNbO}_3)_x$], Perspektivnyye Materialy. 13 (2011) 801–805.

6. Baryshnikov S.V., Stukova E.V., Koroleva E.Yu., Dielectric properties of the ferroelectric composite $(\text{NaNbO}_3)_{0.9}/(\text{BaTiO}_3)_{0.1}$, Composites: Part B. 66 (November) (2014) 190–193.

7. Baryshnikov S., Milinskiy A., Stukova E., Dielectric properties of the ferroelectric composites $[\text{AgNa}(\text{NO}_2)_2]_{0.9}/[\text{NaNbO}_3]_{0.1}$ and $[\text{AgNa}(\text{NO}_2)_2]_{0.9}/[\text{BaTiO}_3]_{0.1}$, Ferroelectrics. 536

(1) (2018) 91–98.

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

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

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

11. **Piecha A., Gagor A., Jakubas R.,**

Szklarz P., Room-temperature ferroelectricity in diisopropylammonium bromide, *CrystEngComm*. 15 (5) (2013) 940–944.

12. **Lines M.E., Glass A.M.**, Principles and application of ferroelectrics and related materials, Oxford, “Clarendon Press Oxford”, 1977.

13. **Ikeda S., Kominami H., Koyama K., Wada Y.J.**, Nonlinear dielectric constant and ferroelectric-to-paraelectric phase transition in copolymers of vinylidene fluoride and trifluoroethylene, *Appl. Phys.* 62 (8) (1987) 3339–3342.

14. **Baryshnikov S.V., Charnaya E.V., Milinskii A.Yu., et al.**, Dielectric and calorimetric investigations of KNO_3 in pores of nanoporous silica matrices MCM-41, *Physics of the Solid State*. 54 (3) (2012) 636–641.

Received 30.09.2019, accepted 22.10.2019.

THE AUTHORS

BARYSHNIKOV Sergey V.

Blagoveshchensk State Pedagogical University

104 Lenina St., Blagoveshchensk, 675000, Russian Federation
svbar2003@list.ru

STUKOVA Elena V.

Amur State University

21 Ignatievskoe Ave., Blagoveshchensk, 675027, Russian Federation
lenast@bk.ru

MEREDELINA Tatiana A.

Blagoveshchensk State Pedagogical University

104 Lenina St., Blagoveshchensk, 675000, Russian Federation
biofirm@mail.ru



DOI: 10.18721/JPM.12403

УДК 53.093, 53.096, 57.031, 57.033, 57.038

СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА ДЕГИДРАТИРОВАННЫХ ПЛЕНОК БЕЛКОВЫХ РАСТВОРОВ

М.А. Баранов, Е.Н. Величко, С.В. Розов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

В данной работе рассмотрено образование различных характерных диссипативных структур в пленках водного и водно-солевого растворов белка альбумина в процессах дегидратации. Показано, что условия проведения экспериментов по дегидратации растворов влияют на форму и пространственное распределение двумерных структурных образований в пленках растворов белков. Сделан вывод о значении структурной самоорганизации пленок в процессе их дегидратации.

Ключевые слова: процесс самоорганизации, диссипативная структура, белковая пленка

Ссылка при цитировании: Баранов М.А., Величко Е.Н., Розов С.В. Структурные свойства дегидратированных пленок белковых растворов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 25–37. DOI: 10.18721/JPM.12403

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

DEHYDRATED FILMS OF PROTEIN SOLUTIONS: STRUCTURAL PROPERTIES

M.A. Baranov, E.N. Velichko, S.V. Rozov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

In this paper, the formation of various characteristic dissipative structures in the films of aqueous and aqueous-salt solutions of albumin protein in dehydration processes is considered. It has been shown that a number of parameters for conducting experiments on solution dehydration affect the shape and spatial distribution of two-dimensional structural formations in films of protein solutions. A conclusion was drawn on the importance of the structural self-organization of films in the process of their dehydration.

Keywords: self-organization process, dissipative structure, protein film

Citation: Baranov M.A., Velichko E.N., Rozov S.V., Dehydrated films of protein solutions: structural properties, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (4) (2019) 25–37. DOI: 10.18721/JPM.12403

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

Введение

В настоящее время интерес многих исследователей нацелен на свойства пленок, образованных при дегидратации растворов белков или их фрагментов (пептидов). Такие материалы используют в физике, химии, биологии, медицине, а также в электронике и нанотехнологиях [1 – 8]. В процессах дегидратации происходит быстрый фазовый переход веществ в условиях, далеких от равновесных, что в рамках классических представлений должно сопровождаться самоорганизацией и возникновением упорядоченных пространственных структур.

Указанные процессы могут происходить, например, при дегидратации водных растворов белков [9 – 11]. Ключевым звеном изучения процессов самоорганизации в биологических пленках является определение механизмов фолдинга белка [9]. В результате высыхания пленки белка наблюдается образование специфической упорядоченной морфологической структуры [9]. Такая высыхающая пленка представляет интерес как естественная модель самоорганизующейся системы с богатым набором вариаций течения процесса, определяемых ее составом, свойствами подложки и внешними условиями [10, 12].

Одним из направлений, в котором используются дегидратированные пленки биологических жидкостей, является медицинская диагностика. В ней используется метод «клиновидной» дегидратации биологических жидкостей. Известна корреляция между параметрами образующихся структур в самоорганизованных пленках биожидкостей и различными типами патологии организма [13, 14]. Для понимания физической составляющей процессов самоорганизации в пленках белка, необходимо учитывать влияние различных факторов эксперимента.

Для правильной интерпретации структур, образующихся в сложных биологических жидкостях, в настоящей работе исследованы водные растворы яичного альбумина (овальбумина) с различными условиями проведения экспериментов. При этом рассматривается влияние различных условий проведения дегидратации на образование структур в пленках овальбумина.

Описание процессов самоорганизации

Согласно представлениям молекулярной биологии, в процессе самоорганизации

происходит фолдинг белка, т. е. образование его третичной структуры (трехмерная конформация) в соответствии со структурной информацией, закодированной еще в первичной структуре (последовательности аминокислотных остатков). С позиций физики, развитие самоорганизации – это процессы возникновения макроскопически упорядоченных пространственно-временных структур в сложных нелинейных системах [15]. Самоорганизация белков с физической и химической точек зрения подробно описана в работе [16].

Процессы самоорганизации могут иметь место только в системах, которые обладают высоким уровнем сложности и большим количеством элементов. Существует несколько подходов к определению и объяснению физической сущности указанных процессов. Это, например, подход И.Р. Пригожина через определение энтропии открытых систем [17], а также подход А.П. Руденко с позиции эволюционного катализа [18]. Оба этих подхода одинаковы в оценке антиэнтропийной природы процесса самоорганизации, однако они сильно различаются в понимании условий, причин и движущих сил самоорганизации, в объяснении механизма и установлении ее меры. Близость данных подходов к проблеме – это выбор характеристик открытой системы для описания ее самоорганизации и оценки ее меры. Однако в первом случае – это поток диссипации, а во втором – поток внутренней полезной работы против состояния равновесия. Другими словами, мерами самоорганизации служат в первом подходе диссипация и ее функции, а во втором – внутренняя полезная работа и также ее функции. Различие этих подходов, достоинства и недостатки, вскрываемые при их сопоставлении, описаны в монографии [19].

При исследовании процессов самоорганизации необходимо рассмотрение неустойчивых состояний систем и условий фазовых переходов, сопровождающихся процессами диффузии и диссипации энергии. Для описания этих процессов применяют математическое моделирование, например аппарат дифференциальных уравнений [20, 21]. При анализе процессов с участием малого числа молекул применяют аппарат теории вероятности в сочетании с компьютерным моделированием.

Для исследования процессов самоорганизации при фолдинге белков используют



методы физической химии и оптики, т. е. изучают взаимодействие вещества со светом во всем диапазоне длин волн: от рентгеновских лучей до радиоволн. Процессы самоорганизации белков после разрушения их третичной структуры (ренатурация) и их структурообразования представляют особый интерес для таких направлений в науке, как конструирование лекарственных препаратов, молекулярная биоэлектроника, в том числе биомолекулярные роботы, и нанотехнологии [9, 22].

Существует ряд методик для исследования процессов самоорганизации. Рентгенография дает прямую информацию о расположении атомов в молекулярных кристаллах. С помощью данного метода установлена структура некоторых витаминов, а также обнаружена денатурация молекул белков. Данным методом изучают структурообразование белка на молекулярном уровне. Он позволяет обнаруживать решетку дальнего порядка с сильными ковалентными химическими связями [23]. Для систем, не имеющих дальнего порядка, информативность рентгеноструктурных методов снижается.

Синхротронное излучение служит весьма перспективным методом для исследования биологических процессов, связанных с конформационными и другими структурными превращениями на молекулярном и надмолекулярном уровнях [20]. Электрическое поле оказывает воздействие на самые разнообразные процессы, например такие, как фазовые переходы веществ. Оно снижает теплоту испарения воды и повышает скорость теплоотдачи в жидкостях. Под влиянием электрического поля происходит

конформационное превращение в растворе спирального одноцепочечного полинуклеотида в клубковый, причем степень перехода является линейной функцией напряженности поля [24].

Оптические методы позволяют наблюдать за ходом биологических процессов в реальном времени, практически не оказывая на них существенного влияния.

Методика исследования

Самым простым и доступным методом изучения процессов самоорганизации является визуальное (либо аппаратно-регистрируемое) наблюдение за динамикой процесса конденсации белка и его фазовых переходов в неравновесных условиях: в открытой системе «белок – вода», вдали от термодинамического равновесия. Данная методика заключается в испарении воды из коллоидной системы «белок – вода» (дегидратация) с дальнейшей динамической визуализацией процесса конденсации и самоорганизации белка в равновесных и в неравновесных условиях *in vitro*. Коллоидная система «белок – вода» различной природы (альбумин, тромбин) помещается на твердую смачиваемую подложку (стекло) и высушивается в открытой системе при комнатной температуре и атмосферном давлении. Динамика процесса регистрируется с помощью оптического микроскопа и чувствительной ПЗС-камеры.

В результате самоорганизации в пленках водных растворов белков, при их высыхании образуются некоторые воспроизводимые структуры. В зависимости от химического состава раствора того или иного белка, а также условий проведения экспе-

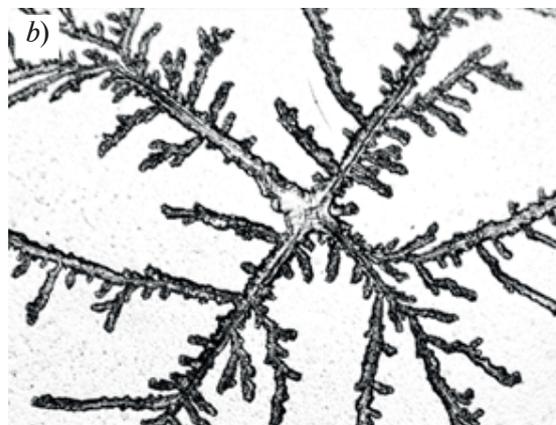


Рис. 1 [9]. Диссипативные структуры, обнаруженные в дегидратированной пленке белка овальбумина: *a* – спирали; *b* – дендриты

римента, данные структуры могут приобретать различную форму и объем. Показано [9], что существует два основных типа структур: спирали и дендриты. На рис. 1 представлены данные типы структур.

В следующем разделе представлены методика получения данных структур и результаты экспериментальных исследований.

Экспериментальные исследования

Эти исследования были направлены на изучение степени влияния условий эксперимента на образование различных структур в пленках белка овальбумина. Рассматривались следующие факторы:

- начальный объем раствора,
- концентрация белка в растворе,
- наличие соли,
- кислотность раствора.

Для экспериментов был выбран яичный альбумин с начальной концентрацией 20 % по массе. Далее были подготовлены различные образцы в соответствии с планом эксперимента. Жидкие образцы объемом 1, 2, 3 и 4 мл помещали в стеклянные чашки

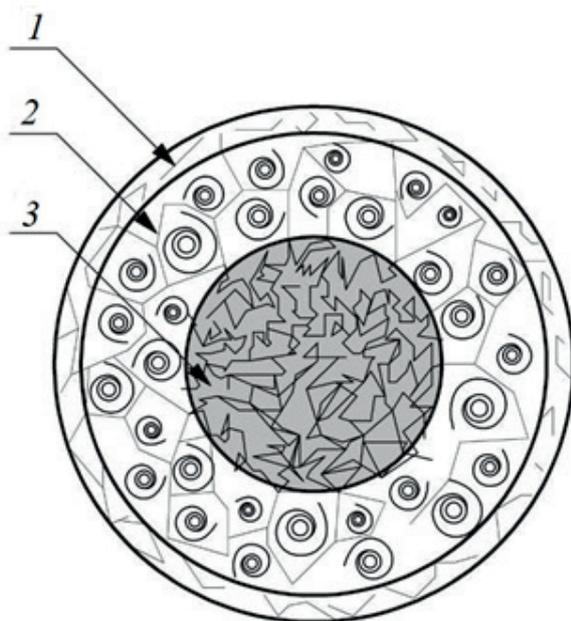


Рис. 2. Схематическое изображение чашки Петри с высушенным образцом яичного альбумина. Показаны различные области пленки:

- 1 – край чашки с солевым остатком;
- 2 – область со спиральными структурами и трещинами;
- 3 – центральная область с трещинами

Петри диаметром 28 мм и подвергали дегидратации в течение 48 ч при температуре 36,6 °С и влажности 20 %. Выбранное значение температуры соответствовало температуре человеческого организма при нормальных условиях. Степень кислотности растворов изменялась с помощью добавления в раствор 99%-ой уксусной кислоты.

Для каждого экспериментального набора было проведено по 8 измерений. Изображения пленок разрешением 896 × 684 пикселей регистрировались с помощью оптического микроскопа и подключенной к нему USB-камеры.

В результате высыхания образцов в чашках Петри образовывались прозрачные пленки белка. В некоторых пленках, в зависимости от их состава и условий эксперимента, формировались различные по виду, форме и размеру структуры. При этом структуры обнаруживались не по всей площади чашки Петри, а лишь в отдельных ее частях (рис. 2). В центре чашки Петри (область 3), в пленке белка формировалось небольшое пятно, содержащее трещины.

Ближе к краю чашки (область 2), в этой пленке образовывалось кольцо из спиральных структур, расположенных на полигональных фрагментах пленки, разделенных трещинами. В этом кольце фрагменты пленки имели меньшую суммарную площадь, чем в центральной области. У края чашки Петри (область 1), наблюдались полусферические трещины с продолговатыми ветвистыми структурами.

Причиной такой локализации являлся вынос коллоидной фазы (частиц) на периферию в процессе испарения воды.

Зависимость структур от концентрации белка. Исследовался характер образования структур в пленках белка альбумина в зависимости от концентрации белка как в исходном водном растворе, так и в растворе хлорида натрия NaCl. При этом использовались образцы объемом 3 мл с различной концентрацией белка в растворе (% по массе): 2,5; 5,0; 10 и 20. Экспериментальные результаты представлены на рис. 3. Видно, что чем выше начальная концентрация белка в водном растворе при постоянном объеме, тем плотнее спиральные структуры в пленке белка. Благодаря калибровке камеры микроскопа, были получены средние геометрические размеры спиралей и самих ячеек. Для спиральных структур длина внешней окружности и площадь составили

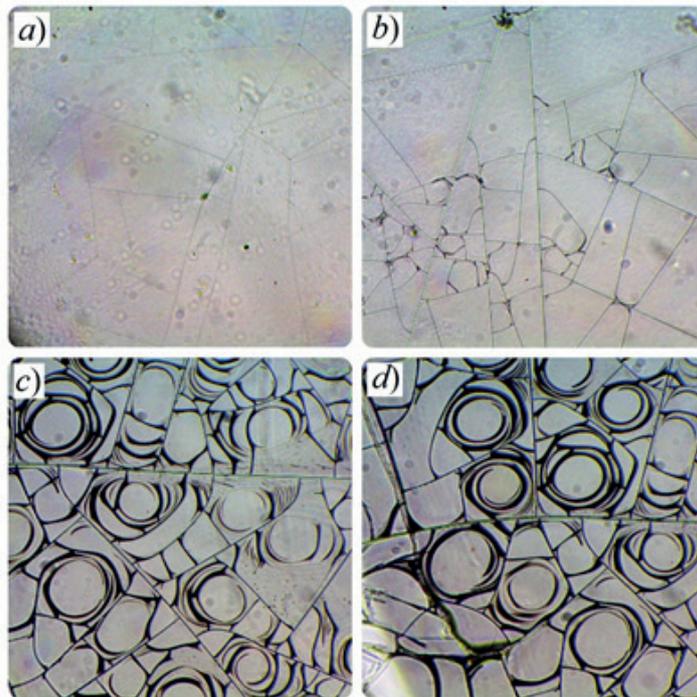


Рис. 3. Изменение структур в пленках овальбумина в зависимости от его концентрации в водном растворе (% по массе): 2,5 (a), 5,0 (b), 10 (c) и 20 (d)

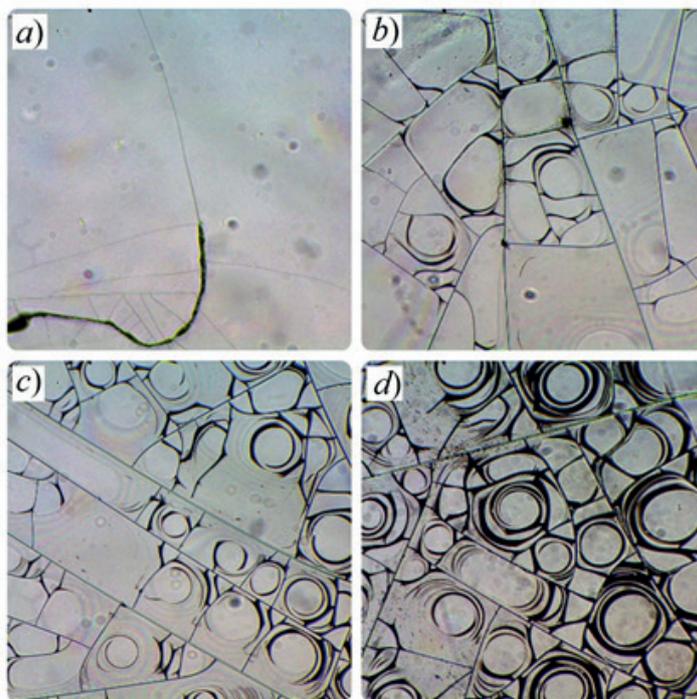


Рис. 4. Изменение структур в пленках овальбумина в зависимости от объема исходного 20%-го водного раствора, мл: 1 (a); 2 (b), 3(c), 4 (d)

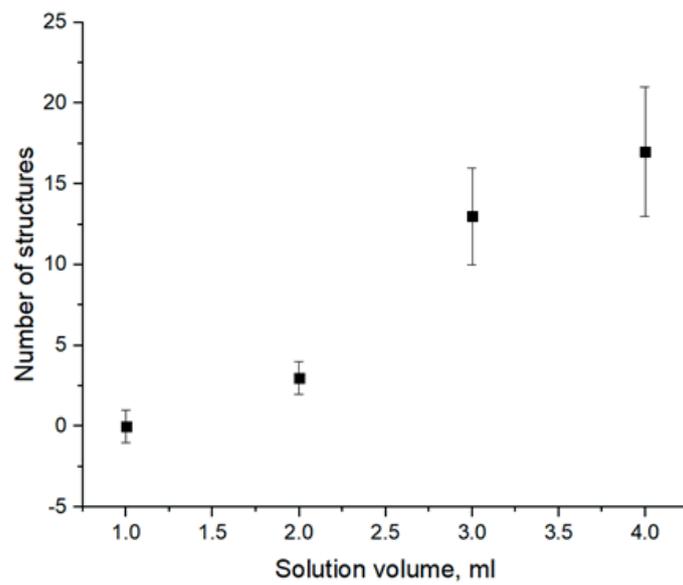


Рис. 5. График зависимости количества образованных структур в пленке овальбумина от объема исходного 20%-го водного раствора

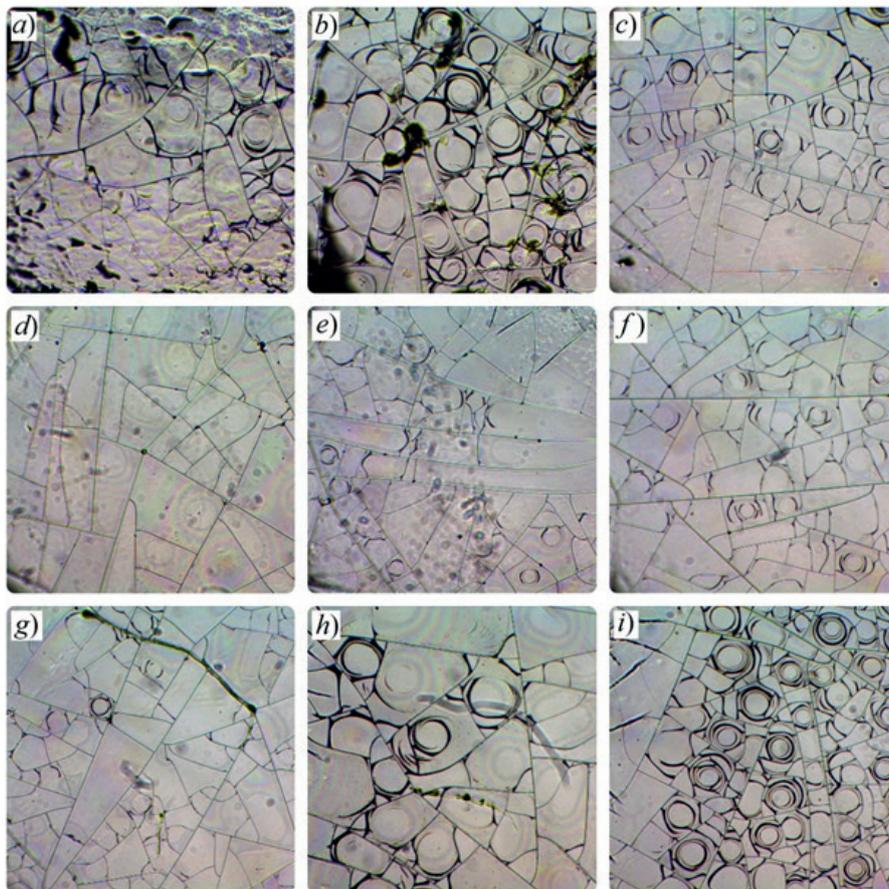


Рис. 6. Изменение структур в пленках овальбумина в зависимости от значения показателя pH исходного водного раствора: 3,0 (a), 4,2 (b), 4,4 (c), 4,8 (d), 5,2 (e), 5,8 (f), 6,2 (g), 7,0 (h), 7,8 (i)

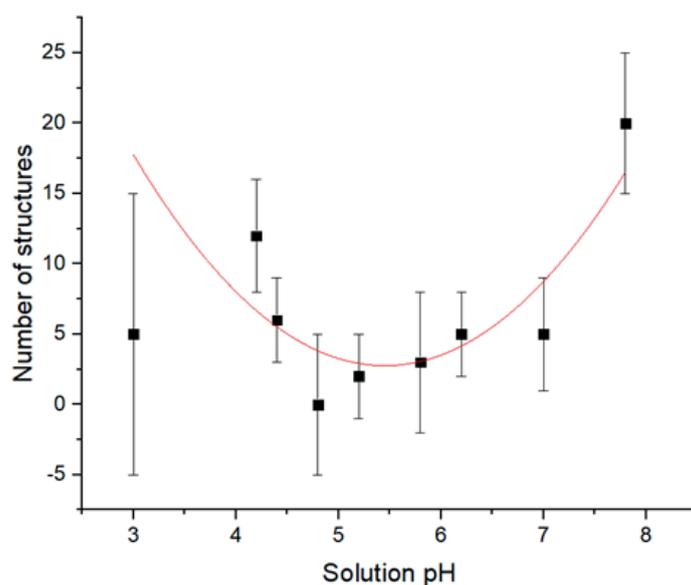


Рис. 7. График зависимости количества структур в пленке белка альбумина от значения pH исходного водного раствора

примерно 180 мкм и 2500 мкм², соответственно. Для самих ячеек эта длина и площадь составили около 200 мкм и 5000 мкм².

Изучен также характер образования структур в пленках овальбумина в зависимости от концентрации белка в сухой пленке. В связи с тем, что измерить либо изменить концентрацию белка в пленке не представлялось возможным, в данных опытах отбирались образцы по признаку начального объема водного раствора. Для эксперимента был выбран 20%-ый раствор. Затем растворы объемом 1, 2, 3 и 4 мл помещались в чашки Петри и подвергались дегидратации в течение 48 ч. Полученные экспериментальные результаты представлены на рис. 4.

Для оценки характера структурирования пленки нами было подсчитано примерное количество образованных структур (одной спирали) на фотографическом изображении пленки. На рис. 5 графически представлен результат такого подсчета.

Из данных рис. 4 и 5 следует, что чем больше исходный объем раствора, тем больше структур по их размеру и количеству образуется в пленке белка. Это, возможно, связано с тем, что в сухой пленке концентрация белка оказывается выше, если объем исходного раствора больше.

Зависимость структур от кислотности раствора. Для данного эксперимента были приготовлены водные растворы белка аль-

бумина с различными значениями водородного показателя pH. С тем, чтобы достичь определенной степени кислотности, в раствор белка добавляли уксусную кислоту. С учетом предыдущего опыта, для данного эксперимента были отобраны образцы объемом 3 мл. На рис. 6 представлены фотографии пленок овальбумина с различными значениями pH исходных водных растворов.

Из данных рис. 6 следует, что чем ближе исходный раствор по значению водородного показателя к 4,8, тем меньше структур образуется в пленке белка альбумина. Кроме того, при сильном сдвиге данного показателя раствора в кислую или щелочную среду от значения 4,8, структуры приобретают вид неправильно сформированных спиралей. Здесь необходимо отметить, что значение pH = 4,8 является изоэлектрической точкой белка (значение pH, при котором суммарный заряд молекул белка равен нулю).

Далее, на рис. 7 представлен график, отражающий количество образованных структур, т. е. количество структур, отнесенное к единице площади, в зависимости от значения pH исходного раствора.

Как видно из графика на рис. 7, при показателях кислотности исходного раствора от 7,0 до 7,8 наблюдается формирование большого количества структур. То же самое происходит и при значениях pH от 3,0 до

4,4. При $pH = 4,8$ наблюдается отсутствие структур. Скорее всего, неспособность образовывать структуры вблизи изоэлектрической точки связана с отсутствием некомпенсированного заряда. Отсюда можно сделать вывод, что способность белка образовывать структуры в дегидратированной пленке непосредственно связана с зарядом белковой молекулы. Несмотря на то, что погрешности выходят за линию тренда, авторы решили оставить эту линию, так как на данном графике приведены только погрешности измерений и не учитываются особенности создания водного раствора белка и проведения дегидратации.

Фактор наличия солей в растворе. Помимо изучения пленок, полученных из чисто водных растворов, было исследовано образование структур в пленках овальбумина из раствора, содержащего хлорид натрия. Для таких опытов были приготовлены растворы белка с различной концентрацией, в которых растворителем служил водный раствор $NaCl$ с концентрацией 0,9% (0,15 М). Экспериментальные образцы объемом 3 мл подвергались дегидратации в течение 8 ч. Результаты эксперимента представлены на рис. 8.

В отличие от структур, которые образуются в пленках, изготовленных из водно-

го раствора, в пленках из водно-солевого раствора образуются так называемые древовидные структуры. При этом чем выше концентрация хлорида натрия в исходном растворе, тем плотнее «ветви». При очень низкой концентрации белка структура «деревьев» нарушается и образуется плотное поле кристаллов. Структуры, приведенные на рис. 9, являются двумерными самоаффинными фракталами. Основное свойство таких структур – инвариантность после одновременного, но количественно разного изменения расстояния вдоль разных направлений в пространстве. Иными словами, в отличие от простого фрактала, самоаффинные фракталы нельзя получить путем простого растяжения самоповторяющихся фракталов, так как отношение величин растяжения в разных направлениях должно зависеть от размера [26].

Однако если еще и еще понижать концентрацию белка в исходных водно-солевых растворах, то наблюдается образование фрактальных структур другого типа. Примеры таких структур представлены на рис. 9. Видно, что структуры при снижении концентрации белка начинают приобретать все более «ветвистый» вид. На рис. 9, *b* виден кристалл хлорида натрия в окружении тонких структур. Для объяснения получен-

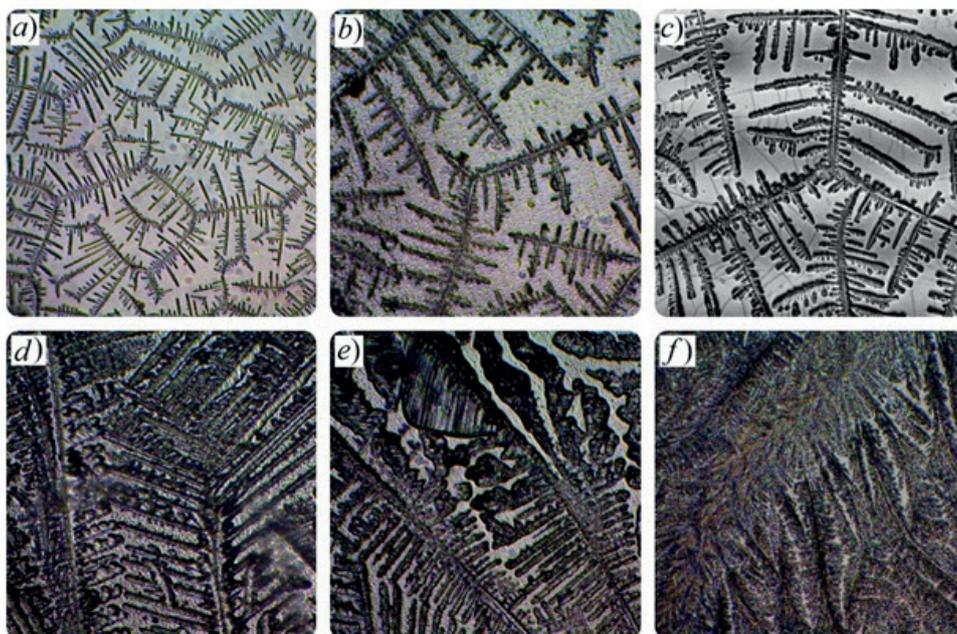


Рис. 8. Изменение картины дендритных структур в пленках овальбумина в зависимости от концентрации белка, %: 10 (*a*), 5 (*b*), 2,5 (*c*), 1,0 (*d*), 0,5 (*e*), 0,1 (*f*).

Пленки получены из водно-солевых растворов (0,1 М $NaCl$)

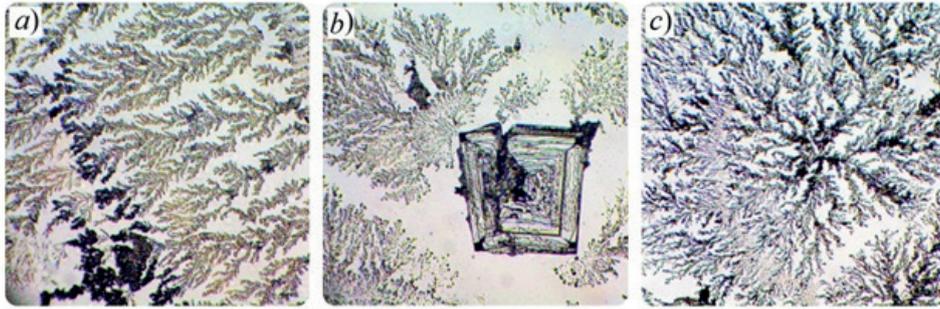


Рис. 9. Изменение картины дендритных структур в пленках овальбумина в зависимости от концентрации белка c_p в исходных водно-солевых растворах (0,15 М NaCl); $c_p = 0,05\%$ (a), $0,02\%$ (b), $0,01\%$ (c)

ных результатов мы привлекли представления виттен-сэндеровской модели. Согласно указанной модели, частицы добавляются одна за другой к одному растущему кластеру. В первоначальной версии агрегационный процесс возникает от неподвижной начальной частицы. Затем агрегат последовательно растет [26]. Структуры, приведенные на рис. 8, относятся к виттен-сэндеровским агрегатам.

Обсуждение результатов

В нашем исследовании рассмотрены некоторые особенности формирования структур в пленках белка овальбумина в процессе его дегидратационной самоорганизации. Экспериментально установлено, что в результате дегидратации и сопутствующего процесса самоорганизации растворов белков преимущественно образуются пленочные пространственные структуры двух типов. Проведено исследование, как влияют на картину образованных структур различные факторы: кислотность раствора белка, наличие в нем хлорида натрия, концентрация белка, а также начальный объем водного раствора. Эксперименты показали, что на структурирование «спиралей» влияют все вышеперечисленные условия. В целом характер самоорганизации белка зависит от общих физико-химических свойств полимерных биомолекул [16]. Однако, чтобы учесть все аспекты проведенных исследований, необходимо проанализировать механизмы взаимодействия белка с водой.

Белковая цепь, как и вода, полярна и тоже имеет суммарный нулевой заряд. Некоторые боковые группы также частично заряжены. Еще более полярными являются заряженные аминокислотные остатки. Как пептидные группы основной цепи, так и

полярные боковые группы действуют как доноры и акцепторы водородных связей. Они могут образовывать связи друг с другом или с молекулами воды; и почти все они создают такие связи, поскольку типичная энергия водородных связей составляет 5 ккал/моль, что существенно выше энергии теплового движения.

Если внутримолекулярная связь между донором и акцептором водородной связи в белке создается в водной среде, то она заменяет две водородные связи белка молекулами воды, но при этом создается одно звено между молекулами выделенной воды.

С термодинамической точки зрения, энергетический баланс рассматриваемой реакции близок к нулю, поскольку количество водородных связей не изменилось [16]. Однако в целом энтропия воды возрастает, поскольку вода больше не связана с белковой цепью, а молекулы с Н-связью могут двигаться произвольно.

Рассмотрим так называемый гидрофобный эффект. В белках есть много аминокислот с углеводородными боковыми группами, которые образуют гидрофобное ядро белковой глобулы. Гидрофобный эффект играет очень важную роль в поддержании стабильности структуры белка. Именно благодаря ему белковая цепь превращается в компактную плотную глобулу. «Затвердеванию» противопоставляется энтропия вращений и перемещений молекул в жидкости. Это связано с тем, что в жидкости каждая молекула располагается более или менее свободно, а в твердом теле она «зажимается» кристаллической решеткой. Собственно говоря, энтропия смещений молекулы не зависит от ее размера, в отличие от энтальпии, которая растет с увеличением числа контактов одной молекулы с другими.

В белковой цепи роль энтропии смещения меньше, так как аминокислотные остатки связаны цепью, то есть они не могут двигаться независимо друг от друга, и это помогает белку «затвердевать».

Гидрофобный эффект лежит в основе 90%-ой работы по созданию белковой глобулы. Но он сам не может создать собственный «твердый» белок. Он создает только жидкую глобулу белка. Исходя из этого, можно заключить, что для изучения процессов самоорганизации белков *in vitro* необходимо за основу брать водные растворы белков. Однако для достижения правильной самосборки белка необходимо выдерживать его концентрацию в определенном диапазоне [16].

Как уже было показано (и подтверждено нашими опытами), содержание воды влияет на структуру белков, а структура в свою очередь отвечает за функциональность белка. Таким образом, если известно влияние концентрации белков в водных растворах на образование структур при их дегидратации, то можно правильно оценивать функциональность белков при дегидратации сложных биологических жидкостей в медицинской диагностике.

Заключение

В настоящей работе проведены экспериментальные исследования, направленные на выявление зависимости размеров и формы структур в белковых пленках от условий проведения эксперимента.

Анализ результатов проведенных экспериментов позволяет сделать следующие выводы.

На образование спиральных структур су-

щественное влияние оказывает кислотность исходного раствора и концентрация белка в растворе.

Установлено, что для достижения стабильных структур в пленках белка альбумина необходима кислотность, существенно отличная от изоэлектрической точки данного белка, а также не критически кислая или щелочная. Значение водородного показателя pH раствора должно быть меньше 3,0 или больше 8,0.

Установлены конкретные значения параметров в условиях проведения экспериментов. Так, для образования плотных структур требуется достаточно большой объем начального раствора: 3 – 4 мл для чашки Петри 28 мм, т. е. толщина пленки в жидкой фазе должна составлять минимум 4 – 5 мм.

Стоит отметить, что процессы самоорганизации способны протекать в образцах с самым незначительным объемом. Однако диссипативные структуры обнаружить в таких образцах крайне сложно.

В дальнейшем предполагается выполнить количественные исследования структур, образующихся в пленках белков, в том числе при вариации значений водородного показателя солевых растворов; измерения геометрических параметров структур, определение соответствия данных параметров условиям проведения экспериментов по дегидратационной самоорганизации.

Данная статья подготовлена при финансовой поддержке Фонда РФФИ, грант № 19-32-90130. Авторы выражают благодарность А.Н. Скворцову за помощь в вопросах биофизики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bordag M., Klimchitskaya G.L., Mohideen U., Mostepanenko V.M. Advances in the Casimir effect. Oxford: OUP Oxford. Int. Ser. Monogr. Phys. Vol. 145. 2009. 749 p.
2. Baranov M.A., Klimchitskaya G.L., Mostepanenko V.M., Velichko E.N. Fluctuation-induced free energy of thin peptide films // Physical Review. E. 2019. Vol. 99. No. 2. P. 022410.
3. Karki S., Kim H., Na S.J., Shin D.J.K., Lee J. Thin films as an emerging platform for drug delivery // Asian Journal of Pharmaceutical Sciences. 2016. Vol. 11. No. 5. Pp. 559–574.
4. Piedade A.P., Romeu F., Branco R.,

- Morais P.V. Thin films for medical and environmental applications // Thin Film Synthesis and Application for Medical and Biological Use. IntechOpen, 2018. DOI: 10.5772/intechopen.80021.
5. Yoshimura T. Thin-film organic photonics: molecular layer deposition and applications. London, New York: CRC Press, 2016. 370 p.
6. Малышко Е.В., Твердислов В.А. Хиральность, структурные иерархии и фолдинг белков // Междунар. научн. конф. «Молекулярные, мембранные и клеточные основы функционирования биосистем». г. Минск, Беларусь, 27-29 июня 2018 года



2018. С. 29–29.

7. Fukuda K., Takeda Y., Yoshimura Y., Shiwaku R., Tran L.T., Sekine T., Tokito S. Fully-printed high-performance organic thin-film transistors and circuitry on one-micron-thick polymer films // Nature Communications. 2014. Vol. 5. P. 4147.

8. Aggeli V.A., Bell M., Boden N., Keen J.N., Knowles P.F., McLeish T.C.B., Radford S.E. Responsive gels formed by the spontaneous self-assembly of peptides into polymeric β -sheet tapes // Nature. 1997. Vol. 386. No. 6622. Pp. 259–262.

9. Рапис Е. Самоорганизация и супермолекулярная химия пленки белка от нано- до макромасштаба // Журнал технической физики. 2004. Т. 74. № 4. С. 117–122.

10. Яхно Т.А., Яхно В.Г., Санин А.Г., Санина О.А., Пелюшенко А.С. Белок и соль: пространственно-временные события в высыхающей капле // Журнал технической физики. 2004. Т. 74. № 8. С. 100–108.

11. Яхно Т.А. Кристаллизация хлорида натрия из высыхающих капель белково-солевых растворов с разным содержанием белка // Журнал технической физики. 2015. Т. 85. № 11. С. 30–37.

12. Wakamatsu T. Forward-light-scattering characterization of pre-crystalline aggregates in crystallizing lysozyme solutions // American Journal of Analytical Chemistry. 2014. Vol. 5. No. 9. Pp. 581–582.

13. Краевой С.А., Колтовой Н.А. Диагностика по капле крови. Кристаллизация биожилокостей. Книга 1. Кристаллизация сыворотки крови методом открытой капли (угловая дегидратация). Версия 6.0. Москва, Смоленск. 2016. 321 с.

14. Shabalin V.N., Shatokhina S.N. Diagnostic markers in the structures of human biological liquids // Singapore Medical Journal. 2007. Vol. 48. No. 5. Pp. 440–442.

15. Усыченко В.Г. Самоорганизация электронов в электронных приборах // Журнал технической физики. 2004. Т. 74. № 11.

С. 38–46.

16. Финкельштейн А.В., Птицын О.Б. Физика белка: курс лекций. М.: Книжный дом «Университет», 2002. 365 с.

17. Пригожин И., Стенгерс И. Порядок из хаоса. Новый диалог человека с природой. М.: Прогресс, 1986. 432 с.

18. Руденко А.П. Самоорганизация и синергетика // Сложные системы. 2013. № 2. С. 4–39.

19. Щербаков А.С. Самоорганизация материи в неживой природе: философские аспекты синергетики. М.: Изд-во МГУ, 1990. 110 с.

20. Денисевич А.А., Ляпцев А.В. Компьютерное моделирование процессов самоорганизации. Структуры в одномерной цепочке шаров // Компьютерные инструменты в образовании. 2018. № 4. С. 27–34.

21. Ляпцев А.В., Денисевич А.А. Компьютерное моделирование процессов самоорганизации. Аналогия с ячейками Бенара // Компьютерные инструменты в образовании. 2017. № 1. С. 38–44.

22. Величко Е.Н., Цыбин О.Ю. Биомолекулярная электроника. Введение. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2011. 256 с.

23. Рапис Е.Г. Самосборка кластерных пленок белка в процессе конденсации (аллотропная неравновесная некристаллическая его форма) // Журнал технической физики. 2000. Т. 70. № 1. С. 122–133.

24. Bandman O.L. Implementation of large-scale cellular automata models on multicore computers and clusters. High performance computing and simulation (HPCS) // 2013 Int. Conf. IEEE Conference Publications. 2013. Vol. 1. Pp. 304–310.

25. Яхно Т.А., Яхно В.Г. Основы структурной эволюции высыхающих капель биологических жидкостей // Журнал технической физики. 2009. Т. 79. Вып. 8. С. 133–141.

26. Жюльен Р. Фрактальные агрегаты // Успехи физических наук. 1989. Т. 157. № 2. С. 339–357.

Статья поступила в редакцию 14.10.2019, принята к публикации 30.10.2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

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

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
baranovma1993@gmail.com

ВЕЛИЧКО Елена Николаевна – кандидат технических наук, доцент, директор Высшей

школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого. Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
velichko-spbstu@yandex.ru

РОЗОВ Сергей Владимирович – кандидат технических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
svroz@yandex.ru

REFERENCES

1. **Bordag M., Klimchitskaya G.L., Mohideen U., Mostepanenko V.M.**, Advances in the Casimir effect, OUP Oxford, 2009, Vol. 145.
2. **Baranov M.A., Klimchitskaya G.L., Mostepanenko V.M., Velichko E.N.**, Fluctuation-induced free energy of thin peptide films, Physical Review E. 99 (2) (2019) 022410.
3. **Karki S., Kim H., Na S.J., et al.**, Thin films as an emerging platform for drug delivery, Asian Journal of Pharmaceutical Sciences. 11 (5) (2016) 559–574.
4. **Piedade A.P., Romeu F., Branco R., Morais P.V.**, Thin films for medical and environmental applications, Thin Film Synthesis and Application for Medical and Biological Use, IntechOpen, 2018.
5. **Yoshimura T.**, Thin-film organic photonics: molecular layer deposition and applications, CRC Press, 2016.
6. **Malyshko E.V., Tverdislov V.A.**, Khiralnost, strukturnyye iyerarkhii i folding belkov [Chirality, structural hierarchy and protein folding], Report at Intern. Conf. "Molecular, membrane and cell basics of functioning of bio systems", Minsk, Belarus, June 27–29, 2018.
7. **Fukuda K., Takeda Y., Yoshimura Y., et al.**, Fully-printed high-performance organic thin-film transistors and circuitry on one-micron-thick polymer films, Nature Communications. 5 (2014) 4147.
8. **Aggeli B.A., Bell M., Boden N., et al.**, Responsive gels formed by the spontaneous self-assembly of peptides into polymeric β -sheet tapes, Nature. 386 (6622) (1997) 259–262.
9. **Rapis E.**, Self-organization and supramolecular chemistry of protein films from the nano- to the macroscale, Technical Physics. 48 (4) (2004) 494–498.
10. **Yakhno T.A., Yakhno V.G., Sanin A.G., et al.**, Protein and salt: Spatiotemporal dynamics of events in a drying drop, Technical Physics. 49 (8) (2004) 1055–1063.
11. **Yakhno T.A.**, Sodium chloride crystallization from drying drops of albumin-salt solutions with different albumin concentrations, Technical Physics. 60 (11) (2015) 1601–1608.
12. **Wakamatsu T.**, Forward-light-scattering characterization of pre-crystalline aggregates in crystallizing lysozyme solutions, American Journal of Analytical Chemistry. 5 (9) (2014) 581–582.
13. **Krayevoy S.A., Koltovoy N.A.**, Diagnostika po kaple krovi. Kristallizatsiya biozhidkostey. Kniga 1. Kristallizatsiya syvorotki krovi metodom otkrytoy kapli (uglovaya degidratatsiya) [Blood drop diagnostics. Crystallization of biofluids, Book 1: Crystallization of blood serum by an open drop procedure (angular dehydration)]. Version 6.0, Moscow, Smolensk (2016) 321.
14. **Shabalin V.N., Shatokhina S.N.**, Diagnostic markers in the structures of human biological liquids, Singapore Medical Journal. 48 (5) (2007) 440–442.
15. **Usychenko V.G.**, Electron self-organization in electronic devices // Technical Physics. 49 (11) (2004) 1431–1440.
16. **Finkelshteyn A.V., Ptitsyn O.B.**, Fizika belka: kurs lektsiy [Protein physics. Lecture course], Knizhnyy Dom "Universitet", Moscow, 2002.
17. **Prigogine I., Stengers I.**, Order out of chaos: Man's new dialogue with nature, Verso Books, 2018.
18. **Rudenko A.P.**, Samoorganizatsiya i sinergetika [Self-organization and synergetics], Slozhnyye Sistemy ("Complex Systems" - Russian journal). (2) (2013) 4–39.
19. **Shcherbakov A.S.**, Samoorganizatsiya materii v nezshivoy prirode: Filosofskiye aspekty sinergetiki [Self-organization of matter in the inanimate nature: Philosophical aspects of synergetics], Moscow University Publishing, Moscow, 1990.
20. **Denisevich A.A., Liapzev A.V.**, Computer simulation of processes of self-organization. Structures in a chain of colliding balls, Computer Tools in Education. (4) (2018) 27–34.



21. **Liapzev A.V., Denisevich A.A.**, Computer modelling of processes of self-organization. Analogy to Benar's cells, *Computer Tools in Education*. (1) (2017) 38–44.
22. **Velichko E.N., Tsybin O.Yu.**, *Biomolekulyarnaya elektronika. Vvedeniye [Biomolecular electronics. Introduction]*, Polytechnical University Publishing, St. Petersburg, 2011.
23. **Rapis E.G.**, Self-assembly of cluster protein films (allotropic nonequilibrium noncrystalline modification) during the process or their condensation, *Technical Physics*. 45 (1) (2000) 121–131.
24. **Bandman O.L.**, Implementation of large-scale cellular automata models on multicore computers and clusters. High performance computing and simulation (HPCS), 2013 Int. Conf. IEEE Conference Publications. 5 (2013) 304–310.
25. **Yakhno T.A., Yakhno V.G.**, Structural evolution of drying drops of biological fluids, *Technical Physics*. 54 (8) (2009) 1219–1227.
26. **Jullien R.**, Fractal aggregates, *Comm. Cond. Mat. Phys. (Comm. Mod. Phys. Pt. B)*. 13 (4) (1987) 177–205 (*Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, 1989).

Received 14.10.2019, accepted 30.10.2019.

THE AUTHORS

BARANOV Maksim A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
baranovma1993@gmail.com

VELICHKO Elena N.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
velichko-spbstu@yandex.ru

ROZOV Sergey V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
svroz@yandex.ru

DOI: 10.18721/JPM.12404

УДК 538.915+975; 544.22.022.343; 544.225.22+25

ЭЛАСТОПРОВОДИМОСТЬ СИЛИЦЕНОВЫХ И ГЕРМАНЕНОВЫХ НАНОЛЕНТ

О.С. Лебедева^{1,2}, Н.Г. Лебедев¹, И.А. Ляпкосова²

¹ Волгоградский государственный университет, г. Волгоград, Российская Федерация;

² Волгоградский государственный аграрный университет,
г. Волгоград, Российская Федерация

Представлены результаты теоретического исследования пьезорезистивных свойств идеальных силиценовых и германеновых нанолент с разным типом проводимости. В рамках модели Хаббарда проведено моделирование зонной структуры исследуемых наночастиц и аналитический расчет продольной компоненты тензора эластопроводимости, а также исследованы его зависимости от величины относительной деформации продольного сжатия (растяжения) и ширины наноленты.

Ключевые слова: двумерная структура, силицен, германен, напряженно-деформированное состояние, пьезорезистивный эффект

Ссылка при цитировании: Лебедева О.С., Лебедев Н.Г., Ляпкосова И.А. Эластопроводимость силиценовых и германеновых нанолент // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 38–49. DOI: 10.18721/JPM.12404

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

ELASTIC CONDUCTIVITY OF SILICENE AND GERMANENE NANORIBBONS

O.S. Lebedeva^{1,2}, N.G. Lebedev¹, I.A. Lyapkosova²

¹ Volgograd State University, Volgograd, Russian Federation;

² Volgograd State Agricultural University, Volgograd, Russian Federation

The theoretical research results for piezoresistive properties of ideal silicene and germanene nanoribbons with different conductivity types have been presented. Within the framework of the Hubbard model, the band structure of the nanoparticles under investigation was simulated and a longitudinal component of their elastoconductivity tensor was analytically calculated. For this tensor, the dependences on the relative strain of longitudinal compression/tension as well on the nanoribbon width were studied.

Keywords: 2D structure, silicene, germanene, stress-strain state, piezoresistive effect, elastoconductivity tensor

Citation: Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A., Elastic conductivity of silicene and germanene nanoribbons, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (4) (2019) 38–49. DOI: 10.18721/JPM.12404

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

Введение

Синтезированные в 2004 году новые наноструктуры на основе углерода, такие как графен и графеновые наноленты, зарекомендовали себя как материалы, обладающие уникальным набором физико-химических свойств, которые можно использовать в широком круге прикладных задач [1 – 4]. Электронные характеристики графена различаются и зависят от природы и концентрации дефектов структуры, атомов и атомных групп, адсорбированных на его поверхность. В настоящее время графен является одним из основных кандидатов на элементы наноэлектроники будущего, взамен кремния. Основное препятствие для широкого использования графена в электронике связано с его зонной структурой – для него характерна малая запрещенная зона; на ее расширение направлены главные усилия исследователей.

В 1994 году предсказан теоретически, а в 2010 году впервые синтезирован родственный графену материал – силицен, представляющий собой двумерный слой из атомов кремния, составляющих две подрешетки, которые смещены относительно друг друга [5]. Шириной запрещенной зоны можно управлять с помощью электрического поля, что открывает возможность создания эффективного спинового поляризатора на его основе. Этот материал привлекает большое внимание в связи с перспективами практического применения в кремниевой электронике и спинтронике.

В 2014 году синтезирован еще один материал, родственный графену, – германен, который, подобно силицену, имеет две атомные подрешетки, смещенные относительно друг друга. Малая запрещенная щель германена поддается управлению электрическим полем, адсорбцией различных атомов, деформацией и взаимодействием с подложкой [6, 7]. Германен обладает большими потенциальными возможностями применения в солнечных элементах [8]. Рассчитанный параметр Грюнайзена нового материала показывает зависимость от деформации, аналогичную таковой для силицена [9].

В работе [10] методом теории функционала плотности проведено сравнительное исследование механических свойств однослойных силицена, германена и стана. Показано, что применение одноосной нагрузки на каждый материал может

изменить электронную природу изогнутой структуры полупроводника на металлический характер.

В статье [11] исследованы оптические свойства силицена и германена при одноосной деформации сжатия в рамках теории функционала плотности. Результаты показывают, что отклик оптического поля сильно зависит от величины приложенной нагрузки. При деформации сжатия в силицене и германене ширина энергетической щели в точках Дирака снижается и в конечном итоге достигает нуля. В обеих структурах поглощение света вдоль зигзагообразного направления больше, чем в направлении кресла.

В последние десятилетия сформировалось новое научное направление физики конденсированного состояния – стрейнтроника. Она использует физические явления в веществе, обусловленные деформациями, возникающими в микро-, нано- и гетероструктурах под действием внешних управляющих полей, приводящих к изменению электронного строения этого вещества, и, как следствие, к модификации его электрических, магнитных, оптических и других свойств [12]. Подобные эффекты позволяют реализовать новое поколение устройств информационных и сенсорных технологий. Например, в работе [13] анонсирована разработка транзистора на базе графена, который претерпевает деформационное изменение баллистической проводимости (эффект пьезопроводимости). Подобные транзисторы могут быть разработаны также на базе германена и силицена, деформационные эффекты в которых находятся на стадии изучения.

В данной работе представлены результаты теоретического исследования пьезорезистивных свойств идеальных силиценовых (Si) и германеновых (Ge) нанолент (NR) – SiNR и GeNR.

Модель электронного строения деформированных графеновых нанолент

В качестве геометрической модели наноленты выбирался двумерный гексагональный графеновый слой. Фрагмент такой кристаллической структуры изображен на рис. 1, на котором обозначены хиральный вектор

$$C_h = na_1 + ma_2,$$

угол α между векторами основных трансляций \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 , а также векторы межатомных расстояний Δ_i .

Система координат выбрана таким образом, что вдоль оси OX с помощью хирального вектора \mathbf{C}_h отмеряется ширина ленты, а ось OY направлена вдоль длины ленты. Угол θ между векторами \mathbf{C}_h и \mathbf{a}_1 отсчитывается от вектора трансляции \mathbf{a}_1 , лежит в диапазоне от 0 до 30° и называется хиральным углом [4].

Математическая модель электронного строения недеформированных нанолент строится на основе их геометрического строения и зонной структуры гексагонального слоя. Общий вид зонной структуры нанолент в рамках метода сильной связи в приближениях Хюккеля и ближайших соседей можно представить в следующем виде [4]:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) = & \pm\gamma_0 \left\{ 3 + 2\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_1) + \right. \\ & \left. + 2\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_2) + 2\cos(\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)) \right\}^{1/2} = \\ = & \pm\gamma_0 \left\{ 1 + 4\cos\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}{2}\right) \times \right. \\ & \times \cos\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2}\right) + \\ & \left. + 4\cos^2\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2}\right) \right\}^{1/2}, \end{aligned} \quad (1)$$

где γ_0 – прыжковый интеграл, матричный элемент перехода электрона между соседними атомами; \mathbf{k} – волновой вектор, одна из компонент которого квантуется вдоль ширины ленты.

Уровень Ферми в законе дисперсии (1) принят за 0 эВ.

Условие квантования волнового вектора \mathbf{k} вдоль направления хирального вектора \mathbf{C}_h можно записать следующим образом [4]:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{C}_h = 2\pi q, \quad q = 1, 2, \dots \quad (2)$$

Компоненты волнового вектора k_x и k_y целесообразно выбрать так, чтобы они были сонаправлены с хиральным вектором \mathbf{C}_h и длиной наноленты соответственно, т. е.

$$\mathbf{k}_x \uparrow \uparrow \mathbf{C}_h, \quad \mathbf{k}_y \perp \mathbf{C}_h.$$

Модуль хирального вектора недеформированных нанолент можно представить, в соответствии с его определением, в следующем известном виде [1]:

$$\begin{aligned} |\mathbf{C}_{h0}| = & \sqrt{n \cdot \mathbf{a}_1^2 + m \cdot \mathbf{a}_2^2 + 2nm\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2} = \\ = & a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}. \end{aligned} \quad (3)$$

С помощью представления (3) и условий (2) можно получить явное выражение для квантования поперечной компоненты волнового вектора:

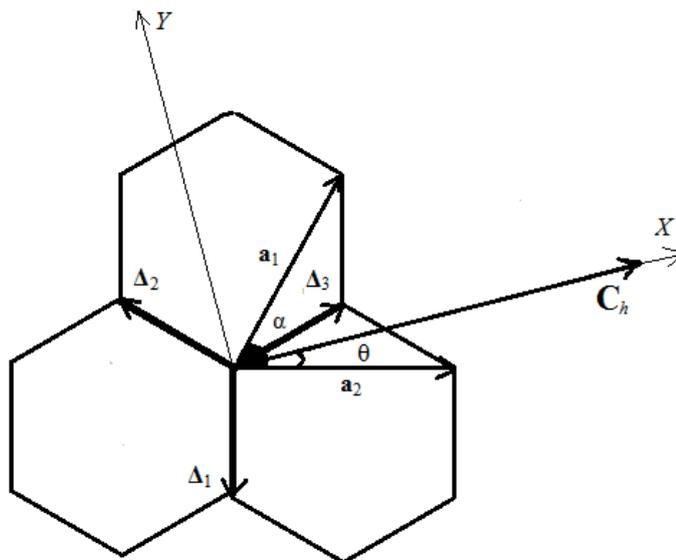


Рис. 1. Фрагмент структуры наноленты с выбранной системой координат: $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3$ – векторы расстояний между ближайшими соседями; $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ – векторы трансляций; α – угол между векторами трансляций; θ – хиральный угол; \mathbf{C}_h – хиральный вектор

$$k_x a = \frac{2\pi q}{\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}, \quad (4)$$

$$q = 1, 2, \dots, \left[\sqrt{n^2 + m^2 + nm} \right].$$

Аргументы тригонометрических функций в выражении для зонной структуры (1), исходя из геометрических преобразований, соответствующих рис. 1, можно записать в следующем виде:

$$\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}{2} = \left(\frac{1}{\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \times \right. \\ \left. \times \left(\frac{3\pi q(n+m)}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} + \frac{\sqrt{3}k_y a(n-m)}{4} \right) \right), \quad (5)$$

$$\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2} = \left(\frac{1}{\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \times \right. \\ \left. \times \left(\frac{\pi q(n-m)}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} - \frac{\sqrt{3}k_y a(n+m)}{4} \right) \right).$$

В результате выражение (1) и соотношения (5) полностью определяют энергетический спектр электронов недеформированных нанолент. Согласно теории электронного строения графеновых нанолент [4], набор дисперсионных кривых электронного спектра, нумеруемых целым числом q ,

образуется путем пересечения двумерной энергетической поверхности графена параллельными плоскостями, соответствующими непрерывной компоненте волнового вектора. Положение указанных плоскостей относительно зоны Бриллюэна задается значением дискретной k_x -компоненты волнового вектора (согласно условию квантования (2)).

Деформированное состояние кристаллита в общем случае характеризуется тензором дисторсии

$$u_{\mu\eta} = \partial_\eta (\mathbf{r}' - \mathbf{r})_\mu, \quad (\mu, \eta = x, y, z),$$

где \mathbf{r}, \mathbf{r}' – радиус-векторы начального и конечного положения некоторой точки кристаллита [14].

Диагональные элементы тензора характеризуют относительное удлинение образца вдоль соответствующего направления, недиагональные элементы задают угол поворота линейного элемента при деформации.

В соответствии с определением тензора дисторсии, вывод энергетического спектра деформированных нанолент основывается на модификации скалярных произведений, стоящих в аргументах тригонометрических функций в выражении (1) для электронного спектра. Изменение элементарной ячейки наноленты под действием нагрузки растяжения показано на рис. 2. Здесь демонстрируются модельные представления о том, что

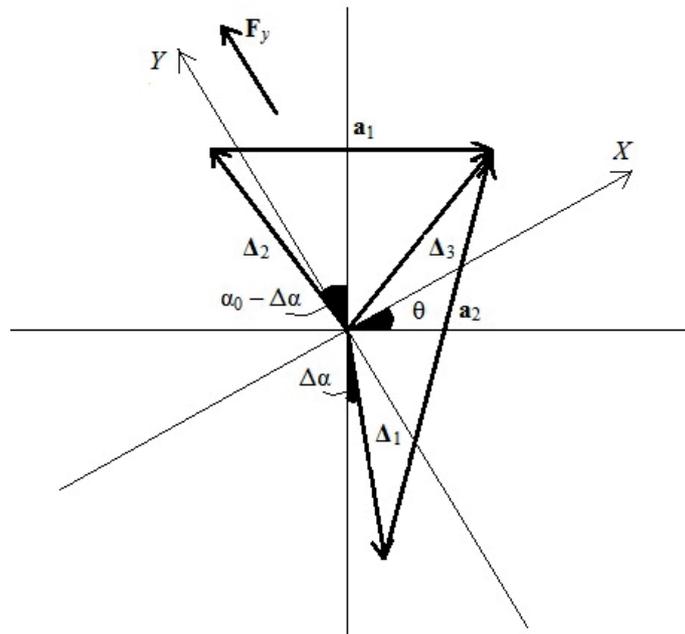


Рис. 2. Положения межатомных векторов $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3$ после деформации растяжения (сжатия) с учетом их поворота на угол $\Delta\alpha$; F_y – растягивающая (сжимающая) сила. Остальные обозначения указаны в подписи к рис. 1

вследствие деформации происходит изменение не только длин межатомных связей Δ_i ($\Delta_i = R_0(1 + \delta)$) на величину их относительного удлинения δ ($\delta = \Delta R/R_0$), но и угла α между векторами трансляций ($\alpha = \alpha_0 + \Delta\alpha$, где $\alpha_0 = \pi/3$ – угол между векторами трансляций в недеформированной решетке, $\Delta\alpha$ – величина изменения угла вследствие деформации), а следовательно, проекций векторов трансляций \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 на оси OX и OY выбранной системы координат.

Выражение для зонной структуры деформированных нанолент можно получить, исходя из геометрических преобразований (см. рис. 2). В результате электронный спектр таких нанолент в рамках метода сильной связи примет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) = & \pm \gamma (1 + 4 \cos[\pi n A_1 + B_1]) \times \\ & \times \cos[\pi n A_2 - B_2] + \\ & + 4 \cos^2[\pi n A_2 - B_2]^{1/2}, \end{aligned} \quad (6)$$

где введены следующие обозначения для общего случая:

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{F \cos \alpha + G \sin \alpha}{A \cos \alpha + B \sin \alpha}, \\ B_1 &= k_y R_0 (1 + \delta) (-G \cos \alpha + F \sin \alpha), \\ A_2 &= \frac{-E \cos \alpha}{A \cos \alpha + B \sin \alpha}, \\ B_2 &= k_y R_0 (1 + \delta) E \sin \alpha, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} A &= n \sin \theta \cos(2\alpha_0) + m \cos \theta \cos(\alpha_0/2), \\ B &= \sin \theta [n \sin(2\alpha_0) + m \cos(\alpha_0/2)], \\ E &= \sin \theta \sin(\alpha_0/2) + \cos \theta \cos(\alpha_0/2), \\ F &= \sin \theta \cos(2\alpha_0) + \cos \theta \cos(\alpha_0/2), \\ G &= \sin \theta [\sin(2\alpha_0) + \cos(\alpha_0/2)]. \end{aligned}$$

Изменение поперечных размеров (ширины) наноленты в результате деформации учитывается путем модификации модуля хирального вектора C_h , который, в соответствии с определением коэффициента Пуассона и прямой пропорциональности основных геометрических размеров нанотрубок параметрам решетки, можно считать по следующей формуле:

$$C_h = (1 - \nu \cdot \delta) C_{h0}, \quad (8)$$

где ν – коэффициент Пуассона, значение которого варьируется в пределах $\nu = 0,19 - 0,27$.

Соотношение (8) и выбранная геометрическая модель деформированных нанолент позволяют определить угол α между векторами трансляций в деформированной гексагональной решетке, входящий в выражения для коэффициентов (7) спектра нанолент (6):

$$\sin \alpha = \frac{BC + A\sqrt{B^2 - C^2 + A^2}}{A^2 + B^2}, \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} C = \frac{1 - \nu \delta}{1 + \delta} \left[\sin \theta (n \cos \alpha_0 + m \cos^2(\alpha_0/2)) + \right. \\ \left. + \frac{m}{2} \cos \theta \sin \alpha_0 \right], \end{aligned}$$

а коэффициенты A и B выражаются формулой (8).

Методика вычисления зависимости прыжкового интеграла γ от относительной деформации δ на примере углеродных нанотрубок подробно описана в работах [15 – 18].

Для теоретических расчетов в настоящей работе использованы следующие значения относительной деформации растяжения (сжатия):

$$\delta = \pm 0,035; \pm 0,069; \pm 0,104; +0,250.$$

Нахождение зонной структуры идеальных наночастиц с учетом эффектов рассеяния, например кулоновского взаимодействия электронов на одном узле, сводится к нахождению полюсов функций Грина [19] в рамках модели Хаббарда [20], что описано в работе [17] для случая ахиральных углеродных нанотрубок.

Тогда электронный спектр деформированной наноленты можно представить в виде

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} [\varepsilon(\mathbf{k}) + U \pm \\ \pm (\varepsilon(\mathbf{k})^2 - 2\varepsilon(\mathbf{k})U(1 - 2n_{-B}) + U^2)^{1/2}], \end{aligned} \quad (10)$$

где $\varepsilon(\mathbf{k})$ – зонная структура деформированных идеальных нанолент, выраженная формулой (6); U – энергия кулоновского взаимодействия электронов на одном узле, которую можно оценить, например, с

помощью квантово-химического полуэмпирического метода MNDO [21]; $n_{-\beta}$ – число уже имеющихся в зоне электронов с противоположным спином.

Принципиальных качественных различий полученных зонных структур полупроводниковых нанолент SiNR и GeNR кресельного типа, по сравнению с энергетическим спектром недеформированных нанолент, не наблюдается. Количественный анализ показывает сужение зоны проводимости, валентной и запрещенной зон, приводящее к увеличению плотности электронных состояний в случае сжатия и, наоборот, уширение указанных зон (уменьшение плотности состояний) при деформации растяжения. Подобный результат наблюдался и в случае деформации ахиральных (кресельных и зигзагообразных), а также ахиральных углеродных нанотрубок, изученных в работах [15 – 18].

В случае проводящих кресельных и зигзагообразных нанолент SiNR и GeNR продольное растяжение (сжатие) также изменяет их зонную структуру вышеописанным способом и принципиально не отличается от кресельных нанолент. Но следует отметить одно исключение: энергетическая щель в таких нанолентах отсутствует и при малых деформациях не открывается. Открытие щели путем деформации структуры наблюдается в смешанных нанолентах, так же как в случае хиральных углеродных нанотрубок [23], в которых становятся возможными переходы моттовского типа проводник \rightarrow полупроводник и полупроводник \rightarrow проводник, обусловленные осевыми деформациями растяжения (сжатия).

Эластопроводимость нанолент

Расчет пьезорезистивных констант, в частности продольной компоненты тензора эластопроводимости нанолент, осуществлялся по методике, подробно описанной в работах [15 – 17]. В соответствии с определением тензора эластопроводимости [22], его продольную компоненту для квазиодномерных структур можно выразить следующей формулой:

$$M = \frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} \frac{1}{\delta}, \quad (11)$$

где M – продольная компонента тензора эластопроводимости 4-го ранга ($M = m_{zzzz}$); σ_0 – продольная компонента тензора 2-го

ранга удельной проводимости σ_{zz} недеформированного кристалла; $\Delta\sigma$ – изменение продольной компоненты тензора удельной проводимости вследствие деформации кристаллита ($\Delta\sigma = \sigma - \sigma_0$, σ – продольная компонента тензора 2-го ранга удельной проводимости σ_{zz} деформированного кристалла).

Продольная компонента тензора удельной бесфононной проводимости нанолент вычислялась в рамках теории Кубо – Гринвуда [19] с помощью метода функций Грина, с использованием модельного гамильтониана Хаббарда [20]. Окончательное выражение для продольной удельной проводимости нанолент, использованное в расчетах константы M , имеет следующий вид [17]:

$$\sigma = 2 \frac{i\pi e^2}{k_B T V} \sum_{\mathbf{k}, \beta} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} v(\mathbf{k}) v(\mathbf{q}) \times \langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle \left[\langle n_{\mathbf{q}\lambda} \rangle + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\beta\lambda} (1 - \langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle) \right], \quad (12)$$

где V – объем кристаллита; k_B – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура; e – элементарный заряд; \mathbf{k}, \mathbf{q} – двухкомпонентные волновые векторы в пределах зоны Бриллюэна; β, λ – спиновые индексы; $\langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle$ – среднее число частиц в квантовом состоянии с волновым вектором \mathbf{k} и спином β , выражаемое функцией распределения Ферми – Дирака; v – продольная компонента вектора скорости электрона в зоне Бриллюэна.

Вектор скорости определяется стандартным способом с помощью электронного спектра (10):

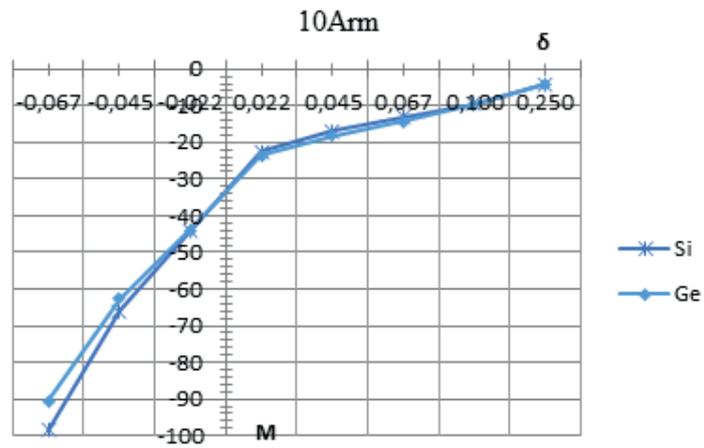
$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}. \quad (13)$$

Поскольку многочисленные исследования транспортных свойств дираковских материалов, например графеновых нанолент, свидетельствуют о баллистическом (бесфононном) характере электронной проводимости [4], использование модели Хаббарда, не учитывающей электрон-фононное взаимодействие, является оправданным и целесообразным.

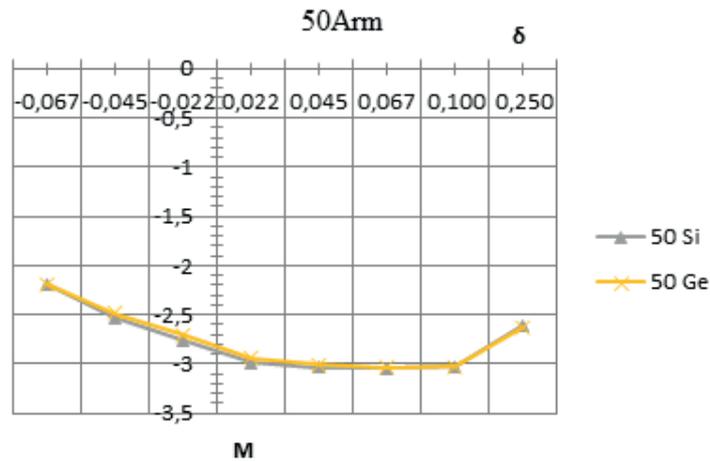
На рис. 3 и 4 представлены зависимости компоненты M тензора эластопроводимости от относительной деформации δ , равной

$$\begin{aligned} & -0,067, -0,045, -0,022, \\ & +0,022, +0,045, +0,067, +0,250 \end{aligned}$$

a)



b)



c)

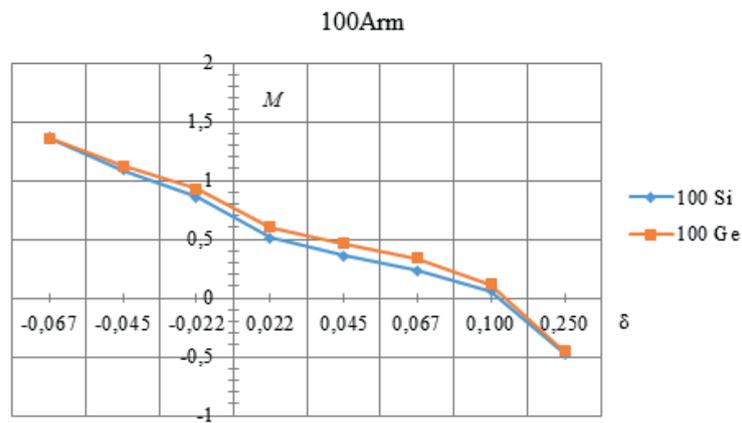


Рис. 3. Продольная компонента M тензора эластопроводимости кресельных (Arm) нанолент SiNR и GeNR шириной 10 (a), 50 (b) и 100 (c) элементарных ячеек как функция величины относительной деформации δ .

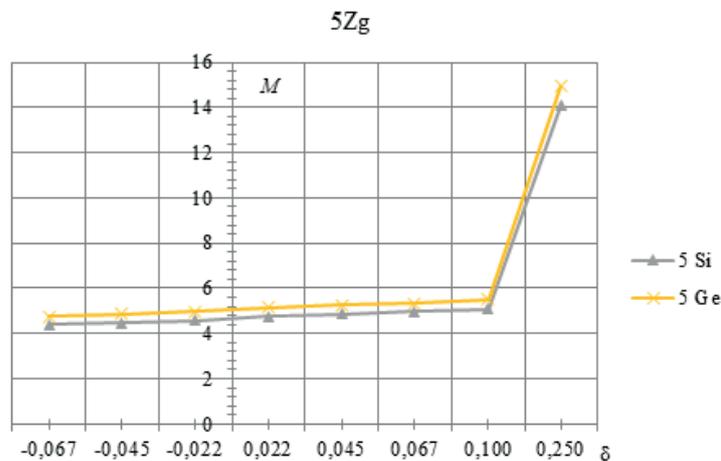
На всех кривых точка $\delta = 0$ не определена

для кресельных (Arm) и зигзагообразных (Zg) нанолент SiNR и GeNR разной ширины: $n\text{Arm}$ ($n = 9, 10, 50$ и 100) и $m\text{Zg}$ ($m = 5$ и 10) (значения даны в количествах элементарных ячеек). Численные результаты получены при температуре $T = 300$ К. Расчетные точки соединены сплошными линиями, чтобы наглядно показать тенденции изменения константы M . При этом необходимо отметить, что точка $\delta = 0$ не определена.

Как следует из рис. 3 и 4, продольная компонента M проводящих кресельных (9Arm) и зигзагообразных (5Zg, 10Zg) нанолент положительна и поведение данной компоненты полностью коррелирует с из-

менениями их зонной структуры, описанными выше. Общей закономерностью для рассмотренных проводящих нанолент является монотонный рост (снижение) величины M с увеличением относительной деформации растяжения (сжатия) δ . Подобное поведение наблюдается и у проводящих ахиральных углеродных нанотрубок [16, 17]. Несмотря на увеличение ширины зоны проводимости и уменьшение плотности состояний на уровне Ферми с увеличением δ , удельная проводимость объектов возрастает, что ведет к монотонному росту компоненты M . Этот эффект связан с тем, что все большее число носителей заряда со все большими энергиями дает вклад в удельную

a)



b)

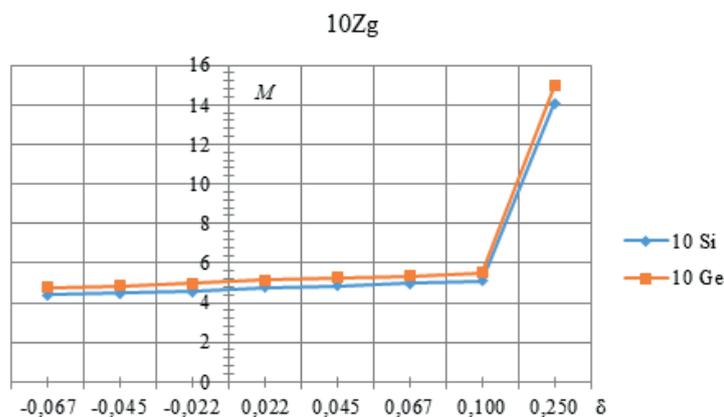


Рис. 4. Продольная компонента M тензора эластопроводимости зигзагообразных (Zg) нанолент SiNR и GeNR шириной 5 (a) и 10 (b) элементарных ячеек как функция величины относительной деформации δ .

На всех кривых точка $\delta = 0$ не определена

проводимость кристаллита. Тепловые флуктуации приводят к заполнению электронами зоны проводимости наноленты согласно функции распределения Ферми – Дирака. Модификация электронного спектра ведет к изменению удельной проводимости, учитывающей все возможные заполненные электронные состояния, а, следовательно, к росту компоненты M с увеличением величины δ .

В случае полупроводниковых кресельных (10Arm, 50Arm, 100Arm) нанолент SiNR и GeNR продольная компонента M отрицательна, но, как и в случае проводящих нанолент, монотонно растет с увеличением величины δ . Отрицательное значение обусловлено снижением удельной проводимости с увеличением деформации. Этот эффект также является следствием поведения зонной структуры деформированных полупроводниковых нанолент, у которых уширяется энергетическая щель, и поэтому уменьшается число заполненных состояний в зоне проводимости. Подобное поведение константы M наблюдается и у полупроводниковых ахиральных углеродных нанотрубок [16, 17].

Описанная выше методика расчета продольной компоненты тензора эластопроводимости, примененная к изучению пьезорезистивных свойств углеродных нанотрубок [16, 17], показала результаты, которые находятся в хорошем согласии с литературными данными по пьезорезистивным свойствам углеродных структур [24, 25]. Поэтому следует ожидать, что вследствие подобных подходов к описанию зонной структуры, наноленты семейства графена (дираковские

структуры) обладают качественно одинаковыми пьезорезистивными свойствами. Подобные литературные данные, относящиеся к нанолентам семейства графена, в том числе силициновым и германеновым, на данный момент отсутствуют.

Заключение

Проведенное теоретическое исследование пьезорезистивных свойств идеальных силициновых и германеновых нанолент с разным типом проводимости в рамках модели Хаббарда выявило ряд особенностей поведения продольной компоненты тензора эластопроводимости, описанных выше. Количественное исследование зависимостей константы M от величины деформации и ширины наноленты позволяет получить более полное представление об изменении удельной проводимости нанолент, обусловленном деформацией растяжения (сжатия). Кроме того, продольная компонента тензора эластопроводимости германеновых нанолент незначительно превышает компоненту силициновых нанолент.

Полученные результаты также можно учесть и использовать для электромеханических наносенсорных разработок, в основе работы которых лежит эффект пьезосопротивления, а основным структурным элементом выступают силициновые и германеновые наноленты.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Администрации Волгоградской области в рамках научного проекта № 18-42-343004.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Морозов С.В., Новоселов К.С., Гейм А.К. Электронный транспорт в графене // Успехи физических наук. 2008. Т. 178. № 7. С. 776–780.
2. Лозовик Ю.Е., Меркулова С.П., Соколик А.А. Коллективные электронные явления в графене // Успехи физических наук. 2008. Т. 178. № 7. С. 758–776.
3. Чернозатонский Л.А., Сорокин П.Б., Артюх А.А. Новые наноструктуры на основе графена: физико-химические свойства и приложения // Успехи химии. 2014. Т. 83. Вып. 3. С. 251–279.
4. Physics of graphene. Edited by Aoki H., Dresselhaus M.S. (Nanoscience and Technology). Switzerland: Springer International Publishing, 2014. 345 p.
5. Герт А.В., Нестоклон М.О., Ясиевич И.Н. Зонная структура силицена в приближении сильной связи // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2015. Т. 148. № 1. С. 133–139.
6. Acun A., Zhang L., Vampoulis P., et al., Germanene: the germanium analogue of graphene // Journal of Physics: Condensed Matter. 2015. Vol. 27. No. 44. P. 443002.
7. Behzad S. Effect of uni-axial and bi-axial strains and vertical electric field on free standing buckled germanene // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 2018.



Vol. 229. December. Pp. 13–19.

8. Ould N.E. M.L., El Hachimi A.G., Boujnah M., Benyoussef A., El Kenz A. Comparative study of electronic and optical properties of graphene and germanene: DFT study // *Optik*. 2018. Vol. 158. April. Pp. 693–698.

9. Kaloni T.P., Schwingenschlögl U. Stability of germanene under tensile strain // *Chemical Physics Letters*. 2013. Vol. 583. 17 September. Pp. 137–140.

10. Mortazavi B., Rahaman O., Makaremi M., Dianat A., Cunibert G., Rabczuk T. First-principles investigation of mechanical properties of silicene, germanene and stanene // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2017. Vol. 87. March. Pp. 228–232.

11. Kazemlou V., Phirouznia A. Influence of compression strains on photon absorption of silicene and germanene // *Superlattices and Microstructures*. 2019. Vol. 128. April. Pp. 23–29.

12. Бухараев А.А., Звездин А.К., Пяток А.П., Фетисов Ю.К. Стрейнтроника – новое направление микро- и нанoeлектроники и науки о материалах // *Успехи физических наук*. 2018. Т. 188. № 12. С. 1288–1330.

13. McRae A.C., Wei G., Champagne A.R. Graphene quantum strain transistors // *Physical Review Applied*. 2019. Vol. 11. No. 5. P. 054019.

14. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости. М.: Физматлит, 2003. 264 с.

15. Ляпкосова О.С., Лебедев Н.Г. Пьезорезистивный эффект в однослойных углеродных нанотрубках // *Физика твердого тела*. 2012. Т. 54. № 7. С. 1412–1416.

16. Лебедева О.С., Лебедев Н.Г. Влияние растяжения и сжатия на пьезорезистивность углеродных нанотрубок и графеновых на-

нолент // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2014. № 1 (189) С. 26–34.

17. Лебедева О.С., Лебедев Н.Г. Пьезорезистивный эффект в примесных однослойных углеродных нанотрубках в приближении «Хаббард-I» // *Научно-технические ведомости СПбГПУ*. 2014. № 2 (195). С. 149–161.

18. Лебедева О.С., Лебедев Н.Г. Деформационное изменение запрещенной щели примесных углеродных нанотрубок // *Химическая физика*. 2014. Т. 33. № 10. С. 73–80.

19. Квасников И.А. Термодинамика и статистическая физика. Т. 4. Квантовая статистика. М.: Комкнига, 2005. 352 с.

20. Изюмов Ю.А., Чашин Н.И., Алексеев Д.С. Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала. М.: Регулярная и хаотическая динамика, 2006. 384 с.

21. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир. Изд. Московского ун-та, 2001. 519 с.

22. Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 584 с.

23. Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A. Piezoconductivity of chiral carbon nanotubes in the framework of the tight-binding method // *Математическая физика и компьютерное моделирование*. 2018. Т. 21. № 1. С. 53–63.

24. Li Y., Wang W., Liano K., Hu Ch., et. al. Piezoresistive effect in carbon nanotube films // *Chinese Science Bulletin*. 2003. Vol. 48. No. 2. Pp. 125–127.

25. Obitayo W., Liu T. A review: carbon nanotube-based piezoresistive strain sensors // *Journal of Sensors*. 2012. Vol. 2012. P. ID 652438, 15 p. DOI 10.1155/2012/652438.

Статья поступила в редакцию 01.10.2019, принята к публикации 09.12.2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛЕБЕДЕВА Ольга Сергеевна – кандидат физико-математических наук, ассистент Волгоградского государственного университета, доцент Волгоградского государственного аграрного университета, г. Волгоград, Российская Федерация.

400062, Российская Федерация, г. Волгоград, Университетский пр., 100.

400002, Российская Федерация, г. Волгоград, Университетский пр., 26.

lebedeva_os@volsu.ru

ЛЕБЕДЕВ Николай Геннадьевич – доктор физико-математических наук, профессор Волгоградского государственного университета, г. Волгоград, Российская Федерация.

400062, Российская Федерация, г. Волгоград, Университетский пр., 100.

nikolay.lebedev@volsu.ru

ЛЯПКОСОВА Ирина Александровна – кандидат сельскохозяйственных наук, доцент Волгоградского государственного аграрного университета, г. Волгоград, Российская Федерация. 400002, г. Волгоград, Университетский пр., 26. lyarkosova_irina@mail.ru

REFERENCES

1. **Morozov S.V., Novoselov K.S., Geim A.K.**, Electronic transport in graphene, *Phys. Usp.* 51 (7) (2008) 744–748.
2. **Lozovik Yu.E., Merkulova S.P., Sokolik A.A.**, Collective electron phenomena in graphene, *Phys. Usp.* 51 (7) (2008) 727–744.
3. **Chernozatonskii L.A., Sorokin P.B., Artukh A.A.**, New nanostructures based on graphene: physical and chemical properties and applications, *Russ. Chem. Rev.* 83 (2014) 251–279.
4. *Physics of graphene*, Edited by Aoki H., Dresselhaus M.S. (Nanoscience and Technology), Springer International Publishing, 2014.
5. **Gert A.V., Nestoklon M.O., Yassievich I.N.**, Band structure of silicene in the tight binding approximation, *JETP.* 121 (1) (2015) 115–121.
6. **Acun A., Zhang L., Bampoulis P., et al.**, Germanene: the germanium analogue of graphene, *Journal of Physics: Condensed Matter.* 27 (44) (2015) 443002.
7. **Behzad S.**, Effect of uni-axial and bi-axial strains and vertical electric field on free standing buckled germanene, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena.* 229 (December) (2018) 13–19.
8. **Ould NE M.L., El Hachimi A.G., Boujnah M., et al.**, Comparative study of electronic and optical properties of graphene and germanene: DFT study, *Optik.* 158 (April) (2018) 693–698.
9. **Kaloni T.P., Schwingenschlugl U.**, Stability of germanene under tensile strain, *Chemical Physics Letters.* 583 (17 September) (2013) 137–140.
10. **Mortazavi B., Rahaman O., Makaremi M., et al.**, First-principles investigation of mechanical properties of silicene, germanene and stanine, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* 87 (March) (2017) 228–232.
11. **Kazemlou V., Phirouznia A.**, Influence of compression strains on photon absorption of silicene and germanene, *Superlattices and Microstructures.* 128 (April) (2019) 23–29.
12. **Bukharaev A.A., Zvezdin A.K., Pyatakov A.P., Fetisov Yu.K.**, Straintronics: a new trend in micro- and nanoelectronics and material science, *Phys. Usp.* 61 (12) (2018) 1175–1212.
13. **McRae A.C., Wei G., Champagne A.R.**, Graphene quantum strain transistors, *Physical Review Applied.* 11 (5) (2019) 054019.
14. **Landau L.D., Lifshitz E.M.**, *Theory of elasticity*, 2nd ed., Course of theoretical physics, Vol. 7, Pergamon Press, Oxford, 1981.
15. **Lyapkosova O.S., Lebedev N.G.**, Piezoresistive effect in single-walled carbon nanotubes, *Physics of the Solid State.* 54 (7) (2012) 1501–1506.
16. **Lebedeva O.S., Lebedev N.G.**, The influence of the stretching and compression deformations on the piezoresistance of the carbon nanotubes and graphene nanoribbons, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics.* (1(189)) (2014) 26–34.
17. **Lebedeva O.S., Lebedev N.G.**, The piezoresistive effect in doped single-walled carbon nanotubes in the “Hubbard-I” approach, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal.* (2(195)) (2014) 149–161.
18. **Lebedeva O.S., Lebedev N.G.**, Deformation change of the band gap of impurity carbon nanotubes, *Russian Journal of Physical Chemistry B: Focus on Physics.* 8 (5) (2014) 745–751.
19. **Kvasnikov I.A.**, *Termodinamika i statisticheskaja fizika. T. 4: Kvantovaja statistika [Thermodynamics and statistical physics, Vol. 4: Quantum Statistics]*, KomKniga Publ., Moscow, 2005.
20. **Izyumov Ju.A., Chashchin N.I., Alekseev D.S.**, *Teoriya sil'no korrelirovannyh sistem. Metod proizvodjashhego funkcionala [The theory of strongly correlated systems. Method of generating functional]*, Reguljarnaja i Haoticheskaja Dinamika Publ., Moscow, 2006.
21. **Stepanov N.F.**, *Kvantovaya mehanika i kvantovaya himiya [Quantum Mechanics and Quantum Chemistry]*. Mir, Moscow, 2001.
22. **Bir G.L., Pikus G.E.**, *Symmetry and strain-induced effects in semiconductors*, John Wiley & Sons, Inc., New-York, 1974.
23. **Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A.**, Piezoconductivity of chiral carbon nanotubes in the framework of the tight-binding method, *Mathematical Physics and Computer*



Simulation. 21 (1) (2018) 53–63.

24. **Li Y., Wang W., Liano K., et. al.**, Piezoresistive effect in carbon nanotube films, Chinese Science Bulletin. 48(2) (2003) 125–127.

25. **Obitayo W., Liu T.**, A review: carbon nanotube-based piezoresistive strain sensors, Journal of Sensors. 2012 (2012), ID 652438, DOI 10.1155/2012/652438.

Received 01.10.2019, accepted 09.12.2019.

THE AUTHORS

LEBEDEVA Olga S.

Volgograd State University

Volgograd State Agricultural University

100, University Ave., Volgograd, 400062, Russian Federation

26, University Ave., Volgograd, 400002, Russian Federation

lebedeva_os@volsu.ru

LEBEDEV Nikolay G.

Volgograd State University

100, University Ave., Volgograd, 400062, Russian Federation

nikolay.lebedev@volsu.ru

LYAPKOSOVA Irina A

Volgograd State Agricultural University

26, University Ave., Volgograd, 400002, Russian Federation

lyapkosova_irina@mail.ru

DOI: 10.18721/JPM.12405
УДК 532.5+612.13

**УЛЬТРАЗВУКОВОЕ И ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
СТРУКТУРЫ ТЕЧЕНИЯ В ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ
БИФУРКАЦИИ БРЮШНОЙ АОРТЫ**

Д.Э. Сеницына, А.Д. Юхнев, Д.К. Зайцев, М.В. Туркина

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Проведено расчетно-экспериментальное исследование структуры стационарного течения жидкости на модели, включающей среднестатистические бифуркации брюшной аорты и подвздошных артерий с осесимметричным стенозом в правой общей подвздошной артерии. Показано, что в наружной подвздошной артерии сначала формируется двухвихревое течение, которое далее, вниз по потоку, трансформируется в течение с четырьмя вихрями. Наличие гемодинамически значимого стеноза в общей подвздошной артерии приводит к формированию за ним отрывной зоны у внутренней стенки сосуда. Следующий за ним пространственный изгиб наружной подвздошной артерии приводит к генерации в ней закрученного течения. Во внутренних подвздошных артериях формируется переходное течение – от двухвихревого к одновихревому.

Ключевые слова: бифуркация брюшной аорты, пространственный изгиб сосуда, стеноз, ультразвуковой доплеровский метод

Ссылка при цитировании: Сеницына Д.Э., Юхнев А.Д., Зайцев Д.К., Туркина М.В. Ультразвуковое и численное исследование структуры течения в трехмерной модели бифуркации брюшной аорты // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 50–60. DOI: 10.18721/JPM.12405

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

**THE FLOW STRUCTURE IN A THREE-DIMENSIONAL
MODEL OF ABDOMINAL AORTIC BIFURCATION:
ULTRASONIC AND NUMERICAL STUDY**

D.E. Sinitsyna, A.D. Yukhnev, D.K. Zaitsev, M.V. Turkina

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

A numerical and experimental research of fluid flow structure on a model involving statistical-average bifurcations of the abdominal aorta and iliac arteries with an axisymmetric stenosis in the right common iliac artery has been conducted. It was shown that a two-vortex flow formed in the external iliac artery transforms a downstream into a four-vortex flow. The stenosis in the common iliac artery leads to formation of a recirculation zone behind it, namely, at the inner wall of the vessel. The following spatial bend of the external iliac artery leads to generation of a swirling flow in this vessel. A transitional flow, from a two-vortex to a single-vortex motion, forms in the internal iliac arteries.

Keywords: abdominal aorta's bifurcation, spatial bending of vessel, stenosis, ultrasound Doppler method

Citation: Sinitsyna D.E., Yukhnev A.D., Zaitsev D.K., Turkina M.V., The flow structure in a three-dimensional model of abdominal aortic bifurcation: ultrasonic and numerical study,



Введение

Брюшная аорта – одна из важнейших артерий, которая снабжает кровью структуры полости живота и нижних конечностей. Распространенным заболеванием в области бифуркации брюшной аорты является ее окклюзия (сужение), которая приводит к поражениям соответствующих органов, и поэтому требует оперативного лечения. Детальная информация о структуре течения в рассматриваемой части сосудистого русла позволяет ответить на вопросы о местах возможной локализации патологий и причинах их возникновения, а также содержит данные о выходных гидродинамических условиях, которые необходимы при моделировании кровотока в бедренных артериях, расположенных ниже по течению.

Исследования структуры течения в области бифуркации брюшной аорты появляются в литературе, начиная с 1980-х годов. В работе [1] проведено экспериментальное исследование течения на упрощенной модели бифуркации брюшной аорты, которое сравнивается с клиническими измерениями в условиях покоя. Профили скоростей в сосудах данной модели регистрировались с помощью магнитно-резонансной томографии при значении числа Рейнольдса $Re = 1150$. Это число оценивается по среднерасходной скорости в момент максимального расхода и по входному диаметру сосуда.

Работа [2] посвящена численному моделированию пульсирующего течения в упрощенной модели бифуркации брюшной аорты без пространственных изгибов. Изучена величина отрывных зон в общих подвздошных артериях в двух состояниях: покоя при значении $Re = 702$ и физической нагрузки при $Re = 1424$ (число Рейнольдса оценивалось авторами по среднерасходной скорости, осредненной по сердечному циклу и входному диаметру сосуда).

Стоит отметить, что в литературе встречаются исследования в различных конфигурациях упрощенных моделей рассматриваемого участка [2 – 4]. В большинстве случаев структура течения в последующих бифуркациях подвздошных артерий не рассматривается.

В настоящее время уделяется значительное внимание численному моделированию с помощью персонифицированных моделей, построенных по клиническим измерениям геометрии сосудов пациента [5, 6]. В ряде исследований используются модели со среднестатистической геометрией [7]. При этом в литературе не встречается исследований, использующих модели среднестатистической бифуркации брюшной аорты и последующих бифуркаций подвздошных артерий; при этом было бы важным сформировать эти артерии на основе осредненной геометрии нескольких групп пациентов.

Исследователей интересуют, как правило, местоположения областей с низкими сдвиговыми напряжениями, которые связаны с формированием и развитием атеросклероза, а также влияние упругости стенок на структуру течения. В работе [5], например, показано, что учет упругости стенок незначительно влияет на картину течения и различие величин осредненных сдвиговых напряжений в «жесткой» и «упругой» постановках не превышает 10 %. Поэтому в первом приближении при экспериментальных исследованиях можно использовать жесткие модели сосудов [8].

На сегодняшний день самым распространенным клиническим методом диагностики кровотока является ультразвуковой доплеровский метод, благодаря его низкой стоимости, неинвазивности и простоте использования. Предоставление информации о вихревой структуре кровотока в сосуде сложной пространственной конфигурации в виде ультразвуковых картин открывает для врачей новые возможности для усовершенствования диагностики сосудистых патологий. Численное моделирование, проводимое в предположении о ламинарном характере течения, позволяет получать детальную информацию о полях скоростей, помогающую расшифровать сложные картины ультразвуковых измерений [9].

Данная работа посвящена изучению структуры течения на модели среднестатистической бифуркации брюшной аорты и последующих бифуркаций подвздошных

артерий с помощью ультразвукового доплеровского метода и численного моделирования. Исследование включает анализ влияния стеноза в общей подвздошной артерии на структуру течения.

Модель бифуркации брюшной аорты и последующих бифуркаций общих подвздошных артерий

Используемая в настоящей работе модель среднестатистической конфигурации брюшной аорты и подвздошных артерий построена по осредненным клиническим данным [10 – 15]. В этой разработанной модели учтены характерные пространственные изгибы сосудистого участка из трех бифуркаций.

Модель включает выходной участок брюшной аорты диаметром 18 мм, которая разделяется на правую и левую общие подвздошные артерии диаметром $D = 10,8$ мм (рис. 1).

Общие подвздошные артерии в свою очередь разделяются на наружные (диаметр – 9,0 мм) и внутренние (диаметр – 5,5 мм) подвздошные артерии. Общая длина модели аорты составляет 215 мм.

Отклонения от оси выходного участка брюшной аорты для общих подвздошных артерий составляют: для левой – 20° , для правой – 25° .

Угол между внутренними и наружными подвздошными артериями составляет

30° (на виде сбоку) и 40° (на виде спереди).

Угол между осью брюшной аорты и плоскостью общих подвздошных артерий составляет 160° .

В правой общей подвздошной артерии расположен гемодинамически значимый осесимметричный стеноз, длина которого оставляет $L_s = 22$ мм, проходной диаметр $D_s = 5,9$ мм. Степень сужения стеноза (по площади)

$$STI = (1 - D_s^2/D^2) \cdot 100 \% = 70 \%$$

Изменение радиуса R сосуда в области стеноза по оси сосуда задано формулой:

$$R = 0,5D_s + 0,5(D - D_s)\cos^2(\pi y/L_s),$$

$$-L_s/2 \leq y \leq L_s/2.$$

Поскольку бифуркация брюшной аорты практически симметрична (имеется лишь небольшое различие в углах отклонения правой и левой общей подвздошной артерий от оси выходного участка брюшной аорты), разработанная модель позволила провести сравнительное исследование течения в здоровой и стенозированной ветвях.

Разработанная модель спроектирована в программном комплексе SolidWorks 2016 и изготовлена с помощью 3D-прототипирования. При печати использовался фотополимер FLGPGR04, который позволяет проводить исследование потока ультразвуковым доплеровским методом.

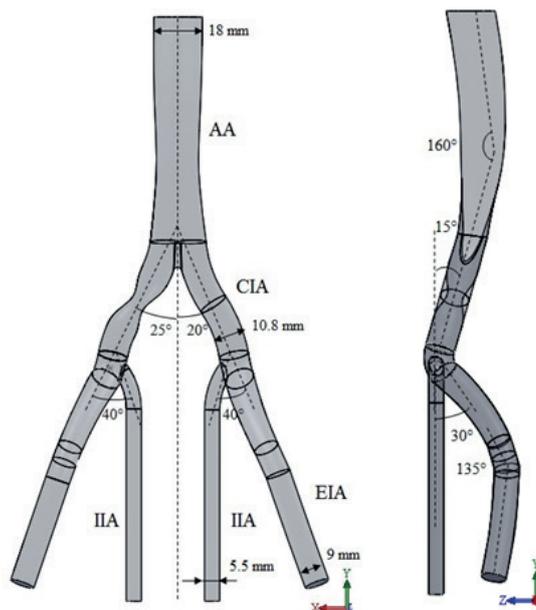


Рис. 1. Модель среднестатистических бифуркаций брюшной аорты и подвздошных артерий: AA – брюшная аорта, CIA – общие подвздошные артерии, EIA – наружные подвздошные артерии, ПА – внутренние подвздошные артерии

Постановка расчетного исследования и вычислительные аспекты

Численное моделирование течения в рассматриваемой модели участка сосудистого русла проводилось в предположении о стационарности и ламинарном характере движения жидкости. Решалась полная система уравнений Навье – Стокса для несжимаемой ньютоновской жидкости с постоянной вязкостью.

Были приняты следующие параметры жидкости: динамический коэффициент вязкости $\mu = 0,004$ Па·с; плотность $\rho = 1050$ кг/м³. На входе в расчетную область задавался расход $Q_{AA} = 4$ л/мин (это соответствует максимальному по сердечному циклу расходу в брюшной аорте [5]); расходы на выходах из подвздошных артерий задавались следующим образом:

для правой ЕИА – 0,8 л/мин,

для левой ЕИА – 1,44 л/мин,

для левой ПИА – 1,04 л/мин;

на выходе из правой ПИА задавался нулевой уровень давления.

Величины и соотношение расходов в подвздошных артериях в здоровой ветке подбирались в соответствии с клиническими данными [5, 12]. На стенках ставилось условие прилипания. Характерные значения среднерасходных скоростей, диаметров сосудов и соответствующие значения числа Рейнольдса в ветвях модели представлены в табл. 1.

Расчетная область в основном покрывалась квазиструктурированной сеткой с гексаэдральными элементами с пятью призматическими слоями у стенок. Общее число

Таблица 1
Значения числа Рейнольдса Re и среднерасходной скорости V_b в ветвях модели

Сосуд	Re	V_b , см/с	D , мм
AA	1230	26	18
Right EIA	500	21	9
Right ПИА	720	50	5,5
Left EIA	900	38	9
Left ПИА	1040	72	5,5

Обозначение: D – диаметр сосуда. Названия сосудов приведены в подписи к рис. 1.

ячеек расчетной сетки составляло около 3 млн. Расчетная сетка создана с применением программы ICEM 16.2. Расчеты проводились с использованием программного пакета ANSYS CFX 16.2, со вторым порядком точности пространственной дискретизации.

Экспериментальная установка и методика измерений

Для экспериментального исследования структуры течения в разработанной модели собрана установка с циркулирующей в ней кровеемитирующей жидкостью, состоящая из двух замкнутых гидравлических контуров: рабочего, в котором установлена исследуемая модель, и дополнительного, с помощью которого рабочий гидравлический контур заполняется жидкостью. Схема экспериментальной установки показана на рис. 2.

В замкнутом гидравлическом контуре 1 постоянный поток жидкости с расходом $Q = 4$ л/мин на входе в брюшную аорту создается центробежным насосом 2. Для подавления возмущений за насосом и формирования равномерного профиля скорости, на входе в модель установлен хонейкомб 4, изготовленный из прямой трубки диаметром 18 мм, внутри которой вклеены трубки диаметром 2 мм и длиной 10 мм. Расход контролируется с помощью датчиков электромагнитного

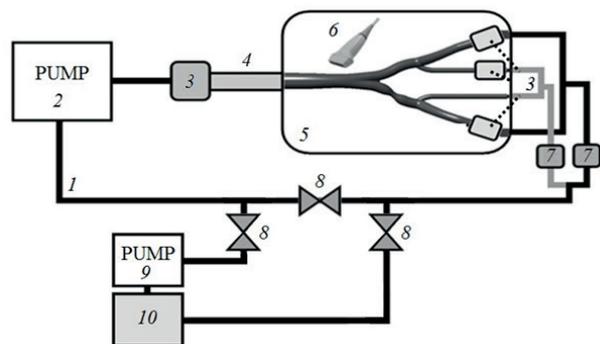


Рис. 2. Схема экспериментальной установки: 1 – замкнутый гидравлический контур; 2, 9 – центробежный и роликовый насосы, соответственно; 3 – датчики электромагнитного расходомера; 4 – хонейкомб; 5 – акустическая ванночка с моделью бифуркации брюшной аорты и подвздошных артерий; 6 – датчик ультразвукового сканера; 7 – регуляторы расхода; 8 – вентили слива жидкости; 10 – контейнер с кровеемитирующей жидкостью

расходомера 3, установленных перед хонейкомбом 4, на левой наружной и на обеих внутренних подвздошных артериях. На выходах из здоровой и стенозированной ветвей, с помощью регуляторов 7 устанавливаются следующие соотношения расходов:

в правой ветви $Q_{EIA}/Q_{IIA} = 1,1$;

в левой – $Q_{EIA}/Q_{IIA} = 1,4$,

что соответствует граничным условиям и результатам расчета.

Кровеимитирующая жидкость представляет собой 36%-ый водно-глицериновый раствор с добавлением хлорида натрия $NaCl$ (10 г/л), необходимого для работы датчика электромагнитного расходомера. Плотность жидкости $\rho = 1050 \text{ кг/м}^3$, вязкость близка к вязкости крови и составляет $\mu = 0,004 \text{ Па}\cdot\text{с}$.

Для получения экспериментальных данных о поле скорости в модели использовался ультразвуковой сканер LogicScan 64, снабженный линейным датчиком с рабочей частотой 5 – 7 МГц. Доплеровский спектр скоростей выводится в реальном времени на экран компьютера через интерфейс программы EchoWave II, обрабатывающей сигналы сканера. В качестве рассеивающих ультразвуковых частиц используется суспензия гуашевой краски (5 г/л).

Визуализация полей осевой скорости V_n и проекции поперечной скорости V_t на ось

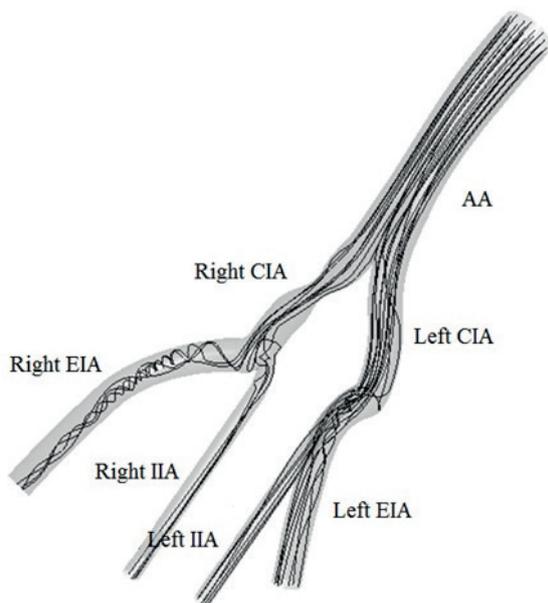


Рис. 3. Рассчитанные линии тока в модели бифуркации брюшной аорты.

Полные названия сосудов приведены в подписи к рис. 1

ультразвукового датчика проводится в режиме цветного доплеровского картирования (ЦДК). Для измерения осевой скорости ультразвуковой датчик устанавливался под углом 60° к оси сосуда, для измерения проекции поперечной скорости – под углом 90° . В режиме ЦДК используется шкала скорости кровотока: оттенки красного, синего и область серого цвета. Красный цвет визуализирует зоны со скоростями, направленными к датчику, синий – от датчика, серый – зоны малых скоростей, которые не может устойчиво измерять ультразвуковой датчик.

Влияние стеноза на структуру течения

Расчеты показали, что в рассмотренной модели бифуркации брюшной аорты и последующих бифуркациях подвздошных артерий формируется сложная вихревая структура, которая трансформируется по длине сосуда. На рис. 3 представлена общая картина линий тока. Видно, что регулярная структура потока сильно меняется за стенозом. Положение и размеры зоны обратных токов определяются по полям осевой скорости (рис. 4). За бифуркацией общей подвздошной артерии в ветви без

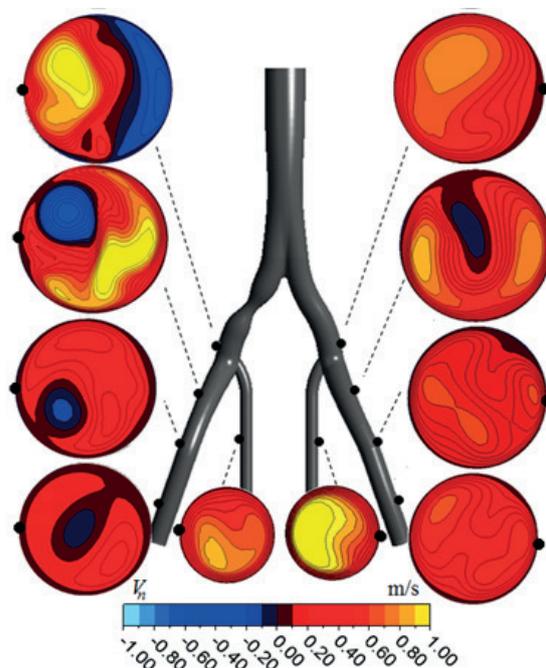


Рис. 4. Расчетное влияние стеноза на поле осевой скорости V_n (м/с).

Шкала скорости кровотока в сечениях сосудов: оттенки красного – осевая скорость направлена к УЗ датчику, синего – от датчика, а темные оттенки цветов – малые скорости

стеноза наблюдается небольшая зона обратных токов (область отрицательных скоростей темно-серого цвета, порядка 10% от площади сечения), которая исчезает на расстоянии двух калибров ниже по течению.

Стеноз приводит к формированию отрывной зоны у внутренней стенки общей подвздошной артерии, которая сохраняется по всей длине наружной подвздошной артерии. Во внутренних подвздошных артериях отрывные зоны не образуются независимо от наличия стеноза выше по потоку (рис. 4).

Стоит отметить, что в рассматриваемой модели встречается большое разнообразие вихревых структур (рис. 5, *a, b*). Согласно расчетам, за бифуркацией брюшной аорты в общих подвздошных артериях формируется двухвихревое течение. В ветви без стеноза после первой бифуркации в общих подвздошных артериях формируются парные вихри Дина, которые далее преобразуются, формируя на выходе из рассматриваемого участка артерии течение с четырьмя вихрями.

Двухвихревое течение за стенозом преобразуется в одновихревое, которое со-

храняется по всей длине правой наружной подвздошной артерии.

На выходе из рассматриваемых участков внутренних подвздошных артерий развивается переходное течение – от двухвихревого к одновихревому, в котором один вихрь значительно преобладает по размеру над вторым.

Сопоставление расчетных и экспериментальных результатов

Расчетные поля поперечной скорости сопоставлены с экспериментальными результатами в табл. 2. Представлены поля проекции поперечной скорости на ось ультразвукового датчика в двух видах: ультразвуковые (УЗ) изображения и рассчитанные поля, построенные в шкале режима ЦДК УЗ-сканера; дополнительно представлены картины рассчитанных линий тока поперечного течения, позволяющие установить количество, расположение и форму вихрей в нескольких сечениях исследованной модели. Сравнение проводится в сечениях, иллюстрирующих разнообразие вихревых структур. На ультразвуковых изображениях направления проекции поперечной скорости на ось датчика помечены стрелками

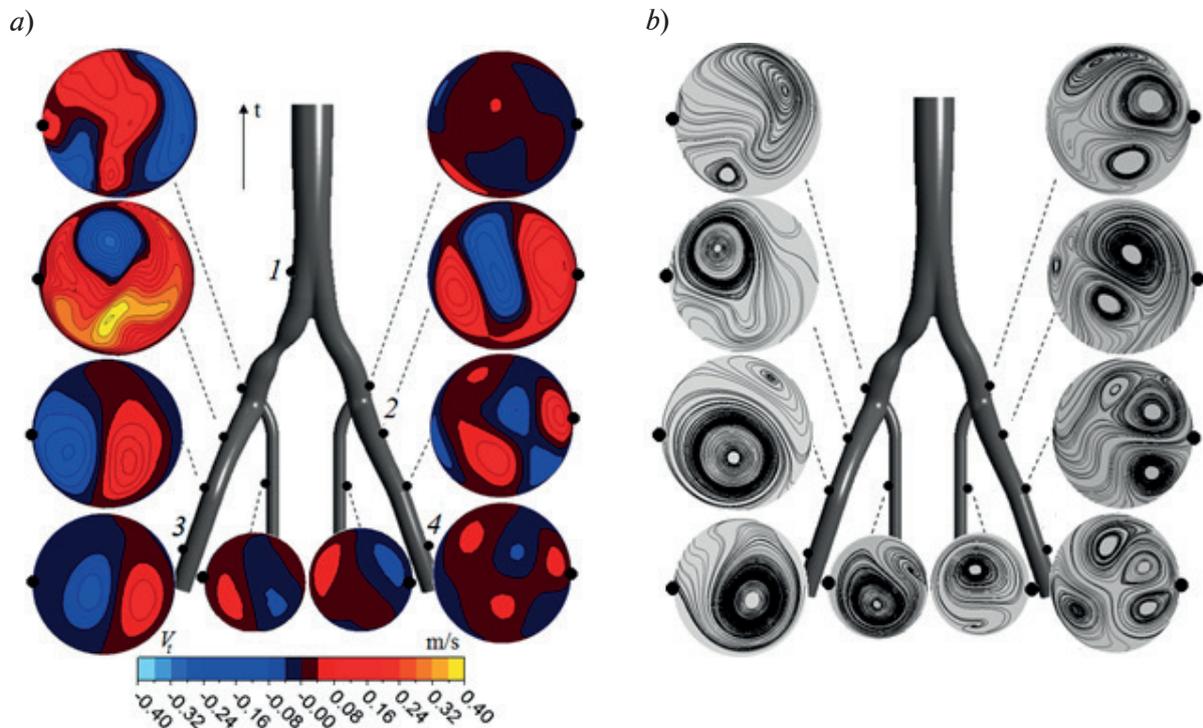
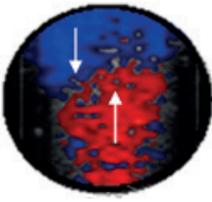
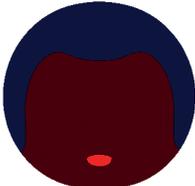
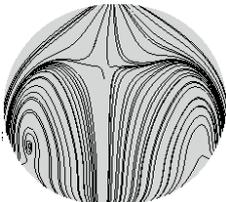
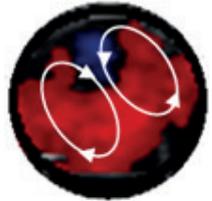
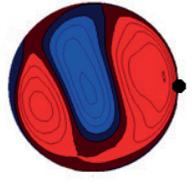
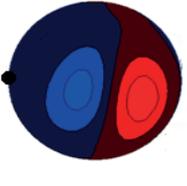
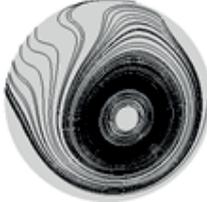
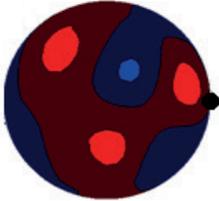
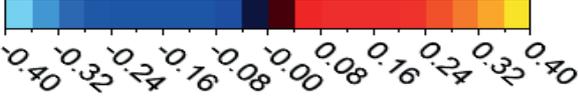


Рис. 5. Расчетное влияние стеноза на структуру поперечного течения: изолинии скорости (*a*) и линии тока (*b*).

Цифрами обозначены сечения, в которых результаты расчета сравниваются в табл. 2 с ультразвуковыми измерениями

Таблица 2
Сопоставление результатов расчетных и измеренных полей проекции поперечной скорости

Номер сечения	Поле проекции поперечной скорости на ось УЗ датчика		Линии тока поперечного течения
	Результат УЗ эксперимента	Результат расчета	
<i>Сужающееся течение</i>			
1			
<i>Двухвихревое течение</i>			
2			
<i>Одновихревое течение</i>			
3			
<i>Четырехвихревое течение</i>			
4			
<p>V_t m/s</p>  <p>-0.40 -0.32 -0.24 -0.16 -0.08 -0.00 0.08 0.16 0.24 0.32 0.40</p>			

Примечание. Расположение пронумерованных сечений сосудов приведено на рис. 5.



для каждой области. Датчик находится со стороны верхней части ультразвуковых изображений.

Перед бифуркацией брюшной аорты происходит сужение потока в конфузормом участке, которое характеризуется двухцветным ультразвуковым изображением (сечение 1): здесь область отрицательной проекции поперечной скорости располагается ближе к датчику, область положительной проекции – дальше от датчика.

Выраженное закрученное течение, которое формируется в наружной подвздошной артерии (в ветви со стенозом), характеризуется двухцветным ультразвуковым изображением (сечение 2), граница между этими областями расположена приблизительно параллельно оси ультразвукового датчика: слева находится область отрицательной проекции поперечной скорости (синий цвет), справа – область положительной проекции (красный цвет).

После бифуркации общей подвздошной артерии формируется двухвихревое течение (сечение 3), которое на ультразвуковом изображении характеризуется сочетанием нескольких областей: слева – положительная (красный цвет), в центре – отрицательная проекция поперечной скорости (синий цвет) и справа – положительная (красный цвет).

Анализ данных показывает, что результаты эксперимента качественно согласуются с результатами расчета. Одновихревое течение отчетливо прослеживается на ультразвуковых изображениях. При увеличении количества вихрей до двух картина усложняется и наблюдаются некоторые отличия от результатов расчета в размерах области положительной проекции поперечной скорости. Однако в целом положение областей соответствует расчету. Более сложное течение, сформированное четырьмя вихрями малой интенсивности (сечение 4), обнаружить ультразвуковым доплеровским методом цветного картирования было

затруднительно.

Заключение

Посредством численного моделирования и измерений ультразвуковым доплеровским методом получена детальная информация о структуре течения в модели, включающей среднестатистическую бифуркацию брюшной аорты, бифуркации общих подвздошных артерий и участки наружных и внутренних подвздошных артерий.

В случае пространственно-изогнутой наружной подвздошной артерии без стеноза, формируется двухвихревое течение, которое ниже по потоку трансформируется в течение с четырьмя вихрями. Наличие гемодинамически значимого стеноза в общей подвздошной артерии приводит к формированию отрывной зоны, которая сохраняется по ее длине. Следующие за стенозом пространственные изгибы наружной подвздошной артерии приводят к генерации в ней закрученного течения. На выходе из рассматриваемых участков внутренних подвздошных артерий формируется переходное течение от двухвихревого к одновихревому – один вихрь значительно преобладает по размерам над вторым.

Численное моделирование подтвердило возможность ультразвуковой регистрации одно- и двухвихревой структуры поперечного течения в пространственной модели сосудистого русла. В частности, ультразвуковым методом регистрируются направление вращения, интенсивность и положение вихрей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований.

Название: «Пространственно-временная структура кровотока в бифуркации здоровой брюшной аорты и при окклюзирующих поражениях подвздошных артерий», грант РФФИ № 18-01-00629.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Moore J.E., JR., Maier S.E., Ku D.N., Boensiger P. Hemodynamics in the abdominal aorta: a comparison of *in vitro* and *in vivo* measurements // Journal of Applied Physiology. 1994. Vol. 76. No. 4 Pp. 1520–1527.
2. Lee D., Chen J.Y. Pulsatile flow fields in a model of abdominal aorta with its peripheral

branches // Biomedical Engineering: Applications, Basis & Communications. 2003. Vol. 15. No. 5. Pp. 170–178.

3. Long Q., Xu X.Y., Bourne M., Griffith T.M. Numerical study of blood flow in an anatomically realistic aorto-iliac bifurcation generated from MRI data //Magnetic Resonance in Medicine.

2000. Vol. 43. No. 4. Pp. 565–576.

4. Lee D., Chen J.Y. Numerical simulation of steady flow fields in a model of abdominal aorta with its peripheral branches // Journal of Biomechanics. 2002. Vol. 35. No. 8. Pp. 1115–1122.

5. Ke L., Wentao J., Yu C., Xiaobao T., Zhihong Z., Ding Y. Fluid-solid interaction analysis on iliac bifurcation artery: a numerical study // International Journal of Computational Methods. 2018. Vol. 16. No. 5. Pp. 1–18.

6. Soares A.A., Gonzaga S., Oliveira C., Simxes A., Rouboa A.I. Computational fluid dynamics in abdominal aorta bifurcation: non-Newtonian versus Newtonian blood flow in a real case study // Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering. 2017. Vol. 20. No. 8. Pp. 1–10.

7. Гатаулин Я.А., Зайцев Д.К., Смирнов Е.М., Юхнев А.Д. Структура нестационарного течения в пространственно-извитой модели общей сонной артерии со стенозом: численное исследование // Российский журнал биомеханики. 2019. Т. 23. № 1. С. 69–78.

8. Юхнев А.Д., Сеницына Д.Э. Разработка технологии изготовления и исследование моделей кровеносных сосудов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2012. № 3(153). С. 75–79.

9. Гатаулин Я.А., Зайцев Д.К., Смирнов Е.М., Федорова Е.А., Юхнев А.Д. Расчетно-экспериментальное исследование слабозакрученного течения жидкости в модели кровеносного сосуда со стенозом // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2015. № 4 (230). С. 36–47.

10. Lorbeer R., Grotz A., Dörr M., Völzke H., Lieb W., Kühn J.-P., Mensel B. Reference values of vessel diameters, stenosis prevalence, and arterial variations of the lower limb arteries in a male population sample using contrast-enhanced MR angiography // PLoS One. 2018. Vol. 13. No. 6. e0197559. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0197559>

11. Cuomo F., Roccabianca S., Dillon-Murphy D., Xiao N., Humphrey J.D., Figueroa C.A. Effects of age-associated regional changes in aortic stiffness on human hemodynamics revealed by computational modeling // PLoS One. 2017. Vol. 12. No. 3. e0173177. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0173177>

12. Kurra V., Schoenhagen P., Roselli E.E., et al. Prevalence of significant peripheral artery disease in patients evaluated for percutaneous aortic valve insertion: preprocedural assessment with multidetector computed tomography // The Journal of Thoracic and Cardiovascular Surgery. 2009. Vol. 137. No. 5. Pp. 1258–1264.

13. Shah P.M., Scartont H.A., Tsapogas M.J. Geometric anatomy of the aortic-common iliac bifurcation // Journal of Anatomy. 1978. Vol. 126. Pt. 3. Pp. 451–458.

14. O'Flynn P.M., O'Sullivan G., Pandit A.S. Geometric variability of the abdominal aorta and its major peripheral branches // Annals of Biomedical Engineering. 2010. Vol. 38. No. 3. Pp. 824–840.

15. Yeung J.J., Jin Kim H., Abbruzzese T.A., et al. Aortoiliac hemodynamic and morphologic adaptation to chronic spinal cord injury // Journal of Vascular Surgery. 2007. Vol. 44. No. 6. Pp. 1254–1265.

Статья поступила в редакцию 01.10.2019, принята к публикации 15.11.2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СИНИЦЫНА Дарья Эдуардовна – аспирантка кафедры «Гидроаэродинамика, горение и теплообмен» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
sinicina.daria@yandex.ru

ЮХНЕВ Андрей Данилович – заведующий учебной лабораторией кафедры «Гидроаэродинамика, горение и теплообмен» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
a.yukhnev@mail.ru

ЗАЙЦЕВ Дмитрий Кириллович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Гидроаэродинамика, горение и теплообмен» Санкт-Петербургского политехнического



университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.
195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
zaitsev-aero@yandex.ru

ТУРКИНА Мария Валерьевна – студентка кафедры «Гидроаэродинамика, горение и теплообмен» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.
195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
turkinamaria@mail.ru

REFERENCES

1. Moore J.E., Ku D.N., Hemodynamics in the abdominal aorta: a comparison of *in vitro* and *in vivo* measurements, *Journal of Applied Physiology*. 76 (4) (1994) 1520–1527.
2. Lee D., Chen, J.Y., Pulsatile flow fields in a model of abdominal aorta with its peripheral branches, *Biomedical Engineering: Applications, Basis & Communications*. 15 (5) (2003) 170–178.
3. Long Q., Xu X.Y., Bourne M., Griffith T.M., Numerical study of blood flow in an anatomically realistic aorto-iliac bifurcation generated from MRI data, *Magnetic Resonance in Medicine*. 43 (4) (2000) 565–576.
4. Lee D., Chen J.Y., Numerical simulation of steady flow fields in a model of abdominal aorta with its peripheral branches, *Journal of Biomechanics*. 35 (8) (2002) 1115–1122.
5. Ke L., Wentao J., Yu C., et al., Fluid-solid interaction analysis on iliac bifurcation artery: a numerical study, international, *Journal of Computational Methods*. 16 (5) (2018) 1–18.
6. Soares A.A., Gonzaga S., Oliveira C., et al., Computational fluid dynamics in abdominal aorta bifurcation: non-Newtonian versus Newtonian blood flow in a real case study, *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*. 20 (8) (2017) 1–10.
7. Gataulin Y.A., Zaitsev D.K., Smirnov E.M., Yukhnev A.D., Structure of unsteady flow in the spatially curved model of the common carotid artery with stenosis: a numerical study, *Russian Journal of Biomechanics*. 23 (1) (2019) 58–66.
8. Yukhnev A.D., Sinitsyna D.E., The blood vessel models: the technology development for making and following investigation, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*. (3(153)) (2012) 75–79.
9. Gataulin Y.A., Zaitsev D.K., Smirnov E.M., et al., Weakly swirling flow in a model of blood vessel with stenosis: numerical and experimental study, *St. Petersburg Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*. 1 (4) (2015) 364–371.
10. Lorbeer R., Grotz A., Dörr M., et al., Reference values of vessel diameters, stenosis prevalence, and arterial variations of the lower limb arteries in a male population sample using contrast-enhanced MR angiography, *PLoS One*. 13 (6) (2018), e0197559. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0197559>
11. Cuomo F., Roccabianca S., Dillon-Murphy D., et al., Effects of age-associated regional changes in aortic stiffness on human hemodynamics revealed by computational modeling, *PLoS One*. 12 (3) (2017) e0173177. [/10.1371/journal.pone.0173177](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0173177).
12. Kurra V., Schoenhagen P., Roselli E.E., et al., Prevalence of significant peripheral artery disease in patients evaluated for percutaneous aortic valve insertion: preprocedural assessment with multidetector computed tomography, *The Journal of Thoracic and Cardiovascular Surgery*. 137 (5) (2009) 1258–1264.
13. Shah P.M., Scartont H.A., Tsapogas M.J., Geometric anatomy of the aortic-common iliac bifurcation, *Journal of Anatomy*. 126 (Pt. 3) (1978) 451–458.
14. O’Flynn P.M., O’Sullivan G., Pandit A.S., Geometric variability of the abdominal aorta and its major peripheral branches, *Annals of Biomedical Engineering*. 38 (3) (2010) 824–840.
15. Yeung J.J., Jin Kim H., Abbruzzese T.A., et al., Aortoiliac hemodynamic and morphologic adaptation to chronic spinal cord injury, *Journal of Vascular Surgery*. 44 (6) (2007) 1254–1265.

Received 01.10.2019, accepted 15.11.2019.

THE AUTHORS

SINITSYNA Daria E.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
sinicina.daria@yandex.ru

YUKHNEV Andrey D.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
a.yukhnev@mail.ru

ZAITSEV Dmitrii K.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
zaitsev-aero@yandex.ru

TURKINA Maria V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
turkinamaria@mail.ru

DOI: 10.18721/JPM.12406

УДК 537.856

ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА НАГРЕВА ДЕМПФЕРНОЙ ПРУЖИНЫ ИНДУКЦИОННЫМ МЕТОДОМ

Э.Р. Маннанов, С.А. Галунин

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

Исследованы конфигурация и работа системы для локального нагрева демпферной пружины индукционным методом. Проблемно-ориентированная 3D модель, разработанная на базе ANSYS APDL, позволила изучить влияние геометрических, электрических и позиционных параметров на температурное распределение по рассматриваемому изделию при его электромагнитной термообработке. В частности, получены температурные поля при вариации количества и длины пальцев демпферной пружины, при регулировании зоны отгиба пальцев с настройкой режима нагрева. Установлены основные связи конечных температурных распределений с геометрией нагреваемого изделия. Нагрев осуществляли с использованием как продольного, так и поперечного магнитных полей.

Ключевые слова: индукционный нагрев, численное моделирование, оптимизация, термообработка, демпферная пружина

Ссылка при цитировании: Маннанов Э.Р., Галунин С.А. Параметрическое моделирование процесса нагрева демпферной пружины индукционным методом // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 61–68. DOI: 10.18721/JPM.12406

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

THE HEATING OF A DIAPHRAGM SPRING USING INDUCTION TECHNIQUE: PARAMETRIC MODELING

E.R. Mannanov, S.A. Galunin

St. Petersburg Electrotechnical University "LETI", St. Petersburg, Russian Federation

The configuration and work of a system for local heating of a diaphragm spring by induction technique have been studied. The problem-oriented 3D model developed using ANSYS APDL, made possible to analyze effects of geometric, electrical and positional parameters on temperature distribution over the considered product in its electromagnetic heat treatment. In particular, the temperature fields were obtained varying spring finger's number and length, as well as a control of a finger's bend with setting up a heating mode. The main connections between the final temperature distributions and the geometry of the heated product were established. The heating was generated using both longitudinal and transverse magnetic fields.

Keywords: induction heating, numerical simulation, optimization, heat treatment, diaphragm spring

Citation: Mannanov E.R., Galunin S.A., The heating of a diaphragm spring using induction technique: parametric modeling, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (4) (2019) 61–68. DOI: 10.18721/JPM.12406

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

Введение

Множество научно-технических исследований посвящено анализу сопряженно протекающих электромагнитных и тепловых процессов при индукционной термообработке продукции. При этом особое место отводится изделиям, обладающим вращательной симметрией. Например, нагрев заготовок, имеющих форму металлических дисков или колец, широко применяется в различных промышленных технологиях и требует повышенного внимания при проектировании индукторов [1 – 10].

В большинстве случаев нагрева требуется равномерное распределение температуры по всему объему объекта или обеспечение локальной температурной области. Для диска обычно используется классический спиральный или петлевой индуктор, который располагается под объектом, а конфигурация индукционной системы может быть одно- или многовитковой; тогда вихревые токи в диске имеют вращательную симметрию. Это дает дополнительную возможность контролировать температурное поле, используя вращение диска. В подобной постановке задачи вихревые токи имеют мертвую точку в центре, а при термообработке диска сложного профиля следует ожидать различных условий охлаждения в зоне нагрева. После нагрева или охлаждения изделия естественно появляется неоднородность температурного поля.

Характеристики демпферной пружины зависят от ее геометрических размеров. Меняются в целом и рабочие характеристики механизма, в котором находится такая пружина, например, в сцеплении автомобиля.

При необходимости термообработки невозможно изменить геометрию изделия для достижения целей нагрева и получения желаемых параметров по остаточным напряжениям. Поэтому сначала выполняются расчеты, устанавливающие необходимый уровень прочности и упругости [1]. Оптимальная форма демпферной пружины способна распределять нагрузки (динамическая и статическая, постоянная и термоциклическая, нагрузка на изгиб), а термообработка этой пружины направлена на достижение баланса между прочностью, необходимой в пальцах, и пластичностью диска демпферной пружины. В связи с этим, при выборе температуры термообработки необходимо учитывать не только геометрические параметры обрабатываемого изделия, но и тех-

нологию его изготовления.

В данной статье представлено численное исследование процесса индукционного нагрева демпферных пружин для грузовых автомобилей. Такие пружины изготавливаются штамповкой. Узел механизма сцепления грузовика подвергается закалке путем единственного удара штампом, который придает необходимую форму металлическому изделию; последующий нагрев узла до 450°C выполняется под отпуск.

Параметрические исследования электротепловых процессов

Стандартное количество пальцев (рис. 1), размещенных по окружности диска демпферной пружины, составляло: 24, 20, 18 и 12.

Исследуемая система обладает симметрией, поэтому вместо того, чтобы моделировать сложную геометрию изделия, мы приняли решение промоделировать только одиночную секцию, используя при этом азимутальную периодичность структуры изделия.

Исходные данные моделирования демпферной пружины следующие:

Количество пальцев . . . 12, 18, 20, 24

Соответствующие

области моделирования,

град(мин) 15(0), 10(0), 9(0), 7(5)

Остальные исходные данные (конструктивные и электрические параметры индуктора, взаимное позиционирование и время нагрева), задача нагрева, критерий оценки достижения целевой функции (заданный температурный уровень) взяты на основе экспериментальных данных, приведенных в работе [2].

В моделируемой системе используемые нелинейные коэффициенты связаны с зависимостями свойств металлических изделий от температуры и напряженности электромагнитного поля, чем и обусловлена связь электромагнитной и тепловой задач. Алгоритм прямого моделирования задачи с сопряженным электротепловым решением индукционного нагрева диска подробно описан авторами данного исследования в работах [3, 9].

На рис. 1 показан эскиз демпферной пружины. Исходная область моделирования 2 представляет собой плоский сектор круга с центральным углом, равным 9°. Фактически это означает, что базовая конструкция демпферной пружины имеет 20 пальцев.

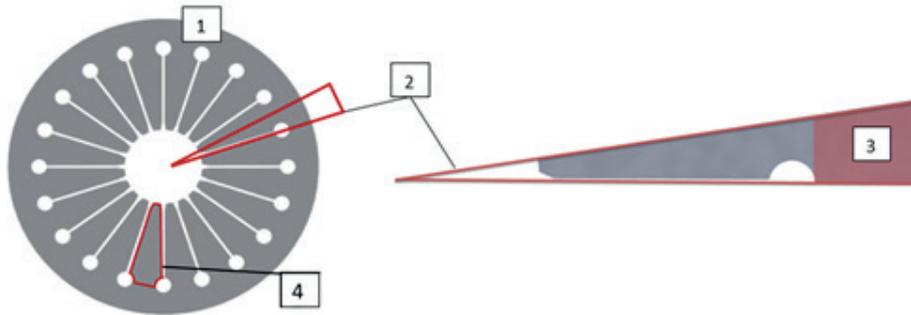


Рис. 1. Схематическое представление постановки задачи:

1 – общий вид изделия; 2 – область моделирования; 3 – зона нагрева; 4 – палец демпферной пружины



Рис. 2. Конечно-элементная 3D-система: 1 – индуктор, 2 – демпферная пружина

Расчетное время, необходимое для вычисления при заданной точности, минимизировано таким образом в 40 раз. Считаем, что общая высота ненагруженной пружины равна высоте нагруженной. Другими словами, изделие не обладает кривизной, необходимой для эксплуатации, и имеет плоскую форму под нагрузкой. При выполнении процедуры термообработки данный аспект не играет существенной роли, поскольку для обеспечения равномерного локального нагрева и витки нагревателя должны быть расположены:

- во-первых, на одной оси;
- во-вторых, строго параллельно плоскости относительно зоны нагрева.

Такое расположение, соответствующее вышеуказанным пунктам, позволяет регулировать подводимую мощность путем изменения тока индуктора, шага витков и ширины воздушного зазора.

Параметрическое исследование выполняется на базе разработанной параметрической 3D модели (рис. 2).

Предполагается, что зона отгиба пальцев является наиболее опасной с точки зрения появления горячих точек. Для учета этой опасности, на первом этапе исследования оценивалось влияние формы отгиба пальцев демпферной пружины на картину температурного поля. Для сравнения на

рис. 3 представлены расчетные распределения температуры в заготовке для случаев неудовлетворительного и желательного качества обработки зоны отгиба пальцев (рассматриваемая область). Нагрев выполнен в продольном магнитном поле.

Моделирование позволило оценить вероятность возникновения горячих точек в зоне отгиба пальцев демпферной пружины при использовании конфигурации индуктора, аналогичной описанной в работах [2, 3], где она применялась для нагрева диска с простым профилем. Наибольшая плотность наведенных токов, согласно нашей оценке, должна формироваться в зоне отгиба пальцев как следствие случайных блужданий вихревых токов. Ввиду сложной формы изделия, условия теплоотвода различаются и зависят от точки измерения. Кромки диска имеют наилучший теплоотвод благодаря своей малой толщине, и это предотвращает перегрев в зонах отгиба пальцев. При сравнении наших экспериментальных данных [2] и наших результатов численного моделирования можно утверждать, что конечный температурный профиль на поверхности в зоне нагрева имеет удовлетворительно равномерный характер с минимальным перепадом температуры по окружности диска.

На основании разработанной параметрической конечно-элементной 3D модели

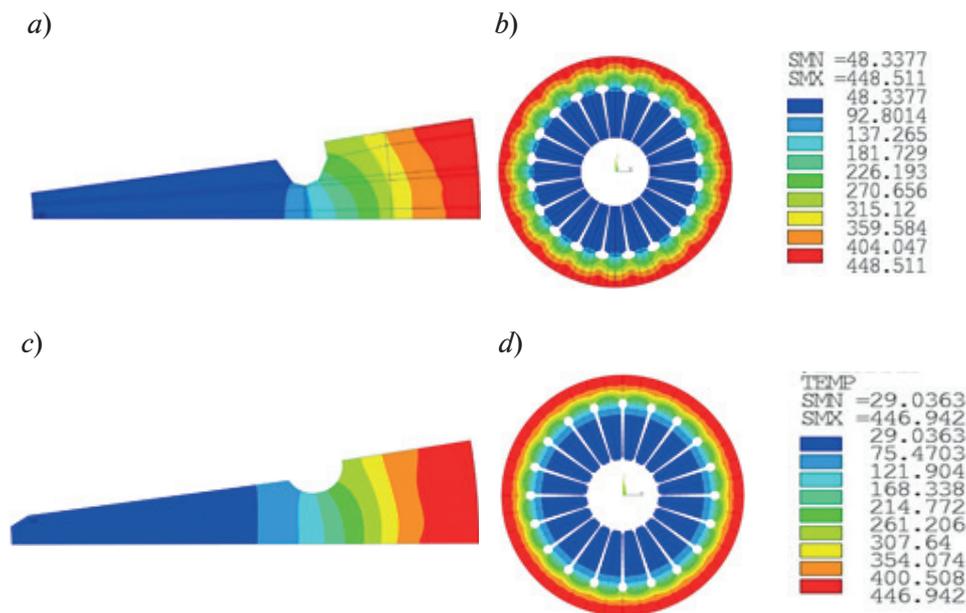


Рис. 3. Конечные температурные распределения по области моделирования 9° (a, c) и по изделию (b, d) после завершения процесса нагрева в продольном магнитном поле при некачественной (a, b) и желательной (c, d) обработках поверхности демпферной пружины в зоне отгиба пальцев.

Количество пальцев демпферной пружины – 20

проведено изучение процесса нагрева с учетом основных факторов, влияющих на картину температурного поля, путем варьирования действующих параметров системы. Указанное исследование учитывало следующие факторы влияния на температурное распределение по изделию:

габаритные размеры демпферной пружины (рис. 4 – 6);

количество пальцев указанной пружины при регулировании области моделирования (рис. 4 – 6);

нагрев в поперечном магнитном поле, для этого задано встречное включение токов в витках индуктора (рис. 6).

Анализ полученных данных моделирования позволил сделать следующие выводы.

1. Действующее значение тока влияет только на уровень максимальной температуры, но не влияет на картину температурного распределения.

2. Удлинение пальцев демпферной пружины улучшает теплоотвод от зоны нагрева, что обеспечивает высокий температурный перепад и обеспечивает понижение температуры относительно установленного целевого температурного уровня.

3. Регулирование количества пальцев демпферной пружины за счет варьирования моделируемой расчетной области приводит к качественному изменению формируемого

температурного поля.

4. Существенную роль в формировании температурного распределения играют размеры демпферной пружины (внешний диаметр, толщина диска, ширина ее зоны нагрева). Увеличение массы изделия сопровождается ростом необходимого энергозатрата для обеспечения нагрева до заданного температурного уровня, и наоборот (ее уменьшение сопровождается спадом энергозатрата). Например, при внешнем диаметре демпферной пружины 420 мм, толщине 3 мм, частоте нагревающего электромагнитного поля в 2,5 кГц, при воздушном зазоре изделие – индуктор, равном 10 – 11 мм, необходима мощность источника в 44 кВт, чтобы обеспечить высокоэффективный нагрев до требуемого температурного уровня; при уменьшении диаметра до 268 мм, достаточно мощности 15 кВт.

5. Равномерного распределения температуры по заданной области в диапазоне целевого температурного уровня можно достичь путем применения индукционного нагрева в продольном магнитном поле.

Проведенное исследование позволяет выработать практические рекомендации для оптимизации процесса нагрева. В частности, рекомендуется применять скругленные фаски в зоне отгибов пальцев во избежание концентрации тепла и

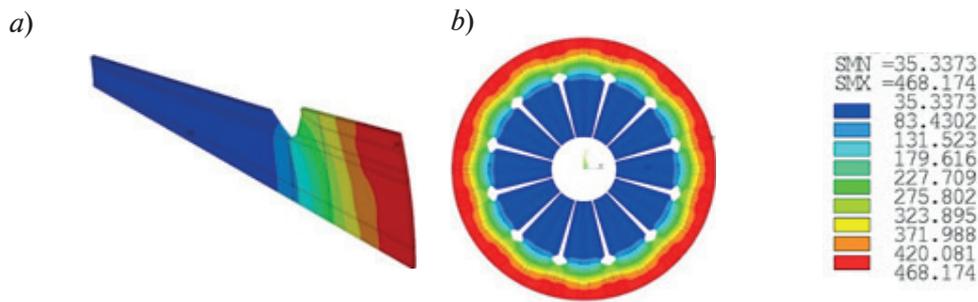


Рис. 4. Конечное температурное распределение после завершения процесса нагрева демпферной пружины диаметром 405 мм в продольном магнитном поле при действующем значении тока 300 А:

a – область моделирования 15°, *b* – полное конечно-элементное решение.
 Количество пальцев демпферной пружины – 12

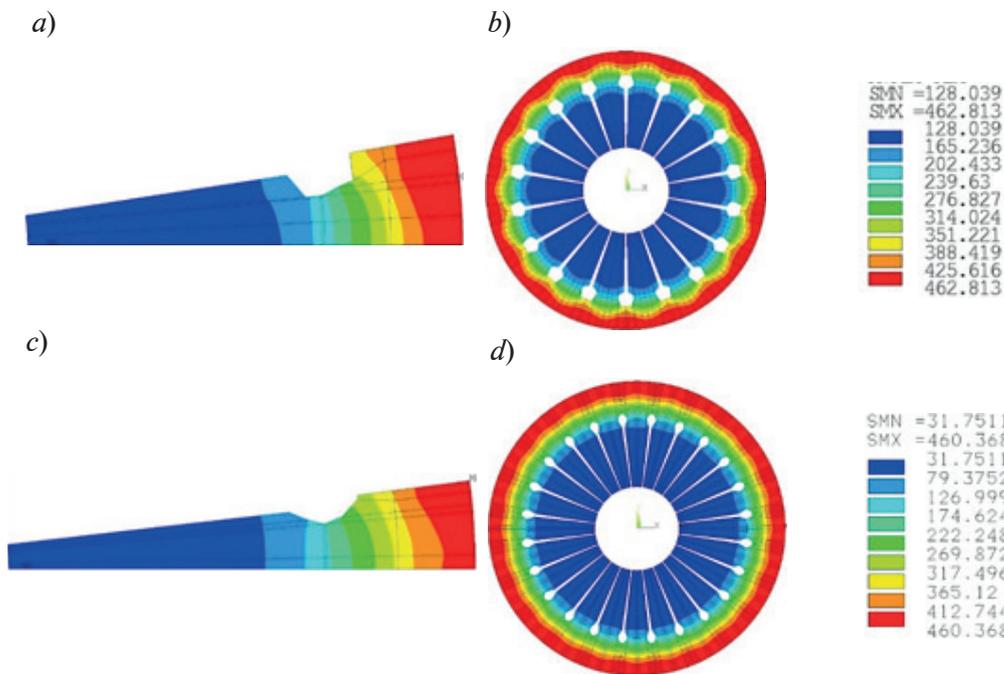


Рис. 5. Конечные температурные распределения после завершения процесса нагрева демпферной пружины диаметром 350 мм в продольном магнитном поле при действующих значениях тока 185 А (*a,b*) и 288 А (*c,d*).

Области моделирования составляли 10°0' (*a*) и 7°5' (*c*).
 Количество пальцев демпферной пружины – 18 (*a, b*) и 24 (*c, d*)

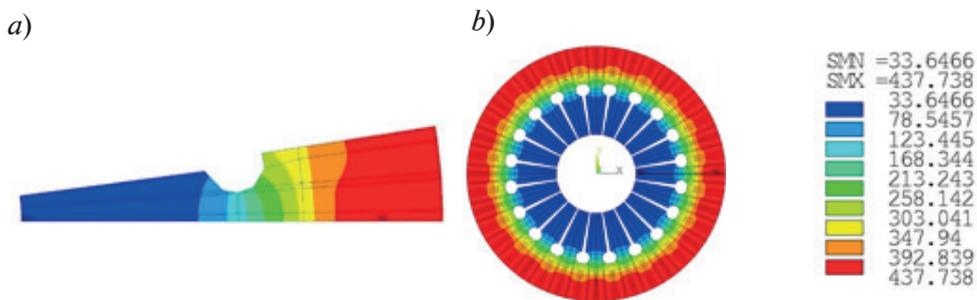


Рис. 6. Конечное температурное распределение после завершения процесса нагрева демпферной пружины диаметром 405 мм в поперечном магнитном поле при действующем значении тока 450 А. Область моделирования составляла 9°.

Количество пальцев демпферной пружины – 20

возникновения горячих точек.

Возможность модификации свойств материала при подборе температуры термообработки представляет большой интерес для расчета рабочей нелинейной характеристики упругости материалов в широком диапазоне температур. В зависимости от марки стали и ее назначения, температура обработки разная, поэтому механические свойства термообрабатываемого изделия, полученные на выходе, могут существенно различаться. Данное утверждение справедливо для целого ряда применяемых технологий: закалки,ковки,отжига, нормализации, отпуска, а также комбинаций различных термообработок, в частности таких как предварительный нагрев – закалка – отпуск, нормализация – отпуск, закалка – самоотпуск, закалка – старение и т. п. При необходимости следует проводить предварительное исследование и анализ конкретных случаев, чтобы оптимизировать свойства материа-

ла для заданной цели. Температуру и зону нагрева под отпуск следует определять с учетом требуемых свойств материала.

Заключение

Параметрическое моделирование процесса нагрева демпферной пружины индукционным методом успешно использовано для исследования и поиска геометрических, позиционных и электрических конфигураций системы индуктор – изделие для задачи локального нагрева демпферной пружины под отпуск. Дальнейшее применение разработки связано с поиском оптимальных конфигураций системы для того чтобы проводить индукционную термообработку демпферных пружин в широком диапазоне типоразмеров, а также металлических заготовок в форме дисков, колец и других осесимметричных металлических изделий простого и сложного профиля.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Rupnar A.** Design and analysis of diaphragm spring of a single plate dry clutch // *International Journal of Science Technology & Engineering*. 2016. Vol. 2. No. 12. Pp. 26–30.
2. **Маннанов Э.Р., Галунин С.А., Никаноров А.Н., Наке Б., Козулина Т.П.** Разработка индукционных систем для нагрева дисков // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2019. Т. 12. № 2. С. 23–31.
3. **Маннанов Э.Р., Ермекова М.Р., Мазалов В.О., Галунин С.А.** Численное моделирование электротепловых процессов при индукционном отпуске изделия кольцеобразной формы // *Наука. Технологии. Инновации*. Сб. научных трудов в 10 ч. Под ред. Б.Ю. Лемешко, А.А. Попова, М.Э. Рояка, В.С. Тимофеева. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2017. Ч. 2. С. 128–131.
4. **Маннанов Э.Р., Галунин С.А.** Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019614128. «Численная проблемно-ориентированная 3D электротепловая модель нагрева диска индукционным методом». Правообладатель ФГАОУ ВО СПбГЭТУ «ЛЭТИ»; заявл. 24.03.2019; зарегистрир. 01.04.2019. 1 с.
5. **Маннанов Э.Р., Галунин С.А.** Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019614441. «Численная про-
- блемно-ориентированная 3D электротепловая модель нагрева изделий сложного профиля индукционным методом». Правообладатель ФГАОУ ВО СПбГЭТУ «ЛЭТИ»; заявл. 25.03.2019; зарегистрир. 04.04.2019. 1 с.
6. **Шепеляковский К.З.** Упрочнение деталей машин поверхностной закалкой при индукционном нагреве. М.: Машиностроение, 1972. 287 с.
7. **Лепешкин С.А.** Моделирование и исследование распределений температур во вращающихся дисках с учетом взаимного влияния // «Энерго- и ресурсосбережение – XXI век». Сб. материалов XII Межд. науч.-практ. Интернет-конф., 2014. С. 77–79.
8. **Galunin S.A., Zlobina M.V., Blinov K.Yu.** Numerical model approaches for in-line strip induction heating // *IEEE Eurocon 2009*. St. Petersburg, 2009. Pp. 1607–1610. DOI: 10.1109/EURCON.2009.5167857.
9. **Mannanov E., Galunin S., Nikanorov A., Nacke B.** Simulation algorithm for induction heating of rotated workpieces with complex shape // *Proceedings of the 18th International UIE-Congress “Electrotechnologies for Material Processing”*, Hannover (Germany), June 6 – 9, 2017. Pp. 491–496.
10. **Schlesselmann D., Nacke B., Nikanorov A., Galunin S.** Coupled numerical multiphysics simulation methods in induction surface hardening



// “Coupled Problems 2015”. Proceedings of the 6th International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering. May 18 – 20, 2015. San Servolo Island, Venice, Italy. Pp. 392–403.

Статья поступила в редакцию 12.09.2019, принята к публикации 13.12.2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МАННАНОВ Эмиль Рамилевич – аспирант кафедры электротехнологической и преобразовательной техники Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» имени В.И. Ульянова (Ленина), Санкт Петербург, Российская Федерация.

197376, Российская Федерация, г. Санкт Петербург, ул. Профессора Попова, 5.
emil-mannanov@mail.ru

ГАЛУНИН Сергей Александрович – кандидат технических наук, заведующий кафедрой электротехнологической и преобразовательной техники Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» имени В.И. Ульянова (Ленина), Санкт Петербург, Российская Федерация.

197376, Российская Федерация, г. Санкт Петербург, ул. Профессора Попова, 5.
galunin@mail.ru

REFERENCES

1. **Rupnar A.**, Design and analysis of diaphragm spring of a single plate dry clutch, International Journal of Science Technology & Engineering. 2(12) (2016) 26–30.
2. **Mannanov E.R., Galunin S.A., Nikanorov A.N., et al.**, Development of induction systems for disk heating, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (2) (2019) 23–31.
3. **Mannanov E.R., Yermekova M.R., Mazalov V.O., Galunin S.A.**, Chislennoye modelirovaniye elektroteplovyykh protsessov pri induktsionnom otpuske izdeliya koltseobraznoy formy [Numerical simulation of electrothermal processes in the induction tempering of a ring-shaped product], In: “Science. Engineering. Innovation” Collected volume in 10 parts (2017) 128–131.
4. **Mannanov E.R., Galunin S.A.**, Svidetelstvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlya EVM № 2019614128 “Chislennaya problemno-orientirovannaya 3D elektroteplovaya model nagreva diska induktsionnym metodom” [Certificate No. 2019614128 on the state recording of a computer program “Numerical problem-oriented 3D electrothermal model of disk heating by induction technique”], Copyright holder is St. Petersburg Electrotechnical University “LETI”, stated on March 24, 2019, registered on April 1, 2019.
5. **Mannanov E.R., Galunin S.A.**, Svidetelstvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlya EVM № 2019614441 “Chislennaya problemno-orientirovannaya 3D elektroteplovaya model nagreva izdeliy slozhnogo profilya induktsionnym metodom” [Certificate No. 2019614441 on the state recording of a computer program “Numerical problem-oriented 3D electrothermal model of a complex product by induction technique”], Stated on March 25, 2019, registered on April 4, 2019.
6. **Shepelyakovskiy K.Z.**, Uprochneniye detaley mashin poverkhnostnoy zakalkoy pri induktsionnom nagreve [Machin parts strengthening by shell hardening in the induction heating], Mashinostroyeniye, Moscow, 1972.
7. **Lepeshkin S.A.**, Modelirovaniye i issledovaniye raspredeleniy temperatur vo vrashchayushchikhsya diskakh s uchetom vzaimnogo vliyaniya [Simulation and study of a temperature distribution in the rotating disks taking into account the mutual influence], In collected book “Energy- and Resource- Saving – The 21st Century”, Proceedings of the 13th International Theoretical and Practical Internet Conf. (2014) 77–79.
8. **Galunin S.A., Zlobina M.V., Blinov K.Y.**, Numerical model approaches for in-line strip induction heating, IEEE Eurocon 2009, St. Petersburg (2009) 1607–1610, DOI: 10.1109/EURCON.2009.5167857.
9. **Mannanov E., Galunin S., Nikanorov A., Nacke B.**, Simulation algorithm for induction heating of rotated workpieces with complex shape, Proceedings of the 18th International UIE-Congress “Electrotechnologies for Material Processing”, Hannover (Germany), June 6–9 (2017) 491–496.

10. **Schlesselmann D., Nacke B., Nikanorov A., Galunin S.**, Coupled numerical multiphysics simulation methods in induction surface hardening, “Coupled Problems 2015”, Proceedings of the 6th International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering, May 18–20, 2015, San Servolo Island, Venice, Italy (2015) 392–403.

Received 12.09.2019, accepted 13.12.2019.

THE AUTHORS

MANNANOV Emil R.

St. Petersburg Electrotechnical University "LETI"

5 Professora Popova St., 197376, St. Petersburg, Russian Federation
emil-mannanov@mail.ru

GALUNIN Sergei A.

St. Petersburg Electrotechnical University "LETI"

5 Professora Popova St., 197376, St. Petersburg, Russian Federation
galunin@mail.ru

ПРОБОПОДГОТОВКА ДЛЯ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ФРАКЦИОНИРОВАНИЯ ИЗОТОПОВ $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ИЗ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ В УГЛЕРОДНЫЙ ПУЛ РАСТЕНИЙ

**Т.Э. Кулешова¹, Е.С. Павлова¹, Ю.А.Титов²,
А.Г. Кузьмин², Н.Р. Галль¹**

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

²Институт аналитического приборостроения РАН,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

С целью изучения различий в степени ассимиляции изотопов ^{13}C и ^{12}C в ходе жизнедеятельности растений (различия связаны со скоростью протекания фотосинтетических реакций), разработан ряд методик и создан аппаратный комплекс для сбора и подготовки пробы, предшествующих масс-спектрометрическому изотопному анализу углерода. Спроектирована и изготовлена установка для концентрирования углекислого газа, находящегося вокруг растения, с каталитическим дожиганием органических микропримесей, позволяющая повысить его относительное содержание более чем в 100 раз. Предложена методика проведения реакции окисления глюкозы листьев растений дрожжами с образованием углекислого газа, подобраны концентрации реагентов. Полученные пробы свободны от интерферирующих примесей, доля которых не превышала 10^{-5} . Разработанная методика пробоподготовки использована для изучения влияния спектральных характеристик световой среды на взаимообмен изотопов углерода между атмосферным воздухом и углеродным пулом растений.

Ключевые слова: изотопы углерода, растение, пробоподготовка, масс-спектрометрический анализ, концентрирование углекислоты, окисление дрожжами

Ссылка при цитировании: Кулешова Т.Э., Павлова Е.С., Титов Ю.А., Кузьмин А.Г., Галль Н.Р. Пробоподготовка для масс-спектрометрического анализа фракционирования изотопов $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ из окружающей среды в углеродный пул растений // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 69–78. DOI: 10.18721/JPM.12407

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

SAMPLE PREPARATION FOR A MASS-SPECTROMETRIC ANALYSIS OF $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ISOTOPE FRACTIONATION FROM ENVIRONMENT TO THE PLANT CARBON POOL

**T.E. Kuleshova¹, E.S. Pavlova¹,
Yu.A. Titov², A.G. Kuzmin², N.R. Gall¹**

¹The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences,
St. Petersburg, Russian Federation

²Institute for Analytical Instrumentation, St. Petersburg, Russian Federation

In order to study the differences in the ^{13}C and ^{12}C isotopes assimilation degree related to the rate of photosynthetic reactions, we have developed a number of procedures of sample gasification and a hardware experimental complex for sample preparation before a mass-spectrometric isotope analysis of carbon involved in a plant life. A setup for concentrating the carbon dioxide located around the plant was designed and made. The setup makes catalytic

afterburning of organic microimpurities available for increasing the carbon content more than a hundred times. A reaction procedure for oxidation of leaf glucose by yeast generating carbon dioxide was suggested, reagent concentrations selected. The collected samples were free from impurities (not exceeding 10^{-5}). The developed sample preparation technique was used to study the effect of the light exposure characteristics on the carbon isotope interchange between atmospheric CO_2 and the plant carbon pool.

Keywords: carbon isotopes, plant, sample preparation, mass spectrometric analysis, CO_2 concentration

Citation: Kuleshova T.E., Pavlova E.S., Titov Yu.A., Kuzmin A.G., Gall N.R., Sample preparation for a mass-spectrometric analysis of $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ isotope fractionation from environment to the plant carbon pool, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (4) (2019) 69–78. DOI: 10.18721/JPM.12407

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

Введение

При фотосинтезе наблюдается эффект фракционирования изотопов элементов, составляющих органические продукты, в частности, растения избирательно поглощают стабильные изотопы углерода ^{12}C и ^{13}C [1 – 5]. Распределение изотопов между углекислым газом воздуха и продуктами фотосинтеза определяется реакционной способностью молекул различного изотопного состава, причем в продуктах реакции накапливается изотоп, с участием которого реакция протекает быстрее. Растения интенсивно накапливают изотоп ^{12}C , и его относительное содержание в их тканях на 15 – 25 ‰ выше, чем в атмосфере. Предположительно, дифференциация изотопов в процессе фотосинтеза проходит в два этапа: на первом происходит предпочтительное поглощение из атмосферного воздуха углекислого газа $^{12}\text{CO}_2$ и его растворение в цитоплазме растений, что обусловлено кинетическим эффектом; на втором этапе в процессе синтеза органических соединений из растворенной в цитоплазме углекислоты CO_2 извлекается фракция, обогащенная в свою очередь изотопом ^{12}C [6]. Анализ изотопного состава представляет большой интерес для исследований распределения углерода в системе почва – растение – атмосфера [7, 8], а также реакции растительных организмов на изменение внешних условий [9].

В настоящее время для мониторинга информации о процессах газообмена в системе растение – корнеобитаемая среда применяют электрохимические газовые сенсоры; при анализе потоков углекислого газа в закрытых камерах используют алгоритмы обработки и моделирования [10]; для изучения темнового газообмена растительных

объектов используют манометрический аппарат Варбурга [11]. Широкое распространение в качестве индикатора метаболизма, передвижения углерода и образования продуктов фотосинтеза нашло применение радиоактивного изотопа ^{14}C [11, 12]. Однако данные методы не применимы для анализа изотопных процессов при конверсии углекислого газа из воздушной среды в углеродный пул растения в процессе его развития.

Наиболее распространенным и эффективным методом для измерения изотопного отношения $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ является масс-спектрометрия. Однако стандартные методы и аппаратные комплексы забора и подготовки пробы для такого измерения не пригодны для проведения исследования непосредственно в зоне жизнедеятельности растений.

Таким образом, цель данной работы заключалась в разработке методики сбора и подготовки пробы, пригодной для исследования обмена изотопов углерода между растением и атмосферой путем проведения изотопного масс-спектрометрического анализа отношения $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ одновременно как в атмосферном углекислом газе около растения, так и в тканях растения в ходе его жизнедеятельности.

Методика и аппаратный комплекс пробоподготовки для масс-спектрометрического изотопного анализа углерода, участвующего в жизнедеятельности растений

С целью изучения изотопного состава углерода в тканях растений и степени его фракционирования из воздушной среды, нами была предложена методика и создан аппаратный комплекс, позволяющие осу-

ществлять пробоподготовку для масс-спектрометрического изотопного анализа углерода, участвующего в жизнедеятельности растений.

Измеряемое отличие отношения изотопов углерода образца от стандарта принято выражать в значениях $\delta^{13}\text{C}$:

$$\delta^{13}\text{C} = \left[\frac{(^{13}\text{C}/^{12}\text{C})_{\text{smf}}}{(^{13}\text{C}/^{12}\text{C})_{\text{std}}} - 1 \right] \cdot 10^3 \text{‰},$$

где $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ – изотопное отношение углерода; нижние индексы *smf* и *std* относятся к образцу и стандарту соответственно.

Для сопоставимости данных при изотопном анализе углерода введен общепринятый стандарт *Belemnite from American (PDB)* из формации Пи-Ди (PD) мелового возраста (Южная Каролина) с изотопным отношением углерода $^{13}\text{C}/^{12}\text{C} = 1123,72 \cdot 10^{-5}$.

Отношение $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ определяется в газе CO_2 , концентрация которого в пробе должна быть достаточно высока (более 2 – 3 %) и постоянна. При работе с растениями мы сталкиваемся со следующими проблемами:

малая концентрация углекислого газа в воздушной среде вокруг растений ($\sim 3 \cdot 10^{-4} \%$ $^{13}\text{CO}_2$); необходимость перевода органического вещества тканей растительных организмов в газообразное состояние.

Следовательно, для проведения изотопного масс-спектрометрического анализа необходимо обогащение газовой смеси, которое мы реализовали путем вымораживания в парах азота (см. далее). А для перевода твердого вещества в газообразное состояние мы предложили и реализовали метод, альтернативный термическому разложению, который заключается в использовании дрожжей в качестве окислителей углеродсодержащих соединений.

Анализ отношения $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ проводили на специализированном изотопном статическом магнитном масс-спектрометре «Хеликомасс», разработанном в Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург [13]. Мы использовали лабораторный стандарт, откалиброванный по отношению к PDB с помощью масс-спектрометра Thermo Scientific Delta (США).

Трехколлекторная система детектирования, работающая в режиме спектрографа, позволяет регистрировать молекулярные ионы двуокиси углерода CO_2^+ со следующими отношениями массы к заряду:

$m/z = 44$ – значение соответствует основной изотопной модификации $^{12}\text{C}^{16}\text{O}^{16}\text{O}$;

$m/z = 45$ – сумме изотопных модификаций $^{13}\text{C}^{16}\text{O}^{16}\text{O}$ и $^{12}\text{C}^{17}\text{O}^{16}\text{O}$;

$m/z = 46$ – сумме изотопных модификаций $^{12}\text{C}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$ и практически незначимым добавкам $^{13}\text{C}^{17}\text{O}^{16}\text{O}$.

В работе использовали только значения m/z , равные 44 и 45, в качестве носителей аналитической информации об изотопном отношении $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$.

С учетом изотопной распространенности углерода

$$^{13}\text{C}/^{12}\text{C} = 0,01123 : 1,000$$

и кислорода

$$\begin{aligned} ^{18}\text{O} : ^{17}\text{O} : ^{16}\text{O} &= \\ &= 2,0048 \cdot 10^{-3} : 3,9093 \cdot 10^{-4} : 1,000 \end{aligned}$$

а также характеристик детектора, расчет величины $\delta^{13}\text{C}$ производился по следующему алгоритму:

Шаг 1. Определение интенсивности сигнала для изотопов ^{13}C и ^{12}C с учетом вклада изотопов кислорода

$$\begin{aligned} ^{13}\text{C} &= (I_{45}/33) - 2 I_{44} \cdot 3,9093 \cdot 10^{-4}; \\ ^{12}\text{C} &= I_{44} + 2 I_{44} \cdot 2,0048 \cdot 10^{-3} + \\ &+ 2 I_{44} \cdot 3,9093 \cdot 10^{-4}, \end{aligned}$$

где I_{45} , I_{44} – интенсивности сигнала для значений $m/z = 45$ и 44 , соответственно.

Шаг 2. Расчет нормировочного коэффициента k по формуле

$$k = 0,0106956/R_e,$$

где R_e – среднее значение $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ для лабораторного эталонного газа, нормированное на коэффициент 0,0106956, являющийся абсолютным содержанием изотопа ^{13}C в лабораторном стандарте и измеренный по отношению к международному стандарту PDB.

Шаг 3. Расчет значения $\delta^{13}\text{C}$ по формуле

$$\delta^{13}\text{C} = \left[(kR_s/R_{\text{PDB}}) - 1 \right] \cdot 10^3,$$

где R_s – измеренное отношение $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ для образца; R_{PDB} – отношение $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ для стандарта PDB, равное 0,0112372.

Для молекулярного анализа состава газовых смесей, получаемых в ходе пробоподготовки образцов, определения концентраций отдельных компонентов и их идентификации в динамическом режиме, использовали квадрупольный масс-спектрометр ТЕХМАС МС7-100, разработанный в Институте аналитического приборостроения

РАН, Санкт-Петербург. В приборе предусмотрена возможность определять состав газовой смеси в диапазоне массовых чисел 2 – 100 а.е.м., что позволяет устанавливать наличие в пробе веществ и осколков молекул, интерферирующих с углекислым газом.

Установка для обогащения углекислого газа и определения изотопного отношения углерода в воздушной среде, окружающей растение

Для реализации изотопного масс-спектрометрического анализа углерода в атмосферной среде около растений, необходимо обогатить газовую смесь углекислым газом воздуха. Одним из способов концентрирования углекислого газа является его вымораживание. При абсолютном давлении 760 мм рт. ст. и температуре $-78,9\text{ }^{\circ}\text{C}$, углекислота переходит в твердое состояние. Процесс вымораживания осуществляется в тепловом режиме, обеспечивающем кристаллизацию углекислоты на стенках накопительного сосуда, и в отсутствие снега в потоке воздуха. При этом разность температур между воздухом и стенками не должна превышать $30\text{ }^{\circ}\text{C}$, а скорость потока газа (во избежание срыва и уноса осажденных кристаллов) должна быть не выше 3 м/с.

С учетом описанных условий нами была

реализована методика обогащения газовой смеси углекислым газом. Схема установки для концентрирования углекислого газа представлена на рис. 1. В теплоизоляционный сосуд 4, наполненный примерно на треть жидким азотом, помещали пробирку 3, через которую прокачивали малые потоки атмосферного воздуха. Пробирка располагалась в парах азота таким образом, чтобы температура ее дна составляла около $-100\text{ }^{\circ}\text{C}$. В качестве герметичной камеры для тестируемого растения использовали эксикатор 1.

Система вымораживания состоит из двух контуров, в одном витке 2 которого поддерживается температура чуть ниже нуля и обеспечивается осаждение воды, а также осушение газовой смеси, в другом холодильнике-теплообменнике 3, выполненном в виде стеклянной пробирки объемом 235 см^3 , температура в области подачи газовой смеси – ниже $-100\text{ }^{\circ}\text{C}$, что позволяет перевести углекислый газ в твердую фазу. Скорость потока не превышает $0,5\text{ м}^3/\text{ч}$, что позволяет десорбироваться твердой углекислоте на стенках пробирки. Система пневмотрубок, соединяющая все составляющие установки и побудитель расхода 5, обеспечивает циркуляцию газовой смеси от

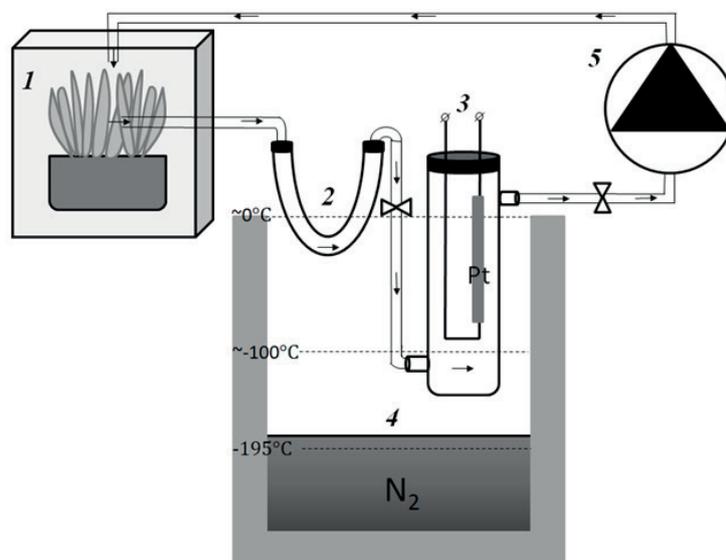


Рис. 1. Установка для обогащения углекислого газа из атмосферы, окружающей растение: 1 – герметичная фитокамера с трубками отвода и подвода воздуха, 2 – U-образная трубка для осушения газовой смеси, 3 – пробирка Вюрца для осаждения углекислого газа в парах азота с встроенным катализатором для дожигания органических примесей, 4 – теплоизоляционный сосуд с жидким азотом, 5 – побудитель расхода.

Температура контролируется термопарой

растения через систему емкостей обратно в камеру с исследуемым объектом.

После цикла вымораживания, длящегося 15 мин, концентрированная двуокись углерода в пробирке переводится в газообразное состояние нагреванием при комнатной температуре. Пробирка оснащена платиновым катализатором 35×1 мм, обеспечивающим при токе накала 3,5 А температуру свыше 900°C . После оттаивания в пробирке осуществляется каталитическое сжигание примесей за время $\tau \approx 600$ с. Согласно нашей оценке, общая концентрация примесей, способных интерферировать при изотопных измерениях углерода с целевыми ионами на массовых числах 44 и 45, не превышала уровня 10^{-5} .

Методика определения изотопного отношения для углерода глюкозы в тканях растений

Для того чтобы определять изотопный состав углерода глюкозы в тканях растительных организмов, основываясь на разработанном методе изучения фракционирования изотопов углерода гетеротрофными микроорганизмами [14], нами было предложено использовать реакцию окисления дрожжами для перевода простых сахаров растений в газовую фазу с образованием углекислого газа.

Утилизация глюкозы дрожжами происходит в основном двумя путями:

гликолитическое расщепление, т. е. из молекулы глюкозы образуются две молекулы пирувата;

частичное окисление глюкозы в окислительном пентозофосфатном цикле, когда из молекулы глюкозы образуются три молекулы двуокиси углерода и пируват [14].

Пируват, синтезированный по обоим указанным путям метаболизма глюкозы, затем может окисляться в цикле трикарбоновых кислот с отщеплением молекулы углекислого газа и присоединением кофермента А (CoA) с образованием ацетил-CoA:



В отсутствие кислорода далее протекает реакция спиртового брожения, суммарное уравнение которого имеет следующий вид:



Образующийся в ходе реакции ацетальдегид имеет молярную массу

44 г/моль, что не позволяет разделить его с целевым соединением — углекислым газом. Однако в связи с тем, что исходным веществом для углерода, составляющего ацетальдегид CH_3COH , является глюкоза, погрешности в изотопном составе растения это вещество вносить не будет. Этиловый спирт с молярной массой 46 г/моль начинает образовываться примерно через сутки после начала реакции, после того, как дрожжи израсходуют питательные вещества, представленные в нашем случае глюкозой в растительных тканях.

Методика заключалась в следующем: в герметичную пробирку помещали измельченную растительную ткань, воду и сухие дрожжи (рис. 2); после 30-минутной реакции синтезированный углекислый газ отбирали для масс-спектрометрического анализа.

На квадрупольном масс-спектрометре МС 7-100 был зарегистрирован полный масс-спектр газовой смеси, которая образовывалась в реакционной пробирке в ходе реакции окисления дрожжами (рис. 3). Относительно газов в атмосферном воздухе, в ходе реакции (в течение 15 мин) наблюдался рост интенсивности пиков в масс-спектре, относящихся к значению $m/z = 44$ (CO_2) (в 53 раза) и в интервале значений $m/z = 50 - 70$ (в 5 - 10 раз).

Согласно данным работы [15], в области

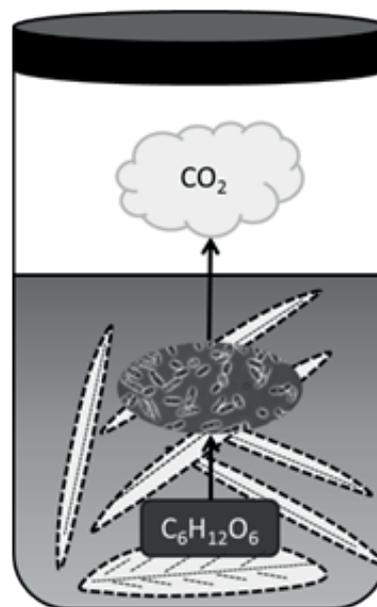


Рис. 2. Окисление глюкозы из листьев растений дрожжами до получения углекислого газа в реакционной пробирке

$m/z = 50 - 70$ лежат, в основном, сигналы от осколочных ионов, и нет данных о пиках, относящихся к интерференции осколков, при $m/z = 45$ (эта масса соответствует молекуле CO_2 с изотопом ^{13}C). Кроме того, отсутствие пика на $m/z = 46$ говорит об отсутствии в газовой смеси паров этилового спирта, который обычно является главным интерферирующим агентом при изотопных измерениях углерода. По нашей оценке, общая концентрация примесей, молекулярные или осколочные ионы которых способны интерферировать с целевыми ионами, используемыми при изотопных измерениях на массовых числах 44 и 45, не превышала уровня 10^{-5} , что обеспечивало необходимую точность измерений в 1 %.

Соотношение компонентов реакции для спиртового брожения должно быть следующим: 1 кг сахара, 4 – 5 л воды, 100 г прессованных дрожжей или 20 г сухих. В связи с тем, что концентрация сахаров в тестируемых тканях растения точно не

известна, нами был проведен эксперимент по подбору концентраций реагентов (см. таблицу). Существенных различий в значениях $\delta^{13}\text{C}$ листьев выявлено не было. Стандартное отклонение среди полученных значений равно 1,3 ‰. Значение $\delta^{13}\text{C}$, например, для 1 мг растительной ткани на 1 мл воды (вторая строка таблицы) через

Таблица
Зависимость $\delta^{13}\text{C}$ глюкозы листьев от концентрации реагентов в реакции окисления дрожжами

Количество реагента (мг) на 1 мл воды		$\delta^{13}\text{C}$, ‰
Растительная ткань	Дрожжи	
0,5	1,05	$-33,6 \pm 0,9$
1,0	1,04	$-33,6 \pm 0,9$
2,0	1,05	$-31,8 \pm 0,9$

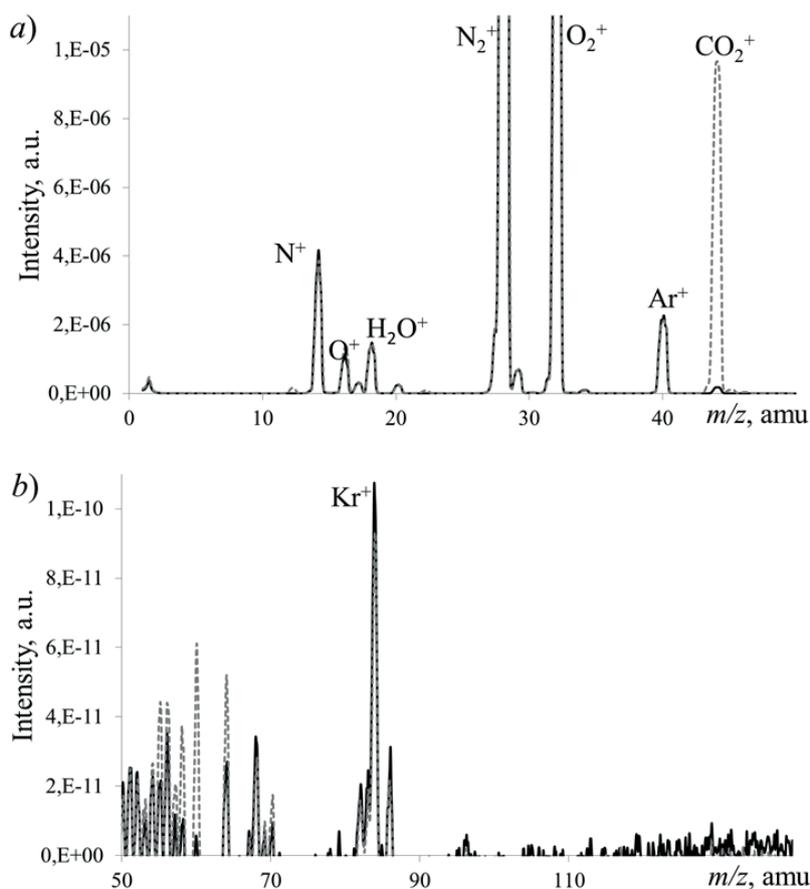


Рис. 3. Масс-спектры воздуха в реакционной пробирке (сплошная кривая) и в газовой смеси, образующейся в ходе окисления глюкозы листьев растений дрожжами (пунктирная кривая) в диапазонах m/z 0 – 45 а.е.м. (а) и 45 – 95 а.е.м. (б)

60 мин после начала реакции составило $-35,3 \pm 0,9 \%$, а через 90 мин составило $-33,6 \pm 0,9 \%$.

Помимо исследования растительных сахаров, был получен и проанализирован изотопный состав сахаров, относящихся к различным типам фотосинтеза и используемых в качестве субстрата для дрожжей.

При окислении дрожжами свекольного сахара, выделенного из C3-растений (фиксирующих углекислоту по C3-механизму фотосинтеза [16]), полученное отношение изотопов углерода составило

$$\delta^{13}\text{C} = -33,4 \pm 1,9 \%$$

Для тростникового сахара, синтезированного из C4-растения (высшие растения с C4-фотосинтезом [16]), значение

$$\delta^{13}\text{C} = -14,6 \pm 1,6 \%$$

Полученные нами значения согласуются с литературными данными для указанных типов фотосинтеза, что позволяет применять предложенную методику для широкого круга объектов.

Применение разработанной методики пробоподготовки

Указанные методы использованы для того, чтобы изучить влияние спектральных характеристик освещения на степень взаимобмена изотопов углерода между атмосферным воздухом и органами растений, осуществляющими фотосинтез. Оказалось, что изотопный состав листьев существенно зависит от спектра освещения, при котором растение выращивалось. Так, при изменении спектра от красной до синей составляющих отношение $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ изменялось в интервале от -35 до -23% , причем зависимость от длины волны носила немонотонный характер. Разница между изотопным составом углерода в воздухе около растений и в их листьях меняется в пределах от 7 до 19 % в зависимости от спектрального состава освещения и характеризует скорость ассимиляции углерода за счет протекания фотосинтетических реакций и фотодыхания. Эта разница отражает степень фракционирования изотопов в ходе жизнедеятельности растений и может быть использована в качестве параметра фитомониторинга. Более детально эти результаты будут опубликованы позднее.

Краткие результаты и выводы

В результате проведенного исследования была разработана система для сбора и подготовки пробы для проведения масс-спектрометрического анализа фракционирования изотопов $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ из окружающей среды в углеродный пул растений. Разработка системы включала следующие аспекты:

создание установки для сбора и обогащения пробы углекислого газа из воздуха, окружающего растения, *in vivo*, путем вымораживания углекислого газа при температуре паров жидкого азота;

разработку и применение методики получения пробы углекислого газа из содержащейся в листьях глюкозы путем их биохимического окисления дрожжами.

В результате экспериментальных исследований, проведенных на созданной установке по разработанной методике, установлено, что отношение изотопов углерода в углекислом газе, выделяемом при окислении растительной ткани дрожжами, в течение трех часов остается неизменным.

При окислении дрожжами полученные отношения изотопов углерода составили

$$\delta^{13}\text{C} = -33,6 \pm 0,9 \%$$

для листа C3-растения;

$$\delta^{13}\text{C} = -33,4 \pm 1,9 \%$$

для свекольного сахара, выделенного из C3-растений;

$$\delta^{13}\text{C} = -14,6 \pm 1,6 \%$$

для тростникового сахара, синтезированного из C4-растения.

Приведенные значения согласуются с литературными данными для этих типов фотосинтеза, что позволяет применять предложенную методику для широкого круга объектов.

Разработанная система сбора и подготовки проб обеспечила существенное повышение точности изотопных измерений благодаря концентрированию углекислого газа из пространства вокруг растения и устранению интерферирующих органических примесей.

Метод пробоподготовки был с успехом использован для измерения зависимости изотопного отношения углерода от спектрального состава светового воздействия на растения в процессе их роста. Показаны существенные различия в изотопном составе углекислого газа

атмосферы и листьев растений.

Таким образом, изотопное отношение $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ рекомендуется использовать как важный показатель скорости протекания реакции фотосинтеза, а разница между значениями $\delta^{13}\text{C}$ для окружающего

растение воздуха, вовлеченного в его метаболизм, и $\delta^{13}\text{C}$ углеродного пула тканей растительного организма потенциально отражает степень фракционирования изотопов в ходе жизнедеятельности растений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. O'Leary M.H. Carbon isotope fractionation in plants // *Phytochemistry*. 1981. Vol. 20. No. 4. Pp. 553–567.
2. Brugnoli E., Farquhar G.D. Photosynthetic fractionation of carbon isotopes // Leegood R.C., Sharkey T.D., von Caemmerer S. (Eds.). *Photosynthesis: Physiology and metabolism*. Kluwer, Dordrecht: Springer, 2000. Pp. 399–434.
3. Gessler A., Ferrio J.P., Hommel R., Treydte K., Werner R.A., Monson R.K. Stable isotopes in tree rings: towards a mechanistic understanding of isotope fractionation and mixing processes from the leaves to the wood // *Tree Physiology*. 2014. Vol. 34. No. 8. Pp. 796–818.
4. Lehmann M.M., Ghiasi S., George G.M., Cormier M.A., Gessler A., Saurer M., Werner R.A. Influence of starch deficiency on photosynthetic and post-photosynthetic carbon isotope fractionations // *Journal of Experimental Botany*. 2019. Vol. 70. No. 6. Pp. 1829–1841.
5. Галимов Э.М. Геохимия стабильных изотопов углерода. М.: Изд-во «Недра», 1968. 226 с.
6. Park R., Epstein S. Carbon isotope fractionation during photosynthesis // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. 1960. Vol. 21. No. 1–2. Pp. 110–120.
7. Brüggemann N., Gessler A., Kayler Z., et al. Carbon allocation and carbon isotope fluxes in the plant-soil-atmosphere continuum: a review // *Biogeosciences*. 2011. Vol. 8. No. 11. Pp. 3457–3489.
8. Hagedorn F., Joseph J., Peter M., et al. Recovery of trees from drought depends on belowground sink control // *Nature Plants*. 2016. Vol. 2. No. 8. P. 16111.
9. Gessler A., Cailleret M., Joseph J., et al. Drought induced tree mortality – a tree ring isotope based conceptual model to assess mechanisms and predispositions // *New Phytologist*. 2018. Vol. 219. No. 2. Pp. 485–490.
10. Hoffmann M., Jurisch N., Borraz E.A., Hagemann U., Drösler M., Sommer M., Augustin J. Automated modeling of ecosystem CO_2 fluxes based on periodic closed chamber measurements: A standardized conceptual and practical approach // *Agricultural and Forest Meteorology*. 2015. Vol. 200. January. Pp. 30–45.
11. Заленский О.В., Семихатова О.А., Вознесенский В.Л. Методы применения радиоактивного углерода C^{14} для изучения фотосинтеза. М.: Изд-во Академии наук СССР, 1955. 90 с.
12. Dieuaide-Noubhani M., Alonso A.P., Rolin D., Eisenreich W., Raymond P. Metabolic flux analysis: recent advances in carbon metabolism in plants // *Plant Systems Biology*. Birkhäuser Basel, 2007. Pp. 213–243.
13. Блашенков Н.М., Шешеня Е.С., Соловьев С.М., Галль Л.Н., Саченко В.М., Заруцкий И.В., Галль Н.Р. Разработка специализированного изотопного масс-спектрометра для неинвазивной диагностики инфицированности человека *Helicobacter Pylori* // *Журнал технической физики*. 2013. Т. 83. № 6. С. 60–65.
14. Зякун А.М. Теоретические основы изотопной масс-спектрометрии в биологии. Пушкино: «Фотон-век», 2010. 224 с.
15. Ануфриев Г.С., Болтенков Б.С., Капитонов И.Н., Рябинков А.И. Исследование остаточного газа при помощи масс-спектрометра высокого разрешения. Ленинград: Изд-во ФТИ, 1990. 35 с.
16. Эдвардс Д., Уокер Д. Фотосинтез C_3 - и C_4 -растений: механизмы и регуляция: Пер. с англ. М.: Мир, 1986. 590 с.

Статья поступила в редакцию 26.08.2019, принята к публикации 09.09.2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КУЛЕШОВА Татьяна Эдуардовна – младший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

www.piter.ru@bk.ru

ПАВЛОВА Екатерина Сергеевна – младший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
shshenayket@gmail.com

ТИТОВ Юрий Алексеевич – младший научный сотрудник Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

198095, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31–33.
titov.uri@gmail.com

КУЗЬМИН Алексей Георгиевич – кандидат физико-математических наук, ведущий специалист Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

198095, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31–33.
agqz55@rambler.ru

ГАЛЛЬ Николай Ростиславович – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

190103, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Рижский пр., 26
gall@ms.ioffe.ru

REFERENCES

1. O'Leary M.H., Carbon isotope fractionation in plants, *Phytochemistry*. 20 (4) (1981) 553–567.
2. Brugnoli E., Farquhar G.D., Photosynthetic fractionation of carbon isotopes, In: Leegood R.C., Sharkey T.D., von Caemmerer S. (Eds.), *Photosynthesis: Physiology and metabolism*. Springer, Kluwer, Dordrecht (2000) 399–434.
3. Gessler A., Ferrio J.P., Hommel R., et al., Stable isotopes in tree rings: towards a mechanistic understanding of isotope fractionation and mixing processes from the leaves to the wood, *Tree Physiology*. 34 (8) (2014) 796–818.
4. Lehmann M.M., Ghiasi S., George G.M., et al., Influence of starch deficiency on photosynthetic and post-photosynthetic carbon isotope fractionations, *Journal of Experimental Botany*. 70 (6) (2019) 1829–1841.
5. Galimov E.M., *Geokhimiya stabilnykh izotopov ugleroda [Geochemistry of stable carbon isotopes]*, “Nedra” Publishing, 1968.
6. Park R., Epstein S., Carbon isotope fractionation during photosynthesis, *Geochimica et Cosmochimica Acta*. 21 (1–2) (1960) 110–120.
7. Brüggemann N., Gessler A., Kayler Z., et al., Carbon allocation and carbon isotope fluxes in the plant-soil-atmosphere continuum: a review, *Biogeosciences*. 8 (11) (2011) 3457–3489.
8. Hagedorn F., Joseph J., Peter M., et al., Recovery of trees from drought depends on belowground sink control, *Nature plants*. 2 (8) (2016) 16111.
9. Gessler A., Cailleret M., Joseph J., et al., Drought induced tree mortality – a tree-ring isotope based conceptual model to assess mechanisms and predispositions, *New Phytologist*. 219 (2) (2018) 485–490.
10. Hoffmann M., Jurisch N., Borraz E.A., et al., Automated modeling of ecosystem CO₂ fluxes based on periodic closed chamber measurements: a standardized conceptual and practical approach, *Agricultural and Forest Meteorology*. 200 (January) (2015) 30–45.
11. Zalenskiy O.V., Semikhatova O.A., Voznesenskiy V.L., *Metody primeneniya radioaktivnogo ugleroda C¹⁴ dlya izucheniya fotosinteza [Radioactive carbon-14 application method for a photosynthesis study]*, USSR Academy of Sciences Publishing House, Moscow, 1955.
12. Dieuaide-Noubhani M., Alonso A.P., Rolin D., et al., Metabolic flux analysis: recent advances in carbon metabolism in plants, *Plant Systems Biology*, Birkhäuser Basel (2007) 213–243.
13. Blashenkov N.M., Sheshenya E.S., Solov'ev S.M., et al., Development of a dedicated isotope mass spectrometer for the noninvasive diagnostics of humans infected with *Helicobacter Pylory*, *Technical Physics*. 58 (6) (2013) 836–840.
14. Zyakun A.M., *Teoreticheskiye osnovy izotopnoy mass-spektrometrii v biologii [Theoretical basis for isotopic mass spectrometry in biology]*, «Foton-vek», Pushchino, 2010.

15. **Anufriyev G.S., Boltenkov B.S., Kapitonov I.N., Ryabinkov A.I.**, Issledovaniye ostatochnogo gaza pri pomoshchi mass-spektrometra vysokogo razresheniya [Residual gas investigation using high-resolution mass spectrometer], Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences, Leningrad, 1990.
16. **Edwards G., Walker D.**, C3, C4: mechanisms, and cellular and environmental regulation of photosynthesis, University of California Press, 1983.

Received 26.08.2019, accepted 09.09.2019.

THE AUTHORS

KULESHOVA Tatiana E.

The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
www.piter.ru@bk.ru

PAVLOVA Ekatherina S.

The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
sheshenayket@gmail.com

TITOV Yuriy A.

Institute for Analytical Instrumentation
31–33, Ivana Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russian Federation
titov.uriy@gmail.com

KUZMIN Alexey G.

Institute for Analytical Instrumentation
31–33, Ivana Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russian Federation
agqz55@rambler.ru

GALL Nicholas R.

The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
gall@ms.ioffe.ru

DOI: 10.18721/JPM.12408
УДК 628.94, 617-7

ОПТИМИЗАЦИЯ ОСВЕЩЕНИЯ ОПЕРАЦИОННОГО ПОЛЯ С ЦЕЛЬЮ ПОЛУЧЕНИЯ МАКСИМАЛЬНОГО КОНТРАСТА ПРИ ВИЗУАЛИЗАЦИИ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

**А.В. Аладов¹, В.П. Валюхов², А.Л. Закгейм¹, В.Д. Купцов²,
А.В. Мамошин^{3,4}, Е.В. Потапова³, А.Е. Черняков¹, А.Э. Фотиади²**

¹ Научно-технологический центр микроэлектроники и субмикронных гетероструктур Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация;

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация;

³ Научно-технологический центр биомедицинской фотоники Орловского государственного университета им. И.С. Тургенева», г. Орёл, Российская Федерация;

⁴ Орловская областная клиническая больница, г. Орёл, Российская Федерация

Исследованы условия освещения, позволяющие повысить контрастность визуализации биологических тканей при хирургических операциях. При этом использована специальная экспериментальная установка на основе светодиодной, динамически управляемой системы освещения. Операционная бригада проводила подбор оптимального освещения операционного поля при работе с отдельными органами и тканями животных (крысы), одновременно выполнялись экспериментальные исследования спектральных характеристик этих биологических объектов. На основе полученных данных проведен анализ яркостного и цветового контрастов, который включал сравнение с освещением объектов светом от галогенной лампы накаливания. По результатам исследований определены оптимальные спектрально-цветовые параметры освещения для контрастной визуализации различных тканей при проведении хирургических операций.

Ключевые слова: светодиод, RGB-смешение, динамическое управление освещением, хирургический светильник, контрастная визуализация биологических тканей

Ссылка при цитировании: Аладов А.В., Валюхов В.П., Закгейм А.Л., Купцов В.Д., Мамошин А.В., Потапова Е.В., Черняков А.Е., Фотиади А.Э. Оптимизация освещения операционного поля с целью получения максимального контраста при визуализации биологических объектов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 79–88. DOI: 10.18721/JPM.12408

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

OPTIMIZATION OF SURGICAL FIELD ILLUMINATION TO MAXIMIZE THE CONTRAST WHEN BIOLOGICAL OBJECTS BEING VISUALIZED

**A.V. Aladov¹, V.P. Valyukhov², A.L. Zakgeim¹, V.D. Kuptsov²,
A.V. Mamoshin^{3,4}, E.V. Potapova³, A.E. Chernyakov¹, A.E. Fotiadi²**

¹ Submicron Heterostructures for Microelectronics Research and Engineering Center of the RAS, St. Petersburg, Russian Federation;

² Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation;

³ Research and Development Center of Biomedical Photonics, Orel, Russian Federation;

⁴ Orel Regional Clinical Hospital, Orel, Russian Federation

The optimal lighting conditions for contrast imaging of biological tissues during surgical operations have been studied. In so doing a special experimental setup based on a dynamically con-

trolled LED lighting system was used. The operating team selected the optimal illumination of the operating field during work with individual organs and tissues of animals (rats); simultaneously experimental investigations of the spectral characteristics of these biological objects were carried out. Relying on such experimental data, an analysis of luminance and color contrasts, including a comparison with a halogen lamp effect was performed. Optimal spectral-color lighting parameters for contrast visualization of various tissues during surgical operations were determined.

Keywords: LEDs, RGB-mixing, dynamic light control, surgical lamp, contrast visualization of biological tissues

Citation: Aladov A.V., Valyukhov V.P., Zakgeim A.L., Kuptsov V.D., Mamoshin A.V., Potapova E.V., Chernyakov A.E., Fotiadi A.E., Optimization of surgical field illumination to maximize the contrast when biological objects being visualized, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (4) (2019) 79–88. DOI: 10.18721/JPM.12408

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

Введение

Цветовое восприятие объектов и, что особенно важно в хирургии, четкое определение границ тканей, даже слабо различающихся по цвету, значительно снижает риск неточных действий при проведении оперативного вмешательства [1, 2]. До недавнего времени представлялось, что лучшим для освещения операционных является получаемый от галогенных или ксеноновых ламп белый свет с высоким индексом цветопередачи, позволяющий наиболее точно воспроизводить цвет оперируемых тканей. В то же время известно, что повышение цветового контраста между наблюдаемыми объектами можно достичь с использованием «акцентного» окрашенного освещения, учитывающего спектральные зависимости коэффициента отражения объектов, в частности, различных биологических тканей. Такой подход может быть реализован на базе полихромных светодиодных излучателей с регулируемыми спектрально-цветовыми характеристиками, как это было впервые предложено в работе [3]. С помощью управляемого хирургического светильника была показана возможность контрастной визуализации опухолевых образований и тканей, претерпевших некротические изменения; при этом такие образования и ткани были локализованы не только вблизи поверхности, но и на некоторой глубине, под слоем здоровых тканей. В настоящее время интерес к подобного рода исследованиям — повышению контрастности визуализации биологических тканей в хирургии за счет специального освещения — растет [4–6].

Целью данной работы является опреде-

ление режимов оптимального освещения, обеспечивающих максимальный контраст объектов при проведении хирургических операций. В связи с этим, совместно исследовались спектрально-цветовые характеристики биологических тканей и спектров излучения перестраиваемого светильника.

Использованная установка и методика эксперимента

В лабораторных условиях, на базе Орловского государственного университета имени И.С. Тургенева (ОГУ) (г. Орел, Россия), с помощью светодиодного хирургического осветителя были проведены тестовые испытания на животных.

Экспериментальные исследования проводились на клинически здоровых крысах-самцах (2 особи линии Wistar, возраст — 6 мес), в соответствии с принципами надлежащей лабораторной практики GLP (согласно ГОСТ 33647-2015). Работа была одобрена этическим комитетом ОГУ (протокол № 10 от 16.10. 2017). Животных содержали в условиях карантина, контролируемых по температуре, влажности и чистоте, в течение 2 недель. Во время исследования крысы были подвергнуты анестезии препаратом Золетил 100 (Vibrac, Франция) в стандартных дозировках. Животных размещали на специальной фиксирующей платформе. Опыты проводились на участках кожи после предварительной депиляции, на подкожно-жировой клетчатке, на тканях мышц органов брюшной полости (кишечник и печень). После окончания манипуляций, животных выводили из опытов в соответствии с правилами проведения экспериментов.

Перестраиваемый по спектру хирургический светильник устанавливался над специальным операционным столом для мелких лабораторных животных на расстоянии 70 см и обеспечивал создание однородного светового поля размером не менее 20 × 20 см (рис. 1). В процессе исследований, с помощью программного обеспечения светильника LED lamp изменялись спектральные параметры светодиодной матрицы. Светодиодная RGBW(RGBWLED)-матрица включала четыре кристалла большой площади, разного цветового излучения: R – красного, G – зеленого, B – синего, а также W-кристаллы с люминофорным покрытием как источники белого света с коррелированной цветовой температурой (6500 K). Управление световыми параметрами светильника осуществлялось с удаленного компьютера PC. На основании субъективной зрительной оценки операционной бригады хирургов проводился подбор оптимального освещения операционного поля для тканей и органов. Спектральный состав испускаемого света контролировался переносным спектрометром MK350.

Процедура измерения коэффициентов отражения заключалась в следующем: биологический образец помещали в пучок падающего излучения; световой поток, отраженный от него, относили к величине падающего потока при отсутствии образца. При диффузном отражении или пропускании было необходимо собрать все лучи, рассеянные по разным направлениям.

Для получения спектральных характеристик тканей было проведено исследование с помощью комплекса OL 770-LED High-speed LED Test and Measurement system [7] (рис. 2).

Образцы для исследований были подготовлены в ОГУ по следующей методике.

Был использован набор стекол с образцами от двух особей. В соответствии с принципами “Good Laboratory Practice (GLP)” и концепцией “3Rs” (reduction, refinement and replacement) [8], а конкретно – с пунктом сокращения численности животных в эксперименте, количество исследуемых крыс принималось минимально возможным – две.

Предварительно проводились опыты для сравнения спектральных характеристик различных биологических тканей. Затем выполнялись многократные измерения од-

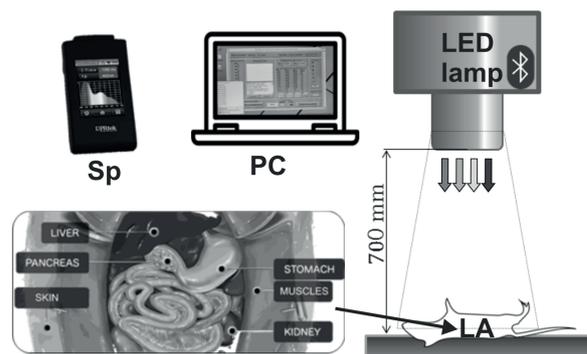


Рис. 1. Схема установки хирургического осветителя:

LED lamp – управляемый светодиодный светильник, Sp – спектрометр MK350, PC – персональный компьютер, LA – лабораторное животное (на вставке показаны и обозначены его внутренние органы)

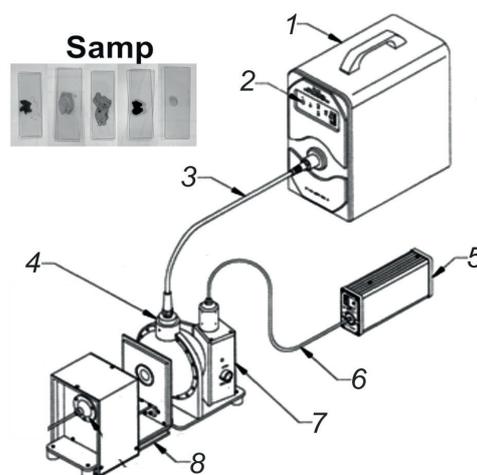


Рис. 2. Адаптированный измерительный комплекс OL-770 для проведения исследований спектральных характеристик биологических тканей:

1 – спектрометр; 2 – окно для подключения оптического волокна от источника света; 3, 6 – оптические волокна для регистрации сигнала и ввода излучения на образец, соответственно; 4 – приставка для измерения интегральных (диффузного и зеркального) спектров отражения; 5 – источник света; 7 – ввод излучения для измерения отражения; 8 – место для исследуемого образца, Samp – образцы тканей

ного и того же параметра (10 раз) исследуемой части биологического объекта, что позволяло достичь снижения относительной погрешности. Далее приведены результаты измерения, где кривые отражения получены как среднее арифметическое от двух аналогичных образцов.

Для исследования было выбрано десять видов биологических тканей: поджелудочная железа, печень, селезенка, кожа, сердце, мозг, мышца, почка, подкожный жир, мочевой пузырь. Тонкий срез изучаемой ткани толщиной 1 мм (получен при помощи скальпеля) помещался на предметное стекло размером $77 \times 26 \times 1$ мм. Стекла с объектами устанавливались в приставке OL770-71 для измерения спектров отражения. Образец фиксировался вторым тонким покровным стеклом.

Экспериментальные результаты

Подбор оптимального освещения операционного поля для каждого вида биологической ткани проводился с использованием светодиодной, динамически управляемой системы освещения на основании субъективной зрительной оценки операционной бригады. Критериями выбора контрастной визуализации служили следующие показатели:

яркостный и цветовой контрасты, по сравнению с окружающими тканями;

четкое различие анатомической структуры ткани и мелких деталей (отсутствие слияния).

Кроме этого учитывались:

комфортное зрительное восприятие;
оптимальная яркость;
отсутствие бликов и тени.

В качестве сравнения со светодиодной матрицей, при использовании которой был подобран оптимальный спектр (RGBWLED), использовалось освещение от галогенной лампы (HL) и матрицы белых светодиодов (WLED) с коррелированной цветовой температурой 2800 К. Спектральные характеристики этих источников представлены на рис. 3, а.

Полученные спектры отражения от различных биологических тканей, на которых можно видеть их различие, показаны на рис. 3, б.

Следует отметить, что анализ спектров отражения отдельных тканей различных органов позволяет более глубоко взглянуть на проблему оптического распознавания биологических тканей, а также дает возможность оценить различные морфологические и структурные изменения в биологических органах, состоящих из одинаковых клеток.

Оценка контраста визуализации биологических объектов на основе эксперимента

Границы биологических тканей в зрительной системе человека определяются яркостью и цветом граничащих органов. Яркостный контраст одного биологического органа на фоне другого дает достоверную оценку границ органов в приближении градиент серого и определяется, согласно [9],

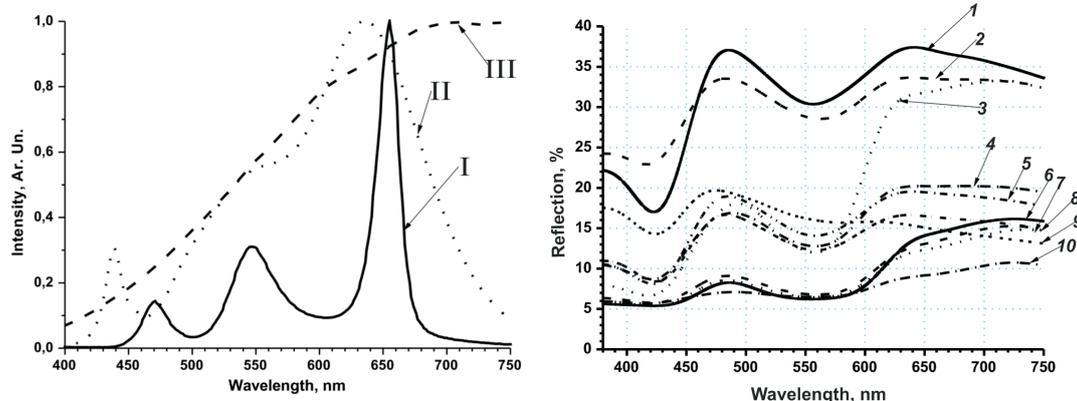


Рис. 3. Спектры излучения источников (а) и отражения от различных биологических тканей (б):
I – RGBWLED, II – WLED (светодиодные); III – HL (галогенная лампа);
1 – мозг, 2 – кожа, 3 – легкое, 4 – поджелудочная железа, 5 – мышца, 6 – сердце,
7 – печень, 8 – почка, 9 – мочевой пузырь, 10 – селезенка

следующим выражением:

$$\alpha = \frac{\Phi_{1\text{biotis}} - \Phi_{2\text{biotis}}}{\Phi_{1\text{biotis}} + \Phi_{2\text{biotis}}},$$

где $\Phi_{1,2\text{biotis}}$ – относительные потоки зрительного светового воздействия при отражении света от первого (1) и второго (2) граничащих органов.

Величины $\Phi_{1,2\text{biotis}}$ определяются интегралами от спектральной плотности потока зрительного светового воздействия, представляющего собой произведение трех сомножителей: спектра излучения источника света $E_{\text{source}}(\lambda)$, спектральной зависимости коэффициента отражения $R_{1,2\text{biotis}}$ и функции относительной спектральной световой эффективности (ФОССЭ) человеческого глаза $V(\lambda)$:

$$\begin{aligned} \Phi_{i\text{biotis}} &= \int_{380}^{780} \Phi_{i\text{sp biotis}}(\lambda) d\lambda = \\ &= \int_{380}^{780} E_{\text{source}}(\lambda) \cdot R_{i\text{biotis}}(\lambda) \cdot V(\lambda) d\lambda. \end{aligned}$$

Интегрирование проводится в диапазоне длин волн оптического излучения, видимом человеческим глазом: 380 – 780 нм.

Расчитанные таким образом яркостные контрасты препарата ткани печени на фоне других органов при освещении тремя типами источников представлены в табл. 1.

Максимумы спектральных плотностей зрительного светового воздействия от граничащих тканей располагаются на разных длинах волн и имеют различные амплитуды, при этом яркостный контраст слабо зависит от спектрального состава источника освещения у препарата ткани печени на фоне поджелудочной железы,

нервных волокон и подкожного жира. Контраст кровеносных сосудов на печени, наоборот, сильно зависит от спектрального состава источника освещения, что открывает возможность оптимизировать спектральный состав излучения осветителя с целью повышения яркостного контраста кровеносных сосудов. Расположение максимумов спектральных плотностей зрительного воздействия на разных длинах волн означает наличие существенного цветового контраста.

Различие цветов двух соприкасающихся объектов определяется разностью координат на цветовой диаграмме МКО 1931 [10].

Относительные спектральные плотности потока зрительного светового воздействия от двух граничащих биологических тканей (с номерами $i = 1, 2$) в системе цветов XYZ определяются выражениями[10]:

$$\begin{aligned} \Phi_{X\text{sp } i}(\lambda) &= E_{\text{source}}(\lambda) \cdot R_{i\text{biotis}}(\lambda) \cdot X(\lambda); \\ \Phi_{Y\text{sp } i}(\lambda) &= E_{\text{source}}(\lambda) \cdot R_{i\text{biotis}}(\lambda) \cdot Y(\lambda); \\ \Phi_{Z\text{sp } i}(\lambda) &= E_{\text{source}}(\lambda) \cdot R_{i\text{biotis}}(\lambda) \cdot Z(\lambda), \end{aligned}$$

где $X(\lambda)$, $Y(\lambda)$, $Z(\lambda)$ – функции сложения системы измерения цвета XYZ.

Относительные цветовые координаты (координаты цветностей) x_i , y_i зрительного светового воздействия биологических тканей определяются выражениями:

$$\begin{aligned} x_i &= \frac{\Phi_{X\text{sp } i}}{\Phi_{X\text{sp } i} + \Phi_{Y\text{sp } i} + \Phi_{Z\text{sp } i}}, \\ y_i &= \frac{\Phi_{Y\text{sp } i}}{\Phi_{X\text{sp } i} + \Phi_{Y\text{sp } i} + \Phi_{Z\text{sp } i}}. \end{aligned}$$

Как принято в колориметрии, каждый

Таблица 1
Яркостный контраст препарата ткани печени на фоне других биологических тканей при освещении различными источниками

Источник освещения	Поджелудочная железа	Нервные волокна	Кровеносные сосуды (вены)	Подкожный жир
HL	0,2570	0,5985	-0,0096	0,2972
RGBWLED	0,2548	0,5962	0,0012	0,2945
WLED	0,2542	0,5962	0,0066	0,2961

Примечание. Значения величины α (см. формулу в тексте) сопоставляются в относительных единицах.

цвет можно представить точкой в пространстве цветов XYZ с двумя цветовыми координатами x и y ; при этом координата z всегда линейно зависит от x и y .

Расстояние между двумя точками x_i, y_i на диаграмме МКО 1931 характеризует цветовое различие двух световых потоков и может быть использовано в качестве меры контраста. Таким образом, цветовой контраст одной биологической ткани ($i = 1$) на фоне другой ($i = 2$) определяется выражением

$$\alpha_{color} = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}.$$

В том случае, когда величина α_{color} выходит за границы эллипсов Мак-Адама [11, 12], граничащие ткани различимы по цвету, в противном случае цвета могут не различаться.

Расчеты цветового контраста проведены нами для практически важного случая визуализации печени на фоне других, граничащих с ней тканей, при освещении тремя источниками света (табл. 2). На рис. 4 представлены расчетные значения координат цветности x, y тех же самых биологических тканей.

По нашим результатам, значения цветового контраста α_{color} во всех случаях выходили за периметр эллипсов Мак-Адама. Наибольшее значение цветового контраста во

всех случаях наблюдалось при освещении тканей светодиодной матрицей RGBWLED, что согласуется с экспертной оценкой практикующих хирургов.

Заключение

В данной статье рассмотрены вопросы улучшения визуального определения *in vivo* морфологической принадлежности биологических тканей и органов, а также их дифференциации. Для решения указанной проблемы использовалась возможность светодиодных излучателей варьировать спектрально-цветовые характеристики в широких пределах и, как следствие, обеспечивать выбор освещения, наилучшего для контрастной визуализации того объекта (ткани), с которым в данный момент работает хирург.

Проведенные исследования спектральных характеристик биологических тканей показали заметную дифференциацию – различие биологических тканей по спектрам отражения и целесообразность выбора оптимальных спектрально-цветовых параметров освещения для их контрастной визуализации. В ходе экспериментальных исследований с использованием различных ламповых и светодиодных источников освещения (HL, RGBWLED и WLED) было показано, что наилучший контраст достигается при использовании

Таблица 2

Значения цветового контраста ткани печени α_{color} (отн. ед.) на фоне других биологических тканей от различных источников света

Цветовые координата и контраст	Печень	Поджелудочная железа	Подкожный жир	Вены	Нервные волокна
<i>Галогенная лампа (HL)</i>					
x	0,482	0,460	0,475	0,575	0,460
y	0,396	0,396	0,410	0,405	0,351
α_{color}	0	0,026	0,012	0,103	0,031
<i>Светодиодная матрица RGBWLED</i>					
x	0,461	0,440	0,457	0,576	0,438
y	0,410	0,427	0,420	0,351	0,435
α_{color}	0,0256	0,032	0,015	0,124	0,039
<i>Белый светодиод WLED</i>					
x	0,500	0,480	0,494	0,589	0,478
y	0,400	0,415	0,409	0,351	0,422
α_{color}	0	0,026	0,012	0,101	0,032

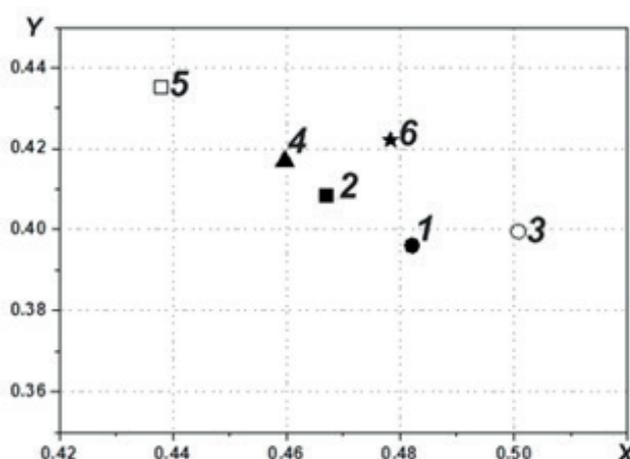


Рис. 4. Цветовая диаграмма МКО 1931, координаты цветности печени (1 – 3) и нервных волокон (4 – 6) при различном освещении: галогенной лампой (HL)(1, 4); светодиодной матрицей RGBWLED (2, 5); белым светодиодом (3, 6)

RGBWLED на основе светодиодной матрицы со специально подобранным по спектру освещением, причем оно может отличаться от спектра излучения белого света. Указанное отличие подтверждает перспективность применения различного освещения для визуализации тканей.

Таким образом, хирургический светильник должен иметь в своем составе общую систему освещения, сочетающую качественный белый свет и динамически

управляемую систему цветного освещения, обеспечивающую контрастную визуализацию биологических тканей.

Исследования выполнены при частичной поддержке Соглашения о субсидии с Минобрнауки России (Номер соглашения – ЭБ 075-02-2018-929, внутренний номер соглашения – 14.604.21.0187, уникальный идентификатор проекта – RFMEFI60417X0187).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Блинов Н.И., Хромов Б.М. Ошибки, опасности и осложнения в хирургии. Ленинград: Изд-во «Медицина», 1972. 213 с.
2. Knulst A.J., Stassen L.P.S., Grimbergen C.A., Dankelman J. Choosing surgical lighting in the LED era // Surgical Innovation. 2009. Vol. 16. No. 4. Pp. 317–323.
3. Аладов А.В., Бирючиский С.Б., Дубина М.В., Закгейм А.Л., Мизеров М.Н. Цветодинамически управляемый операционный светильник с полноцветным светодиодом // Светотехника. 2012. Вып. 2. С. 13–18.
4. Murai K., Kawahira K., Haneishi H. Improving color appearance of organ in surgery by optimally designed LED illuminant // Proc. World Congr. Med. Phys. Biomed. Eng. Vol. 39. Berlin, Germany: Springer, 2013. Pp. 1010–1013.
5. Wang H., Cuijpers R.H., Luo M.R., Heynderickx I., Zheng Z. Optimal illumination for local contrast enhancement based on the human visual system // J. Biomed Opt. 2015. Vol. 20. No. 1. Pp. 015005-1–015005-8.
6. Kurabuchi Y., Nakano K., Ohnishi T., Nakaguchi T., Hauta-Kasari M., Haneishi H. Optimization of surgical illuminant spectra for organ microstructure visualization // IEEE Access. 2019. May. Pp. 70733–70741.
7. Закгейм А.Л., Черняков А.Е. Измерительный комплекс для получения спектрорадиометрических, фотокolorиметрических и тепловых характеристик полупроводниковых излучателей // Светотехника. 2013. Вып. 4. С. 51–56.
8. Russell W.M.S., Burch R.L. The principles of human experimental technique. London: Methuen Publishing Ltd., 1959. 60 p.
9. Koschan A., Abidi M. Digital color image processing. New York, USA: John Wiley & Sons, 2008. Pp. 11–12.
10. Юстова Е.Н. Цветовые измерения (колориметрия). СПб.: Изд-во СПбГУ, 2003. 397 с.
11. Guild J. The colorimetric properties of the spectrum // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A. 1932. Vol.

230. Pp. 149–187. differences in daylight // J. Opt. Soc. Am. 1942.
12. MacAdam D.L. Visual sensitivities to color Vol. 32. No. 5. Pp. 247–274.

Статья поступила в редакцию 18.10.2019, принята к публикации 01.11.2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АЛАДОВ Андрей Вальменович – старший научный сотрудник Научно-технологического центра микроэлектроники и субмикронных гетероструктур Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26.
aaladov@mail.ioffe.ru

ВАЛЮХОВ Владимир Петрович – доктор технических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
Valyukhov@yandex.ru

ЗАКГЕЙМ Александр Львович – кандидат технических наук, ученый секретарь, заведующий лабораторией Научно-технологического центра микроэлектроники и субмикронных гетероструктур Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26.
zakgeim@mail.ioffe.ru

КУПЦОВ Владимир Дмитриевич – доктор технических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vdkuptsov@yandex.ru

МАМОШИН Андриан Валерьевич – кандидат медицинских наук, доцент, старший научный сотрудник Научно-технологического центра биомедицинской фотоники Орловского государственного университета имени И.С. Тургенева*, врач-хирург Орловской областной клинической больницы**, г. Орёл, Российская Федерация.

*302026, Российская Федерация, г. Орёл, Комсомольская ул., 95

**302028, Российская Федерация, г. Орёл, бульвар Победы, 10

dr.mamoshin@mail.ru

ПОТАПОВА Елена Владимировна – кандидат технических наук, доцент, старший научный сотрудник Научно-технологического центра биомедицинской фотоники Орловского государственного университета имени И.С. Тургенева, г. Орёл, Российская Федерация.

302026, Российская Федерация, г. Орёл, Комсомольская ул., 95
potarova_ev_ogu@mail.ru.

ЧЕРНЯКОВ Антон Евгеньевич – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Научно-технологического центра микроэлектроники и субмикронных гетероструктур Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26.
chernyakov.anton@yandex.ru

ФОТИАДИ Александр Эпаминондович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
fotiadi@rphf.spbstu.ru

REFERENCES

1. **Blinov N.I., Khromov B.M.**, Oshibki, opasnosti i oslozhneniya v khirurgii [Mistakes, dangers and complications in the surgery], Medicine Publishing, Leningrad, 1972.
2. **Knulst A.J., Stassen L.P.S., Grimbergen C.A., Dankelman J.**, Choosing surgical lighting in the LED era, *Surgical Innovation*. 16 (4) (2009) 317–323.
3. **Aladov A.V., Biryuchiskiy S.B., Dubina M.V., et al.**, Tsvetodinamicheski upravlyayemyy operatsionnyy svetilnik s polnotsvetnym svetodiodom [Color-dynamically controlled operating lamp with a full-color LED], *Light and Engineering (Svetotekhnika)*. (2) (2012) 13–18.
4. **Murai K., Kawahira K., Haneishi H.**, Improving color appearance of organ in surgery by optimally designed LED illuminant, *Proc. World Congr. Med. Phys. Biomed. Eng.*, Berlin, Germany: Springer. 39 (2013) 1010–1013.
5. **Wang H., Cuijpers R.H., Luo M.R., et al.**, Optimal illumination for local contrast enhancement based on the human visual system, *J. Biomed Opt.* 20 (1) (2015) 015005-1–015005-8.
6. **Kurabuchi Y., Nakano K., Ohnishi T., et al.**, Optimization of surgical illuminant spectra for organ microstructure visualization, *IEEE Access*. (May) (2019) 70733–70741.
7. **Zakgeim A.L., Chernyakov A.E.**, Izmeritelnyy kompleks dlya polucheniya spektrometricheskikh, fotokolorimetriceskikh i teplovykh kharakteristik poluprovodnikovyykh izluchateley [Measuring complex for obtaining spectroradiometric, photolorimetric and thermal characteristics of semiconductor emitters], *Light and Engineering (Svetotekhnika)*. (4) (2013) 51–56.
8. **Russell W.M.S., Burch R.L.**, The principles of human experimental technique, Methuen Publishing Ltd, London, 1959, 60 p.
9. **Koschan A., Abidi M.**, Digital color image processing, John Wiley & Sons, New York, USA (2008) 11–12.
10. **Yustova E.N.**, Tsvetovyye izmereniya (kolorimetriya) [Color measurement (colorimetry)], St. Petersburg University Publishing, St. Petersburg, 2003.
11. **Guild J.**, The colorimetric properties of the spectrum, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A*. 230 (1931) 149–187.
12. **MacAdam D.L.**, Visual sensitivities to color differences in daylight, *J. Opt. Soc. Am.* 32 (5) (1942) 247–274.

Received 18.10.2019, accepted 01.11.2019.

THE AUTHORS

ALADOV Andrey V.

Submicron Heterostructures for Microelectronics, Research & Engineering Center, RAS

26 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
aaladov@mail.ioffe.ru

VALYUKHOV Vladimir P.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
Valyukhov@yandex.ru

ZAKGEIM Alexander L.

Submicron Heterostructures for Microelectronics Research and Engineering Center of the RAS

26 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
zakgeim@mail.ioffe.ru

KUPTSOV Vladimir D.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
vdkuptsov@yandex.ru

MAMOSHIN Andrian V.

Research and Development Center of Biomedical Photonics
95 Komsomolskaya St., Orel, 302026, Russian Federation;
Orel Regional Clinical Hospital
10 Pobedy Ave., Orel, 302028, Russian Federation
dr.mamoshin@mail.ru

POTAPOVA Elena V.

Research and Development Center of Biomedical Photonics
95 Komsomolskaya St., Orel, 302026, Russian Federation
potapova_ev_ogu@mail.ru

CHERNYAKOV Anton E.

Submicron Heterostructures for Microelectronics Research and Engineering Center of the RAS
26 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
chernyakov.anton@yandex.ru

FOTIADI Alexander E.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
fotiadi@rphf.spbstu.ru

DOI: 10.18721/JPM.12409
УДК 538.956 и 621.317.7

УСТАНОВКА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ПЕТЕЛЬ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ГИСТЕРЕЗИСА НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО МЕТОДА СОЙЕРА – ТАУЭРА

А.Ф. Вакуленко¹, С.Б. Вахрушев², А.В. Филимонов¹ Н. Чжан³

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург,
Российская Федерация

³ Сианьский университет Цзяо Тун, г. Сиань, Китайская Народная Республика

В статье рассматривается устройство и практическое применение созданного авторами автоматического измерителя петель сегнетоэлектрического гистерезиса на основе микроконтроллера Atmega328. Проанализированы современные подходы к использованию классической схемы Сойера – Тауэра и показана практическая необходимость в выполненной разработке прибора. Приводится принципиальная схема и описание основных узлов созданного устройства. Представлены результаты тестовых измерений петель гистерезиса в монокристалле титаната бария, которые сравниваются с ранее опубликованными данными. Изложены также результаты измерения петель сегнетоэлектрического гистерезиса в монокристалле твердого раствора $(\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3)_{0,8}(\text{PbTiO}_3)_{0,2}$ (PMN-PT20) в температурном диапазоне 130 – 300 К.

Ключевые слова: поляризация, сегнетоэлектрик, гистерезис, схема Сойера – Тауэра

Ссылка при цитировании: Вакуленко А.Ф., Вахрушев С.Б., Филимонов А.В., Чжан Н. Установка для измерения петель сегнетоэлектрического гистерезиса на основе модифицированного метода Сойера – Тауэра // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 89–96. DOI: 10.18721/JPM.12409

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

AN AUTOMATIC SYSTEM FOR MEASURING THE FERROELECTRIC HYSTERESIS LOOPS USING THE MODIFIED SAWYER – TOWER CIRCUIT

A.F. Vakulenko¹, S.B. Vakhrushev², A.V. Filimonov¹, N. Zhang³

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russian Federation;

² The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences,
St. Petersburg, Russian Federation

³ Xian Jiaotong University, Xian, China

In the article, an equipment and practical application of an automatic system (created by the authors) for measuring the ferroelectric hysteresis loops using the Atmega328 microcontroller have been considered. The modern approaches to the classical Sawyer – Tower circuit's application was analyzed, and practical need for such development was proven. The schematic diagram and description of the main device's components were given. Test results on measuring

the hysteresis loops in a barium titanate single crystal were presented, and they were compared with the data published earlier. Moreover, the results on measuring the ferroelectric hysteresis loops of an [110]-oriented $0.8\text{Pb}(\text{M}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3-0.2\text{PbTiO}_3$ single crystal in a temperature range of 120–300 K at frequencies from 2 to 50 Hz were presented.

Keywords: polarization, ferroelectric, hysteresis, Sawyer – Tower circuit

Citation: Vakulenko A.F., Vakhrushev S.B., Filimonov A.V., Zhang N., An automatic system for measuring the ferroelectric hysteresis loops using the modified Sawyer – Tower circuit, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (4) (2019) 89–96. DOI: 10.18721/JPM.12409

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

Введение

Зависимость величины поляризации от внешнего электрического поля в сегнетоэлектриках представляет собой петлю гистерезиса и является одной из основных характеристик сегнетоэлектрических материалов. Первые работы по измерению петель гистерезиса были проведены в 1930-х годах Соьером и Тауэром, и с тех пор метод назван их именами. В первоначальном варианте схема представляла собой генератор высокого напряжения и последовательное присоединение к нему плоского конденсатора образца и опорного конденсатора, подключенных к отклоняющим пластинам трубки Брауна. К настоящему времени данная схема измерений многократно модифицировалась, предложены варианты компенсации паразитных эффектов в образце [1], различные способы измерения выходного сигнала [2], а также специальные формы подаваемого измерительного напряжения [3–5].

В классической схеме применяется синусоидальный или треугольный измерительный сигнал. В этом случае одной из главных проблем при измерении петель гистерезиса является поворот фазы измеряемого сигнала из-за паразитных эффектов в образце, например, из-за высокой величины проводимости. Это выражается в искажении петли или вовсе в появлении петли у материала, у которого ее быть не должно, что подробно описано в работе [6]. Решением проблемы является применение сложной формы измерительного сигнала, например приложение пар импульсов каждой полярности. Этот метод носит название “Positive up negative down” (PUND); также в литературе встречается название “Double wave method” (DWM) [3]. В данном методе переключение поляризации происходит на первых импульсах (полуволнах), а на вторых

измеряются все эффекты, не сохранившиеся при снятии внешнего электрического поля. Встречаются и более сложные измерительные сигналы, но их описание выходит за рамки настоящей работы.

Хотя оригинальная схема измерений, благодаря своей простоте, встречается довольно часто и в настоящее время, она имеет множество недостатков. Самый главный из них – сложность сбора данных. До массового распространения цифровых осциллографов единственным способом сохранения измеренных петель было фотографирование экрана осциллографа или перенос изображения на полупрозрачную бумагу (пленку).

Одним из главных достоинств цифрового осциллографа можно считать возможность сохранения численных данных измеренного сигнала. Такой функцией снабжен каждый современный цифровой осциллограф, но далеко не каждый из них позволяет сохранять числовые значения измерений, проведенных в XY-режиме, который необходим для применения схемы Соьера – Тауэра. В большинстве случаев присутствует возможность сохранять только значения данных обоих каналов осциллографа от времени, что неудобно и требует постоянного переключения между двумя режимами. Также такой метод становится значительно сложнее при использовании специальных форм измерительного сигнала в случае модифицированных схем. Например, в методе двойной волны присутствуют относительно длинные паузы между полуволнами, необходимые для разряда опорного конденсатора, и у осциллографа вполне может не хватить объема памяти для качественного захвата такого долгого процесса измерения.

Также немаловажной проблемой использования осциллографа является необходимость личного присутствия оператора,



поскольку большинство приборов не снабжено автоматической системой сохранения данных синхронно с некоторым внешним процессом. В реальных экспериментах вполне может возникнуть необходимость измерения сотен петель гистерезиса в течение значительного промежутка времени, например, при длительном проходе по температурному диапазону. В таком случае необходимо использовать какую-либо универсальную цифровую систему сбора данных, подобные системы широко распространены в настоящее время.

В данной статье описывается простая в изготовлении система сбора данных на основе широкодоступных, недорогих компонентов и пример ее практического применения — изучение поляризации монокристалла сегнетоэлектрика PMN-20PT.

Схема и принцип работы устройства

Предлагаемый измеритель петель сегнетоэлектрического гистерезиса построен на базе микроконтроллера Atmega328, входящего в состав отладочной платы Arduino Uno. Принципиальная схема устройства представлена на рис. 1. Для измерения петли гистерезиса необходимо иметь как минимум один выходной канал аналогового напряжения и один входной. На представленной схеме выходной канал построен на базе микросхемы ЦАП DAC8512, который имеет встроенный источник опорного напряжения, разрешение 12 бит и выходное напряжение в диапазоне от 0 до 4,095 В. Для расширения диапазона выходных напряжений до ± 10 В применяется операционный усилитель (ОУ); в данном приборе это четырехканальный ОУ модели LM324. Напряжение питания ОУ, которое составляет ± 12 В, обеспечивает необходимый размах выходного сигнала. В качестве опорного источника для смещения выходного сигнала при масштабировании диапазонов выбран диодный шунт AD1580 с напряжением стабилизации 1,225 В, током стабилизации от 50 мкА до 10 мА и выходным сопротивлением 0,5 Ом. Подстроечные потенциометры границ диапазона (R7) и нуля (R5) имеют 25 оборотов, что позволяет производить настройку масштабирования выходного напряжения с точностью не хуже 0,5%. Входной канал измеряет падение напряжения на опорном конденсаторе и имеет диапазон ± 5 В. В качестве АЦП используется встроенный преобразователь

микросхемы Atmega328, имеющий 6 каналов, разрешение 10 бит и опорное напряжение, подаваемое на вход AnalogVref (5 В). Поскольку напряжения на исследуемом образце могут значительно превосходить допустимые входные величины, на входном канале устанавливаются механизмы защиты от пробоя образца (стабилитроны, TVS-диоды и прочее). К сожалению, такое решение имеет свои недостатки, так например, токи утечки стабилитронов, включенных параллельно опорному конденсатору, будут влиять на измерения подобно фазовращающему переменному резистору R13, что не всегда приемлемо. Одним из вариантов более качественной защиты может являться установка высоколинейной опторазвязки, например HCNR201. Блок питания устройства построен на основе микросхем L78L05, L78L06 и MAX680 и обеспечивает напряжения питания +5 и ± 12 В.

На схеме приведен пример внешних подключений: усилитель напряжения с коэффициентом усиления 100 и установленный образец (плоский конденсатор с исследуемым материалом). В случае, если усилитель напряжения является нелинейным или имеет нестабильные параметры, необходимо также измерять его выходное напряжение. Для этой цели создается еще один аналоговый входной канал (подобный описанному выше), который подключается через делитель к выходу высоковольтного усилителя. В таком случае форма импульсов напряжения выходного канала выбирается исходя из известного поведения усилителя, а значения напряжения на образце и на опорном конденсаторе синхронно измеряются в процессе работы двумя входными каналами.

Величина опорного конденсатора выбирается так, чтобы падение напряжения на нем оставалось в пределах допустимого, но при этом занимало значительную часть диапазона входных напряжений. Для простоты подбора этой величины обычно собирается блок конденсаторов, которые могут подключаться к схеме как ручным галетным переключателем, так и электромагнитными реле, управляемыми микроконтроллером.

Резистор R13 используется для компенсации сдвига фазы между приложенным напряжением и напряжением на опорном конденсаторе, появляющемся в случае значительной проводимости исследуемого образца, а также он может быть ис-

пользован в качестве токоизмерительного сопротивления. В последнем случае опорный конденсатор отключается от цепи, а падение напряжения на резисторе R13 пересчитывается в протекающий через него ток, таким образом можно измерять токовые петли гистерезиса. Величины данного сопротивления обычно составляют единицы-десятки МОм в случае компенсации фазовращения и десятки-сотни кОм в случае измерений тока. В качестве токоизмерительного резистора удобно использовать двоянные потенциометры, в таком случае одну из его половин можно подключить к еще одному каналу АЦП микроконтроллера в режиме делителя опорного напряжения; тогда микроконтроллер может в любой момент измерить значение сопротивления токоизмерительного резистора для мгновенного пересчета напряжения в ток.

Связь микроконтроллера с компьютером можно осуществлять по стандарту RS232, для реализации которого необходимо снабдить схему преобразователем уровней UART-RS232, или же по встроенному в отладочную плату USB-интерфейсу в режиме виртуального COM-порта со скоростью передачи данных до 1 Мбит/с. Программи-

рование микроконтроллера может осуществляться в стандартной среде Arduino IDE, не требующей отдельного программатора, или же в среде AVR Studio с использованием I2C/SPI программатора.

Экспериментальные исследования

Измерения петель сегнетоэлектрического гистерезиса были проведены на двух образцах: монокристаллах сегнетоэлектриков BaTiO_3 (ВТО) и $0,8\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3 - 0,2\text{PbTiO}_3$ (PMN-20РТ).

Монокристаллы были подготовлены следующим образом: изначально крупные образцы нарезались на пластины с ориентацией плоскости [110] и толщинами 70 мкм для PMN-20РТ и 600 мкм для ВТО, затем поверхности пластин шлифовались алмазной суспензией DiaPro Nap R до уровня шероховатости менее 1 мкм. На обе стороны пластин наносились проводящие электроды «хром-золото» толщиной 84 нм (Cr 4 nm, Au 80 nm); для этой цели применялась вакуумная установка для нанесения тонких пленок Moorfield Minilab 080. Для нарезки применялся станок Struers Accutom 50, для измерения кристаллографической ориентации – рентгеновский дифрактометр

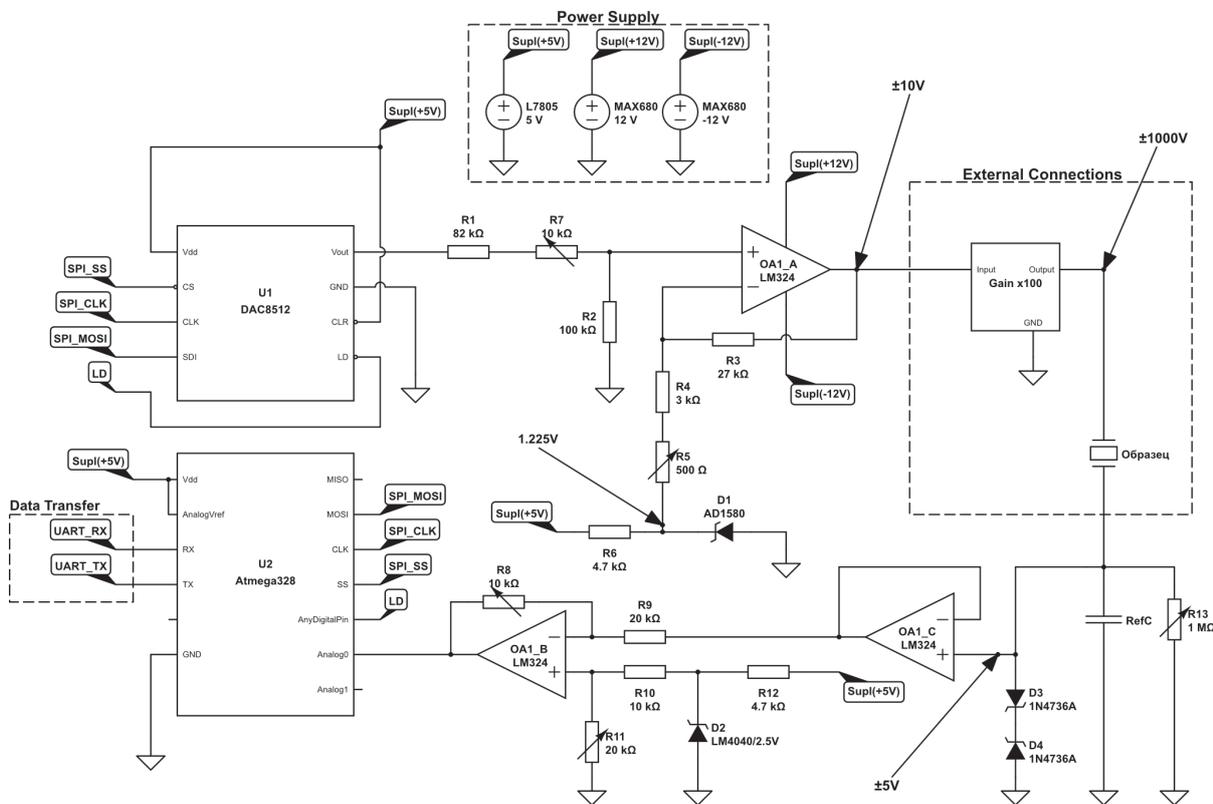


Рис. 1. Принципиальная схема основных узлов измерителя петель сегнетоэлектрического гистерезиса

SuperNova.

Хорошо изученный материал – монокристалл титаната бария (BaTiO_3) был выбран в качестве тестового образца для проверки и настройки созданного прибора. На рис. 2 представлены полученные петли гистерезиса (темные квадраты) и сигнал вторых полувольт (светлые круги). Значительная разница между сигналами первого и второго прохода указывает на то, что в образце происходит переключение поляризации, которая сохраняется даже при снятии внешнего поля. Положительная и отрицательная части петли смещены относительно друг друга из-за того, что после приложения каждой полувольты измерительного сигнала опорный конденсатор разряжался до нуля. Полученные результаты с хорошей точностью (порядка 10 – 15 %) соответствуют измеренным в работе [7] петлям гистерезиса на том же материале.

В качестве научно-практического применения разработанного прибора далее приводятся результаты по измерению петель гистерезиса в PMN-20PT из нашей работы [8]. Многочисленные исследования процессов переключения поляризации в твердых растворах PMN-PT [9, 10] указывают на линейную зависимость величины коэрцитивного электрического поля от температуры. В работе [11] описывается темпера-

турная модель гистерезиса в сегнетоэлектриках, и представленная там зависимость величины коэрцитивного электрического поля от температуры является нелинейной. Мы предполагаем, что в указанных экспериментальных работах температурный диапазон был недостаточно широк для наблюдения нелинейности.

С помощью разработанного прибора было проведено измерение петель сегнетоэлектрического гистерезиса в температурном диапазоне от 130 К до 300 К. На рис. 3, *a* представлены квазистатические (измеренные на частоте 2 Гц) сегнетоэлектрические петли гистерезиса при различных температурах. Для повышения точности измерений применялся метод двойной волны (DWM). На рис. 3, *b* представлены полученные результаты для первых (темные точки) и вторых (светлые точки) полувольт. Значительная разница между сигналами первого и второго прохода означает, что «ступеньки» измеренных петель гистерезиса вызваны переключением поляризации, паразитные эффекты малы и их можно не учитывать. Значения коэрцитивных электрических полей были получены с использованием измеренных петель гистерезиса (рис. 3, *c*).

Полученные нами зависимости коэрцитивных электрических полей от температуры нелинейны, что соответствует модели

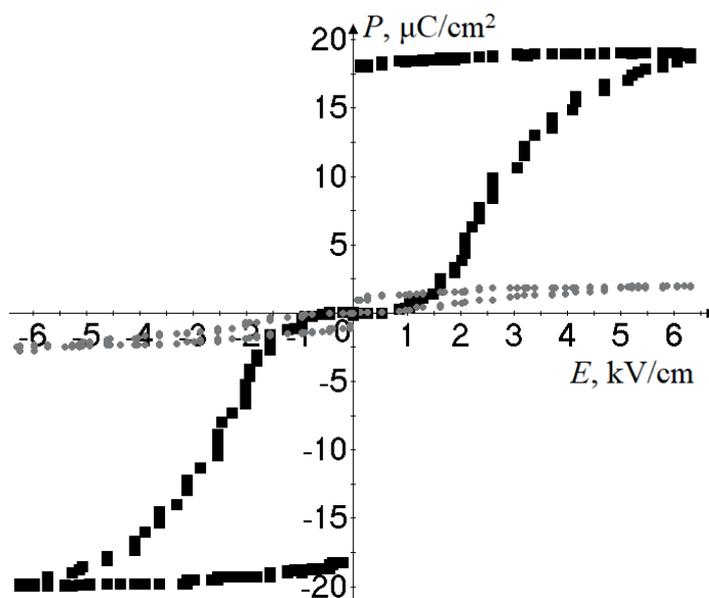


Рис. 2. Петля гистерезиса, полученная методом двойной волны на монокристалле BaTiO_3 ; использован созданный измеритель.

Амплитуда и частота измерительного сигнала равны 400 В и 50 Гц соответственно; темные квадраты – сигнал первых полувольт, светлые круги – сигнал вторых полувольт

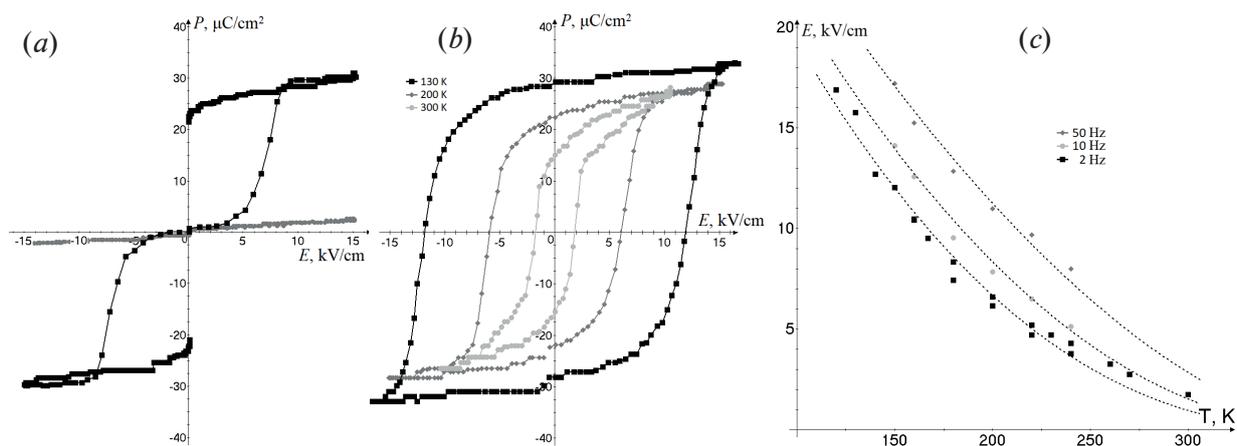


Рис. 3. Петля гистерезиса, полученная методом двойной волны в монокристалле PMN-20РТ (а); петли гистерезиса, измеренные классическим способом при различных температурах (b). Зависимости коэрцитивных полей от температуры при различных измерительных частотах (с).

На рис. 3,а темные точки – сигналы первых полуволн, светлые – сигналы вторых полуволн

сегнетоэлектрического гистерезиса, описанной в работе [11]. Согласно указанной модели, величина коэрцитивного электрического поля E_c выражается как

$$E_c = E_h \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^p, \quad (1)$$

где E_h – поле смещения [12], T_c – температура Кюри, p – безразмерная константа.

С использованием выражения (1) был проведен регрессионный анализ полученных зависимостей. Коэффициенты, входящие в это выражение, были следующими (определены методом наименьших квадратов):

$$\begin{aligned} E_h &= 40,1 \text{ кВ/см}; T_c = 380 \text{ К}; \\ p &= 2,4 \text{ при } 2 \text{ Гц}; p = 2,1 \text{ при } 10 \text{ Гц}; \\ p &= 1,7 \text{ при } 50 \text{ Гц}. \end{aligned}$$

Оценку и сравнение полученных коэффициентов провести затруднительно, так как на данный момент наша экспериментальная работа, которая проведена на монокристалле PMN-20РТ с применением

вышеуказанной модели, является пионерской.

Заключение

В настоящей работе был разработан и создан простой и эффективный измеритель петель сегнетоэлектрического гистерезиса, реализующий как классическую схему Соьера – Тауэра, так и модифицированный метод «двойной волны». Представлена принципиальная схема основных узлов данного измерителя. Прибор протестирован на монокристалле титаната бария и показал хорошую точность измерений. Продемонстрировано практическое применение созданного измерителя в реальной научной задаче: получены петли гистерезиса и значения величин коэрцитивных полей монокристалла PMN-20РТ в температурном диапазоне 130 – 300 К.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и ГФЕН Китая в рамках научного проекта №19-52-53026.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hikam M., Rachmat A., Ode L., Bambang S., Arief S. The electrical hysteresis loop and polarization value of $\text{BaZr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{O}_3$ multilayer films material at different annealing temperature ($x = 0.1$ and 0.08) based on Sawyer – Tower circuit // Proceedings of the 2014 International Conference on Physics and its Applications (ICOPIA-14). Atlantis Press, 2014. Pp. 41–48.
2. Печерская Е.А. Применение метода Соьера – Тауэра и его модификаций для измерения электрических параметров сегнетоэлектриков // Измерительная техника. 2007. № 10. С. 54–58.
3. Fukunaga M., Noda Y. New technique for measuring ferroelectric and antiferroelectric hysteresis loops // Journal of the Physical Society



of Japan. 2008. Vol. 77. No. 6. P. 064706.

4. Fina I., Fabrega L., Langenberg E., Marti X., Sanchez F., Varela M., Fontcuberta J. Nonferroelectric contributions to the hysteresis cycles in manganite thin films: A comparative study of measurement techniques //Journal of Applied Physics. 2011. Vol. 109. No. 7. P. 074105.

5. Liu J., Zhao Y., Chen C., Wei X., Zhang Z. Study on the polarization and relaxation processes of ferroelectric polymer films using the Sawyer–Tower circuit with square voltage waveform //The Journal of Physical Chemistry. C. 2017. Vol. 121. No. 23. Pp. 12531–12539.

6. Tylczynski Z. A collection of 505 papers on false or unconfirmed ferroelectric properties in single crystals, ceramics and polymers //Frontiers of Physics. 2019. Vol. 14. No. 6. P. 63301.

7. Wongdamnern N., Ngamjarurojana A., Laosiritaworn Y., Ananta S., Yimnirun R. Dynamic ferroelectric hysteresis scaling of BaTiO₃ single crystals // Journal of Applied Physics. 2009. Vol. 105. No. 4. P. 044109.

8. Vakulenko A.F., Vakhrushev S.B., Filimonov

A.V. Investigation of polarization switching processes in 0.8PMN–0.2PT single crystal in a temperature range from 100 K to 300 K // Ferroelectrics. 2019. Vol. 542. No. 1. Pp. 77–84.

9. Zhang Y., Chen Z., Cao W., Zhang Z. Temperature and frequency dependence of the coercive field of 0.71PbMn_{1/3}Nb_{2/3}O₃–0.29PbTiO₃ relaxor-based ferroelectric single crystal //Applied Physics Letters. 2017. Vol. 111. No. 17. P. 172902.

10. Chen I.W., Wang Y. A domain wall model for relaxor ferroelectrics //Ferroelectrics. 1998. Vol. 206. No. 1. Pp. 245–263.

11. Raye J.K., Smith R.C. A temperature-dependent hysteresis model for relaxor ferroelectric compounds //Smart Structures and Materials 2004: Modeling, Signal Processing, and Control. International Society for Optics and Photonics. 2004. Vol. 5383. Pp. 1–10.

12. Smith R.C., Seelecke S., Ounaies Z., Smith J. A free energy model for hysteresis in ferroelectric materials // Journal of Intelligent Material Systems and Structures. 2003. Vol. 14. No. 11. Pp. 719–739.

Статья поступила в редакцию 25.10.2019, принята к публикации 05.11.2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ВАКУЛЕНКО Александр Феликсович – инженер научно-образовательного центра «Физика нанокompозитных материалов электронной техники» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
sasha705@mail.ru

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

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
s.vakhrushev@mail.ioffe.ru

ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы, директор научно-образовательного центра «Физика нанокompозитных материалов электронной техники» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
filimonov@rphf.spbstu.ru

ЧЖАН Нан – научный сотрудник Сианьского университета Цзяо Тун, г Сиань, Китайская Народная Республика.

28 Xianning W Rd, Jiaoda Commerce Block, Beilin, Xi'an, Shaanxi, China
ic@mail.xjtu.edu.cn

REFERENCES

1. Hikam M., Rachmat A., Ode L., et al., The electrical hysteresis loop and polarization value of BaZr_xTi_{1-x}O₃ multilayer films material at different annealing temperature ($x = 0.1$)

and 0.08) based on Sawyer – Tower circuit, Proceedings of the 2014 International Conference on Physics and its Applications (ICOPIA-14), Atlantis Press (2014) 41–48.

2. **Pecherskaya E.A.**, Primeneniye metoda Soyera–Tauera i yego modifikatsiy dlya izmereniya elektricheskikh parametrov segnetoelektrikov [Applying the Sawyer – Tower technique and its modification for measuring the electric parameters of ferroelectrics], Izmeritelnaya Tekhnika (Measuring Technique). (10) (2007) 54–58.

3. **Fukunaga M., Noda Y.**, New technique for measuring ferroelectric and antiferroelectric hysteresis loops, Journal of the Physical Society of Japan. 77 (6) (2008) 064706.

4. **Fina I., Fabrega L., Langenberg E., et al.**, Nonferroelectric contributions to the hysteresis cycles in manganite thin films: A comparative study of measurement techniques, Journal of Applied Physics. 109 (7) (2011) 074105.

5. **Liu J., Zhao Y., Chen C., et al.**, Study on the polarization and relaxation processes of ferroelectric polymer films using the Sawyer – Tower circuit with square voltage waveform, The Journal of Physical Chemistry, C. 121 (23) (2017) 12531–12539.

6. **Tylczynski Z.**, A collection of 505 papers on false or unconfirmed ferroelectric properties in single crystals, ceramics and polymers, Frontiers

of Physics. 14 (6) (2019) 63301.

7. **Wongdamnern N., Ngamjarurojana A., Laosiritaworn Y., et al.**, Dynamic ferroelectric hysteresis scaling of BaTiO₃ single crystals, Journal of Applied Physics. 105 (4) (2009) 044109.

8. **Vakulenko A.F., Vakhrushev S.B., Filimonov A.V.**, Investigation of polarization switching processes in 0.8PMN-0.2PT single crystal in a temperature range from 100 K to 300 K, Ferroelectrics. 542 (1) (2019) 77–84.

9. **Zhang Y., Chen Z., Cao W., Zhang Z.**, Temperature and frequency dependence of the coercive field of 0.71PbMn_{1/3}Nb_{2/3}O₃-0.29PbTiO₃ relaxor-based ferroelectric single crystal, Applied Physics Letters. 111 (17) (2017) 172902.

10. **Chen I.W., Wang Y.**, A domain wall model for relaxor ferroelectrics, Ferroelectrics. 206 (1) (1998) 245–263.

11. **Raye J.K., Smith R.C.**, A temperature-dependent hysteresis model for relaxor ferroelectric compounds, “Smart Structures and Materials 2004: Modeling, Signal Processing, and Control” (International Society for Optics and Photonics), 5383 (2004) 1–10.

12. **Smith R.C., Seelecke S., Ounaies Z., Smith J.**, A free energy model for hysteresis in ferroelectric materials, Journal of Intelligent Material Systems and Structures. 14 (11) (2003) 719–739.

Received 25.10.2019, accepted 05.11.2019.

THE AUTHORS

VAKULENKO Aleksandr F.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
vakulenko705@gmail.com

VAKHRUSHEV Sergey B.

Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
s.vakhrushev@mail.ioffe.ru

FILIMONOV Alexey V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
filimonov@rphf.spbstu.ru

ZHANG Nan

Xian Jiaotong University
28 Xianning W Rd, Jiaoda Commerce Block, Beilin, Xian, Shaanxi, China
ic@mail.xjtu.edu.cn

DOI: 10.18721/JPM.12410
УДК 533.9.01

ПОЛОЖИТЕЛЬНЫЙ СТОЛБ РАЗРЯДА ПОСТОЯННОГО ТОКА В ЛАЗЕРНЫХ ТРУБКАХ ПЕРЕМЕННОГО ДИАМЕТРА

В.А. Кожевников, В.Е. Привалов, А.Э. Фотиади

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Рассмотрены процессы в положительном столбе разряда постоянного тока в газе и получены выражения, связывающие внешние параметры столба (меняющийся радиус разрядного канала, давление напуска газа и разрядный ток) с «внутренними» характеристиками (концентрация заряженных частиц, электронная температура, напряженность «продольного» электрического поля).

Ключевые слова: характеристика плазмы положительного столба, лазерная трубка переменного диаметра, геометрия активного элемента

Ссылка при цитировании: Кожевников В.А., Привалов В.Е., Фотиади А.Э. Положительный столб разряда постоянного тока в лазерных трубках переменного диаметра // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 97–107. DOI: 10.18721/JPM.12410

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

POSITIVE COLUMN OF A DIRECT CURRENT DISCHARGE IN LASER TUBES OF VARIABLE DIAMETER

V.A. Kozhevnikov, V.E. Privalov, A.E. Fotiadi

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russian Federation

A positive column of a direct current discharge in monoatomic gas is considered and expressions are obtained that relate the external parameters of the column (varying radius of the discharge channel, gas pressure and discharge current) to the “internal” characteristics (concentration of charged particles, electron temperature, and longitudinal electric field strength).

Keywords: positive column plasma characteristic, variable diameter laser tube, active element geometry

Citation: Kozhevnikov V.A., Privalov V.E., Fotiadi A.E., Positive column of a direct current discharge in laser tubes of variable diameter, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (4) (2019) 97–107. DOI: 10.18721/JPM.12410

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

В наиболее распространенных газоразрядных лазерах (ГРЛ), таких, например, как гелий-неоновый (He-Ne), гелий-кадмиевый (He-Cd), в качестве активной среды используется положительный столб (ПС) тлеющего разряда постоянного тока низкого давления в цилиндрических трубках. Обычно активный элемент лазера помещается в оптический резонатор типа плоскость – сфера. Форма каустики в таком резонаторе заметно отличается от цилиндрической. Поэтому часть возбужденных атомов, образующихся в «цилиндрическом» разряде, не участвует в формировании «эффективного» коэффициента усиления среды, определяющего выходную мощность лазера. С целью повышения эффективности использования активной среды, повышения ее активного модового объема, еще в 1969 году возникла идея использовать в качестве активного элемента газовых лазеров конические трубки [1, 2]. Жизнеспособность идеи, подкрепленная расчетами усиления [3], была подтверждена экспериментально [4].

В основу проведенных расчетов «геометрической» части коэффициента усиления k была положена формула

$$k = \frac{1}{S} \int_V k_0 \cdot f_s dV,$$

где k_0 – ненасыщенный коэффициент усиления среды на оси трубки, f_s – функция распределения усиления по сечению столба, S – площадь его поперечного сечения.

Предполагалось, что функция f_s подобна распределению концентрации возбужденных атомов в разряде [5, 6]. Такая запись предполагает независимость величин k_0 , f_s и S от продольной координаты столба z . В случае разряда в конической трубке, это предположение является как минимум сомнительным, поскольку с изменением радиуса разрядного канала изменяются площадь S и такие важные характеристики ПС, определяющие инверсию населенностей, как электронная концентрация и температура.

Ранее [7], изучалась реакция параметров положительного столба на резкое (скачкообразное) изменение радиуса разрядной трубки. Однако сведения о работах, посвященных исследованию этого вопроса для трубок с «плавно меняющимся» радиусом разрядного канала, особенно в ГРЛ, в литературе практически отсутствуют. Настоящая работа посвящена рассмотрению этого

вопроса.

Рассмотрим ПС разряда постоянного тока длиной l в моноатомном газе. Давление напуска газа p не превышает 10 мм рт. ст., разрядный ток I лежит в интервале 10 – 100 мА. Радиус разрядного канала R является гладкой функцией координаты z ($0 \leq z \leq l$):

$$|dR/dz| \ll 1.$$

Ось z направлена вдоль оси разрядной трубки:

$$R = R(z) = R_0 f_R(z),$$

где R_0 – значение радиуса канала R в точке $z = 0$; $f_R(z = 0) = 1$;

$$1 \text{ мм} \leq R_0 \leq 5 \text{ мм}.$$

Считаем, что при таких разрядных условиях рассматриваемый положительный столб представляет собой трехкомпонентную плазму, состоящую из нейтральных атомов одного сорта, однозарядных положительных ионов и электронов. Концентрации этих частиц обозначим соответственно как n_a , n_i , n_e , а их массы – m_a , m_i , m_e ; при этом $m_a = m_i$.

Считаем, что длина свободного пробега ионов λ_i много меньше радиуса трубки: $\lambda_i \ll R$. Поэтому рассмотрение процессов в разряде можно вести в рамках диффузионной теории ПС Шоттки.

Предполагаем, что в данных разрядных условиях плазма столба квазинейтральна, т. е. $n_e \approx n_i = n$, и слабо ионизована:

$$v_{ee}, v_{ei}, v_{ii} \ll v_{ea}, v_{ia},$$

т. е. частоты столкновений заряженных частиц друг с другом v_{ee}, v_{ei}, v_{ii} много меньше частот электрон-атомных (v_{ea}) и ион-атомных (v_{ia}) столкновений.

При таком предположении маловероятны такие объемные процессы, как ступенчатая ионизация, объемная рекомбинация и прилипание электронов.

Далее, считаем распределения электронов, ионов и нейтральных атомов по энергиям максвелловским, с температурами $T_a \equiv T_e, T_i, T_a$, соответственно. При этом принимается, что

температуры частиц соотносятся как $T_e \gg T_i \approx T_a$;

температура электронов однородна по сечению столба, но является функцией координаты z : $T_e = \text{const}(r, \theta)$, $T_e = T_e(z)$;

температура ионов распределена одно-

родно как по сечению столба, так и по продольной координате: $T_i = \text{const}(r, \theta, z)$.

Распределения давления газа в столбе, равного давлению напуска p , температуры газа, а следовательно, и концентрации нейтральных частиц $n_a = p/kT_a$, также будем считать однородными как по сечению столба, так и по его длине: $T_a, n_a = \text{const}(r, \theta, z)$.

Концентрации заряженных частиц азимутально однородны, но являются функциями радиальной и продольной координат:

$$n_e = \text{const}(\theta), n_e = n_e(r, z),$$

$$n_i = \text{const}(\theta), n_i = n_i(r, z).$$

Электрическое поле \mathbf{E} также азимутально однородно и является функцией радиальной и продольной координат:

$$\mathbf{E} = \text{const}(\theta), \mathbf{E} = \mathbf{E}(r, z).$$

Считаем, что основным механизмом «рождения» заряженных частиц является прямая ионизация электронным ударом из основного состояния атомов. Частота ионизации $\nu_i = n_a \langle \sigma_{0i} v_e \rangle$, где $\langle \sigma_{0i} v_e \rangle$ – произведение $\sigma_{0i} v_e$, усредненное по функции распределения электронов $f_e(v_e)$; σ_{0i} – сечение данного ионизационного процесса; v_e – скорость электрона.

Считаем, что основным механизмом «гибели» заряженных частиц является их диффузионный уход на стенки разрядной трубки.

Плотность тока $\mathbf{j} = \mathbf{j}(r, z)$ равна разности плотностей потоков ионов $\Gamma_i = n_i \mathbf{u}_i$ и электронов $\Gamma_e = n_e \mathbf{u}_e$:

$$\mathbf{j} = e(\Gamma_i - \Gamma_e) = e(n_i \mathbf{u}_i - n_e \mathbf{u}_e) = en(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_e). \quad (1)$$

Величина разрядного тока I определяется z -ой компонентой плотности тока \mathbf{j}_z , связанной с дрейфом заряженных частиц в поле \mathbf{E}_z (продольный градиент потенциала в столбе), зависящим от продольной координаты:

$$\mathbf{E}_z(z) = \mathbf{E}_{0z} f_{E_z}(z),$$

где $\mathbf{E}_{0z} = \mathbf{E}_z(z=0)$; $f_{E_z}(z=0) = 1$.

Считаем, что вся энергия поступает в ПС от электронов, ускоренных в этом электрическом поле \mathbf{E}_z .

Ставится следующая задача:

получить относительно простые выражения, связывающие внешние, легко контролируемые параметры столба – разрядный ток I , радиус разрядного канала $R(z)$ и давление напуска газа p – с его основными «внутренними» характеристиками – концентрацией

заряженных частиц $n_e(z)$, электронной температурой $T_e(z)$ и напряженностью «продольного» электрического поля $\mathbf{E}_z(z)$.

Для решения задачи, следуя методам, развитым в работах [7, 8, 12], используем следующие уравнения.

Уравнения движения заряженных частиц, которые с учетом условия

$$v_{ee}, v_{ei}, v_{ii} \ll v_{ea}, v_{ia}$$

и пренебрежения термосилой имеют вид

$$-e\mathbf{E} - \frac{\nabla(n_e k T_e)}{n_e} - \mu_{ea} v_{ea} \mathbf{u}_e = 0$$

для электронов;

$$e\mathbf{E} - \frac{\nabla(n_i k T_i)}{n_i} - \mu_{ia} v_{ia} \mathbf{u}_i = 0$$

для ионов.

Здесь μ_{ea}, μ_{ia} – приведенные массы электронов и ионов, соответственно.

Уравнения баланса заряженных частиц:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla(n_e \mathbf{u}_e) = \frac{\delta n_e}{\delta t}$$

для электронов;

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla(n_i \mathbf{u}_i) = \frac{\delta n_i}{\delta t}$$

для ионов.

Уравнение баланса энергии электронов:

$$IE_z = P_v + P_w,$$

где IE_z – мощность, затрачиваемая продольным электрическим полем на нагрев электронов и поддержание всего энергетического баланса в столбе; P_v – мощность, теряемая электронами в упругих столкновениях с атомами (нагрев газа); P_w – мощность, уносимая ионами на стенку.

Мощность, теряемая электронами в неупругих столкновениях с атомами, в уравнении баланса не учитывается.

Рассмотрим подробнее эти уравнения.

Для разряда постоянного тока, с учетом сделанных предположений о квазинейтральности плазмы и независимости температуры ионов от координат, выражения для направленных скоростей электронов и ионов запишутся следующим образом:

$$\mathbf{u}_e = -b_e \mathbf{E} - D_e \left(\frac{\nabla n}{n} + \frac{\nabla T_e}{T_e} \right); \quad (2)$$

$$\mathbf{u}_i = +b_i \mathbf{E} - D_i \frac{\nabla n}{n}. \quad (3)$$

Здесь $b_e = e/\mu_{ea} v_{ea}$, $b_i = e/\mu_{ia} v_{ia}$ – коэффициенты подвижности электронов и ионов; $D_e = kT_e/\mu_{ea} v_{ea} = b_e kT_e/e$, $D_i = kT_i/\mu_{ia} v_{ia} = b_i kT_i/i$ – коэффициенты диффузии электронов и ионов соответственно; v_{ea} – частота упругих электрон-атомных столкновений, равная

$$v_{ea} = n_a \langle \sigma_{ea} v_e \rangle,$$

где $\langle \sigma_{ea} v_e \rangle$ – произведение $\sigma_{ea} v_e$, усредненное по функции распределения электронов $f_e(v_e)$; σ_{ea} – сечение упругих электрон-атомных столкновений, v_e – скорость электронов.

В общем случае, выражение $\langle \sigma_{ea} v_e \rangle$ также является функцией продольной координаты z , поскольку $T_e = T_e(z)$. Мы же будем считать, что

$$\langle \sigma_{ea} v_e \rangle = \text{const}(z),$$

что в первом приближении верно, во всяком случае, для разряда в гелии, поскольку в диапазоне изменения энергии электронов, характерном для данных разрядных условий, величина

$$\sigma_{ea} v_{ea} \approx \text{const}(T_e). \quad [11]$$

Частота упругих ион-атомных столкновений имеет вид

$$v_{ia} v_{ia} = n_a \langle \sigma_{ia} v_{ia} \rangle,$$

где величину $\langle \sigma_{ia} v_{ia} \rangle$ в случае слабоионизованной плазмы можно представить как

$$\langle \sigma_{ia} v_{ia} \rangle \approx \sigma_{ia} \langle v_{T_a} \rangle = \sigma_{ia} \sqrt{3 \frac{kT_a}{m_a}} = \text{const}(z).$$

Тогда плотность тока в плазме ПС запишется как

$$\mathbf{j} = en \left[b_i \mathbf{E} - D_i \frac{\nabla n}{n} + b_e \mathbf{E} + D_e \left(\frac{\nabla n}{n} + \frac{\nabla kT_e}{kT_e} \right) \right]. \quad (4)$$

Отсюда получаем выражение для электрического поля \mathbf{E} :

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{j}}{en(b_i + b_e)} - \left(\frac{D_e - D_i}{b_i + b_e} \cdot \frac{\nabla n}{n} + \frac{D_e}{b_i + b_e} \cdot \frac{\nabla kT_e}{kT_e} \right) = \mathbf{E}_{con} + \mathbf{E}_{sc}.$$

Иными словами, электрическое поле \mathbf{E}

в плазме столба определяется двумя слагаемыми. Первое из них – это электрическое поле «проводимости» \mathbf{E}_{con} , т. е. «внешнее» поле, обуславливающее протекание тока \mathbf{j} в среде, проводимость которой σ :

$$\mathbf{E}_{con} = \frac{\mathbf{j}}{en(b_i + b_e)} = \frac{\mathbf{j}}{\sigma}.$$

Второе слагаемое – поле «объемного заряда» \mathbf{E}_{sc} :

$$\mathbf{E}_{sc} = - \left(\frac{D_e - D_i}{b_i + b_e} \cdot \frac{\nabla n}{n} + \frac{D_e}{b_i + b_e} \cdot \frac{\nabla kT_e}{kT_e} \right) = (\mathbf{E}_{scv_n} + \mathbf{E}_{scv_{T_e}}),$$

где

$$\mathbf{E}_{scv_n} = - \frac{D_e - D_i}{b_i + b_e} \cdot \frac{\nabla n}{n},$$

$$\mathbf{E}_{scv_{T_e}} = - \frac{D_e}{b_i + b_e} \cdot \frac{\nabla kT_e}{kT_e}.$$

Тогда выражение для плотности тока можно записать как

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= en \left[(b_i + b_e) (\mathbf{E}_{con} + \mathbf{E}_{sc}) + (D_e - D_i) \frac{\nabla n_e}{n_e} + D_e \frac{\nabla kT_e}{kT_e} \right] \Rightarrow \\ \Rightarrow \mathbf{j} &= en(b_i + b_e) \left[\mathbf{E}_{con} - \frac{D_e - D_i}{b_i + b_e} \cdot \frac{\nabla n}{n} - \frac{D_e}{(b_i + b_e)} \frac{\nabla kT_e}{kT_e} \right] + \\ &+ en \left[(D_e - D_i) \frac{\nabla n_e}{n_e} + D_e \frac{\nabla kT_e}{kT_e} \right] \Rightarrow \\ \Rightarrow \mathbf{j} &= \mathbf{j}_{con} + \mathbf{j}_{v_n} + \mathbf{j}_{v_{T_e}}, \end{aligned}$$

где

$$\mathbf{j}_{con} = en(b_i + b_e) \mathbf{E}_{con} = \sigma \mathbf{E}_{con};$$

$$\mathbf{j}_{v_n} = en \left[(D_e - D_i) - (b_i + b_e) \frac{D_e - D_i}{b_i + b_e} \right] \frac{\nabla n}{n};$$

$$\mathbf{j}_{v_{T_e}} = en \left[D_e - (b_i + b_e) \frac{D_e}{(b_i + b_e)} \right] \frac{\nabla kT_e}{kT_e}.$$

Нетрудно видеть, что плотности тока \mathbf{j}_{v_n} и $\mathbf{j}_{v_{T_e}}$, обусловленные диффузией заряженных частиц под действием градиентов их концентраций и электронной темпе-

ратуры, равны нулю.

Это означает следующее.

Во-первых, в рассматриваемом разряде превалирует режим амбиполярной диффузии. Действительно, используя полученные выражения для диффузионных потоков заряженных частиц, получаем:

$$\mathbf{u}_{e_{sc}} = \mathbf{u}_{i_{sc}} = - \left[\frac{(b_i D_e + b_e D_i)}{b_i + b_e} \right] \frac{\nabla n}{n} - \frac{b_i D_e}{b_i + b_e} \times \frac{\nabla k T_e}{k T_e} = - D_{a_{v_n}} \frac{\nabla n}{n} - D_{a_{v_{T_e}}} \frac{\nabla k T_e}{k T_e},$$

где

$$D_{a_{v_n}} = \frac{(b_i D_e + b_e D_i)}{b_i + b_e}, \quad D_{a_{v_{T_e}}} = \frac{b_i D_e}{b_i + b_e}$$

— соответствующие коэффициенты амбиполярной диффузии.

Учитывая, что $D_e \gg D_i$, $b_e \gg b_i$, $T_e \gg T_i$, получаем:

$$D_{a_{v_n}} \approx D_{a_{v_{T_e}}} = D_a = b_i \frac{k T_e}{e}.$$

Во-вторых, плотность тока в плазме ПС, равная сумме $\mathbf{j} = \mathbf{j}_{con} + \mathbf{j}_{sc}$, в рассматриваемом случае будет определяться только плотностью тока проводимости:

$$\mathbf{j} = en(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_e) = \mathbf{j}_{con} = en(b_i + b_e)\mathbf{E}_{con} \approx \approx enb_e \mathbf{E}_{con} = \sigma_e \mathbf{E}_{con}.$$

Плотность тока \mathbf{j}_{con} можно представить в виде суммы

$$\mathbf{j}_{con} = \mathbf{j}_{con_r} + \mathbf{j}_{con_z}.$$

Поскольку продольная компонента плотности тока проводимости \mathbf{j}_{con_z} есть составляющая плотности тока, связанная с дрейфом электронов вдоль оси столба в продольном электрическом поле $\mathbf{E}_{con_z} = \mathbf{E}_z(z)$, регистрируемый разрядный ток I можно записать как

$$I = \int_0^{2\pi} \int_0^{R_z} \mathbf{j}_{con_z} r dr d\theta = \int_0^{R_z} 2\pi e b_e E_z(z) \int_0^{R_z} n(r, z) r dr = \text{const}(z), \quad (5)$$

где R_z — значение радиуса R в точке с координатой z .

Рассмотрим теперь уравнения баланса заряженных частиц:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = -\nabla(n_e \mathbf{u}_e) + \frac{\delta n_e}{\delta t};$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = -\nabla(n_i \mathbf{u}_e) + \frac{\delta n_i}{\delta t}.$$

В стационарном режиме для сохранения квазинейтральности плазмы должно выполняться условие:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = \frac{\partial n_i}{\partial t}.$$

Генерационные члены $\frac{\delta n_i}{\delta t}$ и $\frac{\delta n_e}{\delta t}$ уравне-

ний в нашем случае (отсутствие объемной рекомбинации и ступенчатой ионизации) определяются только процессом прямой ионизации атома электронным ударом с частотой ионизации ν_i :

$$\nu_i = n_a \langle \sigma_{0_i} v_e \rangle.$$

Поскольку процессы ионизации в объеме и рекомбинации на стенках трубки приводят к одновременному рождению или гибели ион-электронной пары, что выражается как

$$\frac{\delta n_e}{\delta t} = \frac{\delta n_i}{\delta t} = \frac{\delta n}{\delta t} = n \nu_i,$$

получаем следующие равенства: $\nabla n \mathbf{u}_e = \nabla n \mathbf{u}_i = n \nu_i$.

Тогда, с учетом сделанных предположений о квазинейтральности плазмы и независимости подвижностей электронов и ионов, а также температуры ионов от координат, используем выражения (2), (3) для направленных скоростей электронов и ионов, и путем простых преобразований, исключая \mathbf{E} и учитывая, что $\nabla n \mathbf{u}_e = \nabla n \mathbf{u}_i = n \nu_i$, получим следующее уравнение:

$$n \nu_i (b_i + b_e) + (b_i D_e + b_e D_i) \Delta n + \left(b_i D_e \frac{\nabla T_e}{T_e} \right) \nabla n + b_i \left[\nabla D_e \cdot \frac{\nabla T_e}{T_e} + D_e \nabla \left(\frac{\nabla T_e}{T_e} \right) \right] n = 0.$$

А поскольку $n = \text{const}(\theta)$, $n_a = \text{const}(r, \theta, z)$, $T_e = \text{const}(r, \theta)$ и независимость от радиальной координаты концентрации атомов и электронной температуры обуславливает независимость от координаты r коэффициента диффузии электронов и частоты ионизации, это уравнение можно

представить как

$$n v_i + \frac{(b_i D_e + b_e D_i)}{(b_i + b_e)} (\Delta_r n + \Delta_z n) + \left(\frac{b_i D_e}{(b_i + b_e)} \frac{\nabla_z T_e}{T_e} \right) \nabla_z n + \frac{b_i}{(b_i + b_e)} \times \left[\nabla_z D_e \cdot \frac{\nabla_z T_e}{T_e} + D_e \nabla_z \left(\frac{\nabla_z T_e}{T_e} \right) \right] n = 0.$$

Далее, поскольку $b_e \gg b_i, T_e \gg T_i$ и

$$D_a = \frac{b_i D_e + b_e D_i}{b_i + b_e} \approx b_i \frac{D_e}{b_e} = b_i \frac{k T_e}{e},$$

получаем такое уравнение:

$$n v_i + D_a (\Delta_r n + \Delta_z n) + \left(\frac{b_i D_e}{b_e} \frac{\nabla_z T_e}{T_e} \right) \nabla_z n + \frac{b_i}{b_e} \left[\nabla_z \left(D_e \frac{\nabla_z T_e}{T_e} \right) \right] n = 0.$$

После его преобразований имеем:

$$(\Delta_r n + \Delta_z n) + \frac{2}{D_a} (\nabla_z D_a) \nabla_z n + \frac{1}{D_a} [\nabla_z (\nabla_z D_a) + v_i] n = 0.$$

Расписываем это уравнение, и оно приобретает такой вид:

$$\frac{\partial^2 n}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial n}{\partial r} + \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} + \frac{2}{D_a} \frac{d D_a}{dz} \frac{dn}{dz} + \frac{1}{D_a} \left(\frac{d^2 D_a}{dz^2} + v_i \right) n = 0. \quad (6)$$

Теперь введем безразмерную концентрацию

$$N(r, z) = \frac{n(r, z)}{n_0} = f_{n_r}(r) \cdot f_{n_z}(z),$$

где $n_0 = n(0, 0)$ – значение концентрации заряженных частиц на оси разряда ($r = 0$) в точке $z = 0$; $f_{n_r}(r) = \text{const}(z)$ – функция только радиуса, $f_{n_z}(z) = \text{const}(r)$ – функция только продольной координаты с граничными условиями:

$$f_{n_r}(r = 0) = f_{n_z}(z = 0) = f_{R_z}(z = 0) = 1;$$

$$f_{n_r}(R_z) = 0; f_{n_z}(l) = \frac{n(0, l)}{n_0};$$

$$f_{R_z} = \frac{R_z}{R_0};$$

$$0 \leq r \leq R_z; 0 \leq z \leq l.$$

Значение концентрации $n(0, z)$ на оси ($r = 0$) в точке z будет равно:

$$n(0, z) = n_{0z}(z) = n_0 f_{n_z}(z) = \text{const}(r),$$

и выражение для $n(r, z)$ запишется как

$$n(r, z) = n_{0z}(z) \cdot f_{n_r}(r) = n_0 f_{n_r}(r) f_{n_z}(z).$$

Тогда уравнение (6) преобразуется к следующему виду:

$$f_{n_z}(z) \frac{d^2 f_{n_r}(r)}{dr^2} + f_{n_z}(z) \frac{1}{r} \frac{df_{n_r}(r)}{dr} + f_{n_r}(r) \frac{d^2 f_{n_z}(z)}{dz^2} + 2 \frac{f_{n_r}(r)}{D_a} \frac{d D_a}{dz} \frac{df_{n_z}(z)}{dz} + \frac{1}{D_a} \left\{ \left[\frac{d^2 D_a}{dz^2} \right] + v_i \right\} f_{n_z}(z) f_{n_r}(r) = 0,$$

откуда

$$\frac{1}{f_{n_r}(r)} \frac{d^2 f_{n_r}(r)}{dr^2} + \frac{1}{f_{n_r}(r)} \cdot \frac{1}{r} \frac{df_{n_r}(r)}{dr} = - \frac{1}{f_{n_z}(z)} \cdot \frac{d^2 f_{n_z}(z)}{dz^2} - \frac{2}{f_{n_z}(z)} \times \frac{1}{D_a} \frac{d D_a}{dz} \cdot \frac{df_{n_z}(z)}{dz} - \frac{1}{D_a} \left[\frac{d^2 D_a}{dz^2} + v_i \right] = -\lambda,$$

или в другой записи получаем систему уравнений вида

$$\begin{cases} \frac{d^2 f_{n_r}(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{df_{n_r}(r)}{dr} + \lambda f_{n_r}(r) = 0, \\ \frac{d^2 f_{n_z}(z)}{dz^2} + \frac{2}{D_a} \frac{d D_a}{dz} \cdot \frac{df_{n_z}(z)}{dz} + \frac{1}{D_a} \left[\frac{d^2 D_a}{dz^2} + v_i \right] f_{n_z}(z) - \\ - f_{n_z}(z) \lambda = 0; \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{cases} r^2 \frac{d^2 f_{n_r}(r)}{dr^2} + r \frac{df_{n_r}(r)}{dr} + \\ + (r\sqrt{\lambda})^2 f_{n_r}(r) = 0, \\ \frac{d^2 f_{n_z}(z)}{dz^2} + \frac{2}{D_a} \frac{dD_a}{dz} \cdot \frac{df_{n_z}(z)}{dz} + \\ + \frac{1}{D_a} \left[\frac{d^2 D_a}{dz^2} + v_i - D_a \lambda \right] f_{n_z}(z) = 0. \end{cases}$$

Первое уравнение, в случае, если $\lambda = \text{const}(r)$ – это уравнение Бесселя нулевого порядка. Решение его известно:

$$f_{n_r}(r) = J_0(r\sqrt{\lambda}).$$

Тогда, в силу граничного условия $f_{n_r}(R_z) = 0$, получаем $J_0(R_z\sqrt{\lambda}) = 0$, если

$$\lambda = \left(\frac{2,405}{R_z} \right)^2.$$

Второе уравнение, с учетом полученного выражения для λ , после преобразований принимает вид

$$\frac{d}{dz} \left(D_a \frac{df_{n_z}(z)}{dz} \right) + \frac{d}{dz} \left(f_{n_z}(z) \frac{dD_a}{dz} \right) + \left[v_i - D_a \left(\frac{2,405}{R_z} \right)^2 \right] f_{n_z}(z) = 0. \quad (7)$$

Поскольку основным механизмом гибели заряженных частиц в разряде является их диффузионный уход на стенку трубки, естественно предположить, что устойчивость разряда будет иметь место лишь при определенном соотношении частоты ионизации v_i , определяющей время рождения τ_i заряженных частиц на единице длины разряда – $\tau_i = 1/v_i$, и коэффициента амбиполярной диффузии D_a , определяющего время диффузионного ухода частиц из разряда на стенку трубки радиуса R_z :

$$\tau_{D_a} = R_z^2 / D_a.$$

Концентрацию частиц на стенке мы полагаем равной нулю, и поскольку распределение концентрации электронов по радиусу является функцией Бесселя нулевого порядка, первый корень которого достигается при значении аргумента 2,405, то можно

положить

$$R_z \sqrt{\frac{v_i}{D_a}} = 2,405 \quad \text{или} \quad \left(\frac{2,405}{R_z} \right)^2 - \frac{v_i}{D_a} = 0. \quad (8)$$

Иными словами, мы получили «классическую» взаимосвязь между частотой ионизации и коэффициентом амбиполярной диффузии для «шоттковского» положительного столба разряда постоянного тока в цилиндрическом разрядном канале [7, 10] с заменой радиуса R_0 на $R_z = R_0 f_R(z)$.

Тогда уравнение (7) запишется как

$$\frac{d}{dz} \left(D_a \frac{df_{n_z}(z)}{dz} \right) + \frac{d}{dz} \left(f_{n_z}(z) \frac{dD_a}{dz} \right) = 0.$$

Его можно привести к виду:

$$\frac{d}{dz} [D_a f_{n_z}(z)] = C \Rightarrow D_a(z) f_{n_z}(z) = Cz + G$$

Учитывая, что $f_{n_z}(z=0) = 1$, получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned} D_a(z) f_{n_z} &= Cz + D_a(0) \Rightarrow \\ \Rightarrow f_{n_z}(z) &= \frac{Cz + D_a(0)}{D_a(z)} = \frac{C_1 z + T_e(0)}{T_e(z)}. \end{aligned}$$

Как мы показали выше (см. формулу (5)), регистрируемый разрядный ток I будет определяться только дрейфовыми потоками заряженных частиц во внешнем электрическом поле, т. е. только током проводимости I_d :

$$\begin{aligned} I = I_d &= 2\pi e b_e E_z(z) \int_0^{R_z} n(r, z) r dr = \text{const}(z) \Rightarrow \\ \Rightarrow I &= 2\pi e b_e E_z(z) n_0 f_{n_z}(z) \times \\ &\times \int_0^{R_z} f_{n_r}(r) r dr = \text{const}(z) \end{aligned}$$

Далее, поскольку

$$\begin{aligned} f_{n_r}(r) &= J_0(r\sqrt{\lambda}), \\ \lambda &= \left(\frac{2,405}{R_z} \right)^2 = \left(\frac{2,405}{R_0 f_R(z)} \right)^2, \end{aligned}$$

используя граничные условия для R_z и E_z ,

получаем:

$$\begin{aligned} I &= 1,36R_z^2 e b_e n_0 f_{n_z}(z) E_z(z) \Rightarrow \\ &\Rightarrow n_0 f_{n_z}(z) = \\ &= \frac{0,737I}{R_0^2 f_R^2(z) e b_e E_{0z} f_{E_z}(z)} \Rightarrow \\ &\Rightarrow n_0 = \frac{0,737I}{R_0^2 e b_e E_{0z}} \Rightarrow \\ &\Rightarrow f_{n_z}(z) = \frac{1}{f_R^2(z) f_{E_z}(z)}. \end{aligned}$$

Среднее по сечению разряда значение концентрации электронов выражается как

$$\begin{aligned} \bar{n}_z(z) &= \frac{\int_0^{R(z)} r n_e dr}{\int_0^{R(z)} r dr} = 0,43 n_0 f_{n_z}(z) = \\ &= \frac{0,317I}{e b_e R_0^2 f_R^2(z) E_{0z} f_{E_z}(z)}. \end{aligned}$$

Вернемся к выражению (8). Мы получили, что в случае «диффузионного» разряда в трубке с переменным радиусом частота ионизации атомов $v_i(z)$ записывается следующим образом:

$$v_i = D_a \left(\frac{2,405}{R_z} \right)^2 \Rightarrow v_i = b_i \frac{kT_e}{e} \left(\frac{2,405}{R_z} \right)^2.$$

Поскольку мы предположили с самого начала, что у нас в разряде имеет место только «прямая» ионизация, то частота ионизации v_i атомов (их концентрация обозначена как n_a) электронным ударом из основного состояния записывается как

$$v_i = n_a \langle \sigma_{0i} v_e \rangle,$$

где $\langle \sigma_{0i} v_e \rangle$ – константа скорости реакции ионизации, т. е. произведение $\sigma_{0i} v_e$, усредненное по функции распределения электронов по энергиям.

В случае максвелловского распределения электронов по энергиям, целесообразно аппроксимировать зависимость сечения прямой ионизации $\sigma_{0i}(\epsilon_e)$ от энергии электронов ϵ_e такой прямой:

$$\sigma_{0i} = C_i (\epsilon_e - \epsilon_i),$$

которая при $\epsilon_e \geq \epsilon_i$ характеризуется константой C_i .

При такой аппроксимации получаем следующее выражение для частоты ионизации:

$$\begin{aligned} v_i(z) &= C_i n_a \left[\epsilon_i + 2kT_e(z) \right] \times \\ &\times \sqrt{\frac{8kT_e(z)}{\pi m_e}} \cdot \exp\left(-\frac{\epsilon_i}{kT_e(z)}\right), \end{aligned}$$

откуда

$$\begin{aligned} v_i &= C_i n_a \sqrt{\frac{8kT_e(z)}{\pi m_e}} \cdot (\epsilon_i + 2kT_e(z)) \times \\ &\times \exp\left(-\frac{\epsilon_i}{kT_e(z)}\right) = b_i \frac{kT_e(z)}{e} \left(\frac{2,405}{R_z(z)} \right)^2. \end{aligned}$$

В итоге получаем известную формулу [7, 10], связывающую kT_e в ПС диффузионного цилиндрического разряда с концентрацией ионизируемых атомов и радиусом разрядного канала с заменой R на $R_z(z) = R_0 f_R(z)$:

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{\frac{\epsilon_i}{kT_e(z)}} \cdot \exp\left(\frac{\epsilon_i}{kT_e(z)}\right)}{\left(1 + \frac{\epsilon_i}{2kT_e(z)}\right)} &= \\ &= 0,552 \frac{e}{\sqrt{m_e}} \left(\frac{C_i \sqrt{\epsilon_i}}{b_i n_a} \right) n_a^2 \times \\ &\times \left[R_0 f_R(z) \right]^2(z). \end{aligned}$$

Теперь обратимся к определению поля $E_z(z)$. С этой целью воспользуемся уравнением баланса энергии на единицу длины столба, как это делали известные российские физики в своих классических работах [7, 12]:

$$IE_z = P_v + P_w,$$

где IE_z – мощность, затрачиваемая продольным электрическим полем, создаваемым внешним источником на ускорение («нагрев») электронов в столбе. Как уже отмечалось выше, P_v – мощность, которая связана с энергией, приобретаемой электронами, и тратится ими в упругих столкновениях с атомами (нагрев газа); P_w – мощность, уносимая ионами на стенку.

Выражения для P_v и P_w можно записать в виде [7, 12]:

$$P_v = \frac{3}{2} \pi R^2(z) \cdot \bar{n}(z) \chi_{ea} v_{ea}(z) kT_e(z);$$

$$P_w = 2\pi R(z) j_{iw} \cdot \left(U_i + 1,7 \frac{kT_e(z)}{e} + U_w \right),$$

где χ_{ea} – коэффициент передачи энергии в упругих электрон-атомных столкновениях, $\chi_{ea} = 2m_e/m_a$; j_{iw} – ток ионов на стенку трубки; U_i – потенциал ионизации атома; U_w – пристеночный скачок потенциала.

Тогда мощность, теряемая электронами в упругих столкновениях, выразится как

$$P_v(z) = 4,05 \frac{m_e}{m_a} n_0(z) \cdot kT_e(z) \times \\ \times R^2(z) \cdot v_{ea} = 3 \frac{I_d}{m_a b_e^2 E_z(z)} \cdot kT_e(z).$$

Выражение для величины пристеночного скачка потенциала U_w определим из условия равенства потоков электронов Γ_{eg} и ионов Γ_{ig} на границе плазма – стенка трубки [7, 8].

В предположении, что коэффициент отражения электронов и ионов от стенки трубки пренебрежимо мал и направленная скорость ионов в слое определяется амбиполярным полем, а скорость электронов – их хаотической скоростью, получаем:

$$\Gamma_{eg} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} n_{eg} \sqrt{\frac{kT_e(z)}{m_e}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{eU_w(z)}{kT_e(z)}\right) = \Gamma_{ig} = n_{ig} \sqrt{\frac{kT_e(z)}{m_i}}.$$

Здесь n_{eg} , n_{ig} – концентрации электронов и ионов на границе слоя. Из данного уравнения следует, что

$$U_w(z) = \frac{kT_e(z)}{e} \ln 0,4 \sqrt{\frac{m_i}{m_e}}.$$

Стеночный ток ионов можно записать, в соответствии с выражениями, приведенными в работах [7, 8]:

$$j_{iw}(z) = -en_{(r \approx R_z)} D_a \frac{1}{n_{(r \approx R_z)}} \left(\frac{\partial n}{\partial r} \right)_{(r \approx R_z)} = \\ = -eD_a n_0(z) \left(\frac{\partial}{\partial r} f_{n_{e^+}} \right)_{(r \approx R_z)} =$$

$$= -eD_a n_0(z) \left[\frac{\partial}{\partial r} J_0 \left(\frac{2,405}{R_z} r \right) \right]_{(r \approx R_z)} = \\ = eD_a n_0(z) \frac{2,405}{R(z)} J_1(2,405) \Rightarrow \\ \Rightarrow j_{iw}(z) \approx 3\bar{n}(z) b_i \frac{kT_e(z)}{R_0 f_R(z)}.$$

Тогда мощность, уносимая ионами на стенку, запишется как

$$P_w(z) = 6\pi R_z \bar{n}(z) \frac{kT_e(z)}{R_0 f_R(z)} b_i \times \\ \times \left(U_i + 1,7 \frac{kT_e(z)}{e} + U_w(z) \right),$$

или

$$P_w(z) = \frac{6I}{[R_0 f_R(z)]^2 E_z(z)} \frac{b_i}{b_e} \cdot \frac{kT_e(z)}{e^2} \times \\ \times \left[eU_i + kT_e(z) \left(1,7 + \ln 0,4 \sqrt{\frac{m_a}{m_e}} \right) \right].$$

А весь баланс энергий принимает следующий вид:

$$IE_z(z) = P_v(z) + P_w(z) = \\ = 3 \frac{I}{m_a b_e^2 E_z(z)} \cdot kT_e(z) + \\ + \frac{6I}{[R_0 f_R(z)]^2 E_z(z)} \frac{b_i}{b_e} \cdot \frac{kT_e(z)}{e^2} \times \\ \times \left[eU_i + kT_e(z) \left(1,7 + \ln 0,4 \sqrt{\frac{m_a}{m_e}} \right) \right].$$

Отсюда получаем:

$$(eE_z)^2 = 3kT_e(z) \frac{m_e v_{ea}}{m_a} \times \\ \times \left\{ m_e v_{ea} + \frac{4}{[R_0 f_R(z)]^2 v_{ia}} \times \right. \\ \left. \times \left[eU_i + kT_e(z) \left(1,7 + \ln 0,4 \sqrt{\frac{m_i}{m_e}} \right) \right] \right\}.$$

Подведем основные итоги проведенного исследования.

В результате рассмотрения процессов в

положительном столбе разряда постоянно-го тока при типичных для ГРЛ разрядных условиях в трубках переменного диаметра, нами получены уравнения для концентрации электронов (как функции продольной и поперечной координат), электронной температуры и проекции электрическо-

го поля, связывающие их с зависимостью радиуса разрядного канала от продольной координаты. Полученная система уравнений дает решение поставленной задачи. В работе представлены относительно простые выражения, связывающие внешние, легко контролируемые параметры столба.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Привалов В.Е., Фридрихов С.А. Кольцевой газовый лазер // Успехи физических наук. 1969. Т. 97. № 3. С. 377–402.
2. Привалов В.Е., Фридрихов С.А. He-Ne лазер с разрядной трубкой конусообразного сечения // Журнал прикладной спектроскопии. 1970. Т. 12. № 5. С. 937–939.
3. Привалов В.Е., Фридрихов С.А. Зависимость мощности излучения He-Ne лазера от геометрии сечения разрядного промежутка // Журнал технической физики. 1968. Т. 37. № 12. С. 2080–2084.
4. Федотов А.А. Автореферат кандидатской диссертации. Л.: ЛЭТИ, 1974.
5. Троицкий Ю.В., Чеботаев В.П. Радиальное распределение усиления в He-Ne смеси // Оптика и спектроскопия. 1966. Т. 20. № 2. С. 362–365.
6. Молчанов М.И., Савушкин А.Ф. Измерение коэффициента усиления в смеси He-Ne // Радиотехника и электроника. 1970. Т. 15. № 8. С. 1544–1546.
7. Грановский В.Л. Электрический ток в газе. Установившийся ток. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит.-ры, 1971. 545 с.
8. Голант В.Е., Жилинский А.П., Сахаров И.Е. Основы физики плазмы. СПб.: «Лань», 2011. 448 с.
9. Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.: Издательский дом «Интеллект», 2009. 736 с.
10. Cherrington В.Е. Gaseous electronics and gas lasers. Oxford: Pergamon Press, 1979. 266 с.
11. Brawn S.C. Introduction to electrical discharges in gases. New York, USA, John Wiley & Sons, 1966. 320 p.
12. Клярфельд Б.Н. Положительный столб газового разряда и его использование для получения света // Труды Всесоюзного электротехнического института. Электронные и ионные приборы. Вып. 41. Под ред. П.В. Тимофеева. М.: Госэнергоиздат, 1940. С. 165–235.

Статья поступила в редакцию 16.10.2019, принята к публикации 31.10.2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КОЖЕВНИКОВ Вадим Андреевич – старший преподаватель Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vadim.kozhevnikov@gmail.com

ПРИВАЛОВ Вадим Евгеньевич – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vaepriv@yandex.ru

ФОТИАДИ Александр Эпаминондович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
fotiadi@rphf.spbstu.ru



REFERENCES

1. **Privalov V.E., Fridrikhov S.A.**, The ring gas laser, *Sov. Phys, Usp.* 12 (3) (1969) 153–167.
2. **Privalov V.E., Fridrikhov S.A.**, He-Ne laser with a conical discharge tube, *Journal of Applied Spectroscopy.* 12 (5) (1970) 700–702.
3. **Privalov V.E., Fridrikhov S.A.**, Zavisimost moshchnosti izlucheniya He-Ne lazera ot geometrii secheniya razryadnogo promezhnutka [The radiation power of He-Ne laser as a function of a cross-section geometry of a discharge gap], *Technical Physics.* 37(12) (1968) 2080–2084 (in Russian).
4. **Fedotov A.A.**, Abstract of Ph.D. thesis, Leningrad, LETI, 1974.
5. **Troitskiy Yu.V., Chebotayev V.P.**, Radialnoye raspredeleniye usileniya v He-Ne smesi [Radial distribution of amplification in the He-Ne mixture], *Optics and Spectroscopy.* 20 (2) (1966) 362–365 (in Russian).
6. **Molchanov M.I., Savushkin A.F.**, Izmereniye koeffitsiyenta usileniya v smesi He-Ne [Measurement of amplification factor in the He-Ne mixture], *Journal of Communications, Technology and Electronics.* 15 (8) (1970) 1544–1546.
7. **Granovskiy V.L.**, Elektricheskiy tok v gaze. Ustanovivshiysya tok [Electric current in the gas. Steady current], Nauka, Moscow, 1971.
8. **Golant V.E., Zhilinskiy A.P., Sakharov I.E.** Osnovy fiziki plazmy [Fundamentals of plasma physics], “Lan” Publishing, St. Petersburg, 2011.
9. **Rayzer Yu.P.**, Fizika gazovogo razryada [Gas discharge physics], “Intellekt” Publishing House, Moscow, 2009.
10. **Cherrington B.E.**, Gaseous electronics and gas lasers, Pergamon press, Oxford, 1979.
11. **Brawn S.C.**, Introduction to electrical discharges in gases, John Wilay & Sons, New York, 1966.
12. **Klyarfeld B.N.**, Polozhitelnyy stolb gazovogo razryada i yego ispolzovaniye dlya polucheniya sveta [Positive gas discharge column and its use to get light], *Proceedings of the All-Soviet-Union Electrotechnical Institute, Electronic and Ionic devices*, Edited by P.V. Timofeyev, Gosenergoizdat, Moscow, (41) (1940) 165–235.

Received 16.10.2019, accepted 31.10.2019.

THE AUTHORS

KOZHEVNIKOV Vadim A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
vadim.kozhevnikov@gmail.com

PRIVALOV Vadim E.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
vaepriv@yandex.ru

FOTIADI Alexander E.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
fotiadi@rphf.spbstu.ru

DOI: 10.18721/JPM.12411
УДК 538.911

**ИЗЛУЧЕНИЕ ПОЗИТРОНОВ И ЭЛЕКТРОНОВ
С ЭНЕРГИЕЙ 375 МэВ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ В ПРЯМЫХ
И ПЕРИОДИЧЕСКИ ИЗОГНУТЫХ КРИСТАЛЛАХ АЛМАЗА**

А.В. Павлов¹, В.К. Иванов¹, А.В. Король², А.В. Соловьев²

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

²Научно-исследовательский центр мезобионаносистем (MBN),
г. Франкфурт-на-Майне, Германия

В работе представлены результаты расчета и анализа траекторий и спектров излучения ультрарелятивистских электронов и позитронов с энергией 375 МэВ, каналирующих в прямых и периодически изогнутых кристаллах алмаза длиной 20 и 40 мкм. Численное моделирование процессов планарного каналирования частиц вдоль кристаллографической плоскости (110) проводилось с помощью пакета MBN Explorer. Параметры пучков частиц и ориентация кристаллов были выбраны близкими к экспериментальным условиям на ускорителе MAMI (г. Майнц, Германия). Проведено сравнение полученных результатов для электронов и позитронов.

Ключевые слова: ультрарелятивистские электроны и позитроны, периодически изогнутый кристалл алмаза, излучение при каналировании

Ссылка при цитировании: Павлов А.В., Иванов В.К., Король А.В., Соловьев А.В. Излучение позитронов и электронов с энергией 375 МэВ при каналировании в прямых и периодически изогнутых кристаллах алмаза // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 108–118. DOI: 10.18721/JPM.12411

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

**RADIATION OF 375 MeV ELECTRONS AND POSITRONS
DURING CHANNELING IN STRAIGHT AND
PERIODICALLY BENT DIAMOND CRYSTALS**

A.V. Pavlov¹, V.K. Ivanov¹, A.V. Korol², A.V. Solov'yov²

¹Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

²MBN Research Center UG, Frankfurt am Main, Germany

The paper presents the results of calculation and analysis of the trajectories and emission spectra of ultrarelativistic electrons and positrons with an energy of 375 MeV channeling in straight and periodically bent diamond crystals with a length of 20 and 40 μm . The numerical simulation of planar channeling of particles along the crystallographic plane (110) is carried out using the MBN Explorer package. The parameters of the particle beams and the orientation of the crystals are chosen close to the experimental conditions at the MAMI accelerator (Mainz, Germany). The comparison between the results obtained for electrons and positrons is performed.

Keywords: ultrarelativistic electrons and positrons, periodically bent diamond crystal, channeling radiation

Citation: Pavlov A.V., Ivanov V.K., Korol A.V., Solov'yov A.V., Radiation of 375 MeV electrons and positrons during channeling in straight and periodically bent diamond crystals,



Введение

В середине 60-х годов прошлого столетия Дж. Линдхард [1] предсказал, что заряженные ультрарелятивистские частицы могут проходить аномально большие расстояния в ориентированных кристаллах, двигаясь внутри потенциального канала, созданного электростатическим полем атомных плоскостей или осей. Данное явление носит название каналирования. Стабильность процесса каналирования определяется малым значением энергии поперечного движения, по сравнению с величиной электростатического барьера. С момента открытия процесс каналирования является объектом большого количества теоретических и экспериментальных исследований. Их результаты имеют как прикладное значение (создание новых источников излучения), так и фундаментальное (определение свойств распространения и излучения частиц), см. работу [2] и ссылки в ней.

При планарном каналировании частица осциллирует в канале, расположенном параллельно какому-либо семейству плоскостей. Это приводит к появлению дополнительного электромагнитного излучения – излучения при каналировании (Channeling Radiation (ChR)), интенсивность которого на порядки превосходит интенсивность тормозного излучения в соответствующей аморфной среде. Спектр излучения при каналировании ультрарелятивистских электронов лежит в области от сотен кэВ до единиц МэВ.

Каналирование возможно и в равномерно изогнутом кристалле. В таком случае движение частицы складывается из двух компонент: осцилляции при движении в канале и распространение частицы вдоль средней линии изогнутого кристалла. Последнее приводит к появлению дополнительного излучения – синхротронного.

Современные технологии выращивания кристаллов позволяют создавать кристаллы, где профиль изгиба носит квазипериодический характер. Системы, в которых периодически изогнутой кристалл скombинирован с пучком ультрарелятивистских частиц, часто называют кристаллическими ондуляторами (Crystalline Undulator (CU))

[2 – 8]. Возможность практической реализации CU была показана относительно недавно. Движение заряженных частиц в CU приводит к появлению нового типа спонтанного ондуляторного излучения – излучения кристаллического ондулятора (CUR) [2, 5 – 8]. С применением современных ускорителей заряженных частиц и совершенных кристаллов, становится возможным получить пиковую светимость CUR на уровне 10^{25} фотон/с·мрад²·мм²·0,1% BW для фотонов с энергией $10^{-2} - 10^1$ МэВ [2]. Следует отметить, что такую светимость невозможно получить, если использовать классические ондуляторы на магнитах [9].

За последнее время проведено большое количество как теоретических [2, 10 – 18], так и экспериментальных [5, 8, 19 – 27] работ, направленных на изучение механизмов каналирования и получение спектров излучения электронов и позитронов в прямых и изогнутых кристаллах кремния и алмаза. Последние измерения включают в себя эксперименты на микротроне Mainzer Microtron (MAMI, [20, 21]), CERN [28], SLAC [29].

Целью данной работы является теоретическое описание процессов каналирования электронов и позитронов с энергией 375 МэВ в прямых и периодически изогнутых кристаллах алмаза. Определение параметров этих процессов, таких как характерная длина, спектр излучения и другие, представляет значительный интерес не только в связи с возможностью создания нового источника когерентного излучения, но и с проведением в настоящее время экспериментальных исследований процесса каналирования электронов с ультрарелятивистскими энергиями в подобных кристаллах [20, 21]. Моделирование процесса каналирования электронов и позитронов выполнялось с помощью универсального пакета вычислительных программ MBN Explorer [30, 31].

Моделирование процесса каналирования

Моделирование процесса каналирования проводилось в два этапа: на первом вычислялись трехмерные траектории движения частиц в кристалле и определялись пара-

метры каналирования, на втором вычислялись спектры излучения частиц на основе траекторий движения.

Для получения трехмерных траекторий движения ультрарелятивистских частиц в кристаллической среде используется релятивистская молекулярная динамика, реализованная в MBN Explorer [31]. При этом стандартный молекулярно-динамический алгоритм претерпел следующие изменения [2]. Во-первых, для описания движения частиц используются релятивистские уравнения движения. Во-вторых, учитывается взаимодействие ультрарелятивистской частицы с отдельными атомами, при этом кристаллическое окружение генерируется динамически по ходу движения частиц. Движение ультрарелятивистских частиц описывается в рамках квазиклассического приближения, поскольку при таких энергиях квантовые поправки малы. Детальное описание алгоритма решения этих уравнений представлено в работах [2, 10, 11, 14, 31, 32]. Данный подход к вычислениям показал свою состоятельность, поэтому результаты расчета сравнивались с экспериментальными данными предыдущих работ [2, 10 – 12, 14, 15]. Алгоритмы расчета, использованные в пакете MBN Explorer, при их применении на современных суперкомпьютерах позволяют получить предсказательную силу, сравнимую с экспериментальными измерениями.

В качестве объекта исследования был выбран кристалл алмаза, ориентированный вдоль кристаллографических плоскостей (110). Чтобы избежать аксиального каналирования [33], направление распространения z было выбрано вдоль оси $\langle 10, -10, 0 \rangle$. В расчетах предполагалось, что пучок частиц имеет нулевую расходимость; иными словами, поперечные компоненты скорости равны нулю.

Взаимодействие между ультрарелятивистскими частицами и атомами решетки моделировалось с помощью межатомного потенциала Мольера [34]. В расчете учитывались тепловые колебания атомов решетки при температуре 300 К. Параметры кристалла и пучка налетающих частиц были выбраны в соответствии с условиями экспериментов, проводимых с электронами на ускорителе MAMI [20, 21]. Для периодически изогнутых кристаллов профиль изгиба $S(z)$ имел гармоническую форму:

$$S(z) = a \cos(2\pi z/\lambda_u),$$

где координата z определяет направление распространения частиц; a – амплитуда изгиба кристалла ($a = 0 \text{ \AA}$ для прямого кристалла, $a = 2,5$ и $4,0 \text{ \AA}$ для периодически изогнутого); λ_u – период изгиба, был фиксирован на значении 5 мкм.

Примеры систем с такой геометрией можно найти в работе [15]. В настоящих вычислениях распространение частиц было проанализировано в кристаллах длиной $L_{cr} = 20$ и 40 мкм (4 и 8 периодов ондулятора соответственно).

Для каждого набора параметров было проанализировано 6000 траекторий. Ввиду случайности в выборе положения частицы на входе в кристалл и случайного расположения атомов вокруг нее из-за термических флуктуаций, каждая траектория соответствует распространению в уникальном кристаллическом окружении.

Траектории статистически независимы и могут быть использованы для определения параметров каналирования и расчета спектров электромагнитного излучения. Для каждой траектории спектральное распределение электромагнитного излучения интегрировалось по углу $\theta_0 = 0,24$ мрад. Данное значение значительно меньше естественного угла эмиссии $\gamma^{-1} = 1,36$ мрад, соответственно собиралось только «излучение вперед».

Спектр для конкретного набора параметров был получен путем усреднения спектра по всем траекториям, таким образом учитывался вклад как от участков, где частица находилась в режиме каналирования, так и участков свободного движения над барьером.

Результаты расчетов и их обсуждение

Важным наблюдаемым результатом каналирования релятивистских частиц в кристаллах являются спектры электромагнитного излучения (см., например, работу [21]). Частица, каналирующая в периодически изогнутом кристалле, испытывает два типа квазипериодического движения: осцилляции в канале и движение вдоль профиля изгиба канала.

Квазипериодическое движение приводит к электромагнитному излучению, которое в общем случае можно представить в виде набора гармоник. Так, для каждого значения угла эмиссии спектральное распределение состоит из набора узких эквидистантных пиков. В области энергий излучения $\hbar\omega$,

значительно меньших по отношению к первичной энергии частиц, частоту излучения n -ой гармоники ω_n можно найти из соотношения

$$\omega_n = \frac{2\gamma^2\Omega}{1 + \gamma^2\theta^2 + K^2/2} n,$$

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

где Ω – частота соответствующих осцилляций (Ω_{ch} – частота осцилляций при каналировании или $\Omega = 2\pi/\lambda_u$ – частота, соответствующая периоду ондулятора λ_u); θ – угол сбора излучения; K^2 – средний квадрат параметра ондулятора.

В случае, когда движение частиц состоит из двух типов квазипериодического движения, которые не коррелируют по частоте, полное значение K^2 определяется суммой квадратов параметров ондулятора:

$$K^2 = K_u^2 + K_{ch}^2,$$

где $K_u = 2\pi\gamma a/\lambda_u$ – параметр ондулятора периодически изогнутого кристалла; $K_{ch} = 2\gamma^2 \langle v_{\perp}^2 \rangle / c^2$ – параметр ондулятора,

отвечающий за движение в канале ($\langle v_{\perp}^2 \rangle$ – средний квадрат скорости поперечного движения внутри канала, подробнее см. работу [2]).

На рис. 1 и 2 показаны энергетические зависимости спектральной плотности $dE/\hbar d\omega$ для электронов и позитронов, каналирующих в кристаллах длиной 20 и 40 мкм соответственно. В спектрах излучения для прямого кристалла (рис. 1, *a* и 2, *a*) преобладает излучение при каналировании ChR, спектральная плотность которого значительно превышает плотность тормозного излучения в аморфных средах. Из-за сильной ангармоничности осцилляций электронов в канале, спектры излучения последних сильно уширены (рис. 1, *a*), по сравнению с узкой спектральной линией для позитронов (рис. 2, *a*). Максимум ChR на спектре для позитронов расположен около энергии $\hbar\omega \approx 1,1$ МэВ, тогда как для электронов это значение из-за ангармоничности смещается в сторону больших энергий и составляет $\hbar\omega \approx 2$ МэВ.

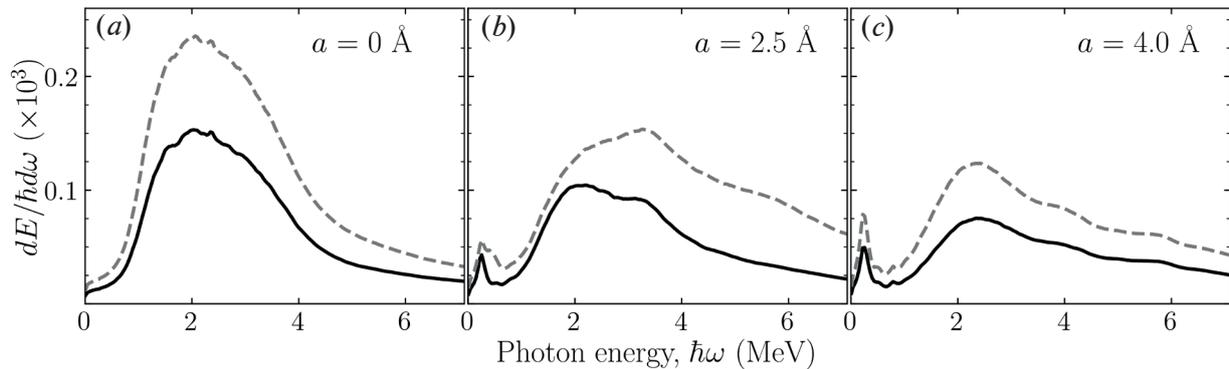


Рис. 1. Спектральная плотность электромагнитного излучения электронов с энергией 375 МэВ, проходящих через прямой кристалл (*a*) и периодически изогнутый кристалл (*b, c*) с амплитудами изгиба $a = 2,5 \text{ \AA}$ (*b*) и $a = 4,0 \text{ \AA}$ (*c*), в зависимости от энергии фотонов.

Сплошная линия показывает зависимости для $L_{cr} = 20$ мкм, пунктирная – для $L_{cr} = 40$ мкм

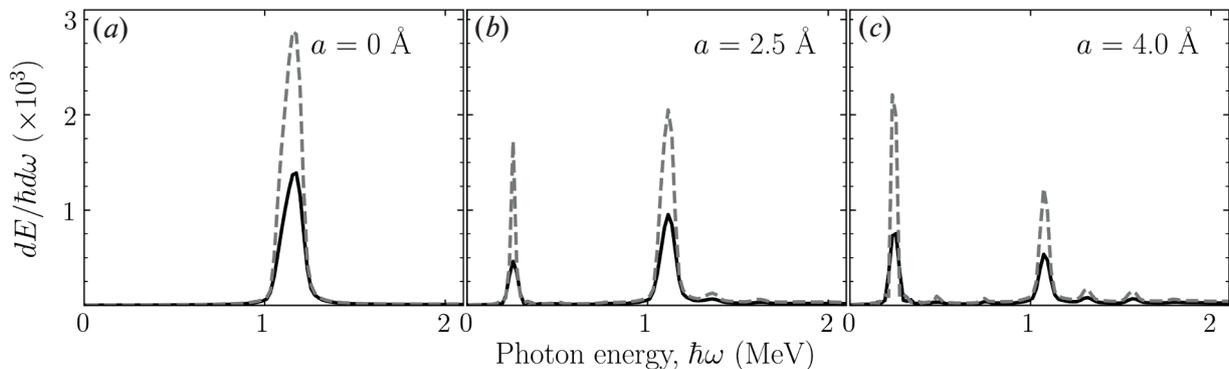


Рис. 2. Зависимости спектральных плотностей электромагнитного излучения от энергии фотонов, аналогичные приведенным на рис. 1, но для позитронов.

Обозначения те же, что на рис. 1

В спектрах излучения частиц, каналирующих в периодически изогнутых кристаллах (рис. 1,*b,c* и 2,*b,c*), появляются дополнительные пики при энергии $\hbar\omega \approx 0,25$ МэВ. Эти пики соответствуют когерентному ондуляторному излучению (CUR). Их возникновение связано с движением частиц в периодически изогнутом кристалле, а частота квантов излучения Ω_u определяется периодом изгиба кристалла и продольной энергией заряженной частицы [2 – 8, 14]. Следует отметить, что плотность излучения позитронов оказывается на порядок выше плотности излучения каналирующих электронов.

Теперь отметим самые заметные особенности, которые проявляются в спектрах излучения и требуют обсуждения.

1. В случае каналирования позитронов в PBC, в спектре излучения появляются дополнительные пики. Дополнительные гармоники более заметны для больших амплитуд изгиба (см. дополнительные пики на рис. 2,*c*).

2. Интенсивности CUR и ChR растут с увеличением толщины кристалла в разной степени для электронов и позитронов.

3. Интенсивность ChR падает с увеличением амплитуды изгиба для обоих сортов частиц.

Первую особенность можно объяснить тем, что в случае позитронов с энергией 375 МэВ, распространяющихся в периодически изогнутых кристаллах алмаза с означенными выше параметрами, параметр ондулятора

$$K \sim K_u = 2\pi\gamma a/\lambda_u \leq 1$$

В таком случае теория ондуляторного излучения предсказывает, что спектр излучения должен состоять из ряда эквидистантных гармоник, интенсивность которых быстро спадает с номером гармоники n .

Для того чтобы проанализировать изменение спектров излучения в зависимости от амплитуды изгиба и толщины кристалла, нужно предварительно рассмотреть свойства каналирования частиц. Поскольку первый результат расчетов – это траектории частиц в кристалле, то появляется возможность прямого исследования данных свойств. В частности, становится возможным определить количество каналирующих частиц на любой глубине кристалла. Подобные данные невозможно получить

экспериментально, однако они могут быть полезны при анализе полученных данных и для хотя бы качественного объяснения зависимостей.

Важной характеристикой процесса каналирования является коэффициент захвата частиц A (acceptance). Последний представляет собой отношение числа частиц N_{acc} , захваченных в канал на входе в кристалл, к числу всех падающих частиц N_0 :

$$A = N_{acc} / N_0.$$

Параметр A имеет наибольшее значение для прямого кристалла и плавно уменьшается с ростом кривизны изогнутого кристалла вследствие увеличения центробежных сил, действующих на частицу [35].

При статистическом анализе процессов каналирования можно ввести величину длины, которая характеризует процесс каналирования.

Введем величину L_p – среднюю глубину проникновения. Она показывает, какое расстояние в среднем проходят частицы, захваченные в режиме каналирования на входе в канал. Число таких частиц обозначим как N_p . Средняя длина каналирования L_{ch} – это длина всех участков каналирования, усредненная по количеству траекторий N .

Число частиц, которые находятся в режиме каналирования на некоторой глубине проникновения в кристалл, обозначим как N_{ch} .

На рис. 3 представлены зависимости N_p/N и N_{ch}/N для электронов (рис. 3,*a,b*) и позитронов (рис. 3,*c,d*) от глубины z проникновения в кристалл.

На приведенных графиках величина коэффициента захвата A соответствует значениям N_p/N и N_{ch}/N в точке $z = 0$. Например, для позитронов в прямом кристалле значение параметра A равно 0,96. Значения L_p и L_{ch} можно найти путем усреднения данных зависимостей по глубине z проникновения в кристалл.

Рассмотрим сначала каналирование позитронов. Позитрон движется в канале между двумя кристаллографическими плоскостями. Столкновения с атомами решетки приводят к росту его энергии поперечного движения, и при достижении некоторого критического значения этой энергии позитрон деканализируется. Имеет место обратный процесс – реканализация – это когда позитрон может захватываться

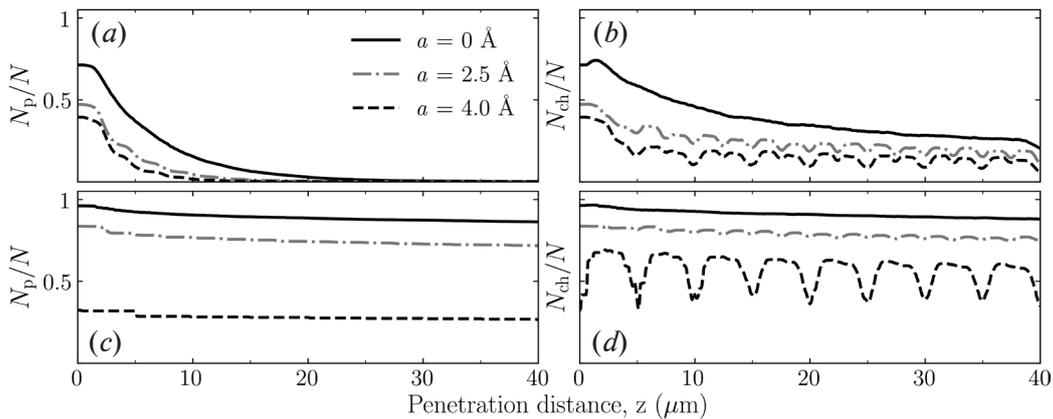


Рис. 3. Зависимости доли каналирующих частиц с энергией 375 МэВ в прямом ($a = 0 \text{ \AA}$) (a, c) и периодически изогнутом кристаллах алмаза (110) (b, d) от глубины проникновения частиц в кристалл. Представлены доли захваченных электронов (a) и позитронов (c) в канал на входе в кристалл, а также доли каналирующих электронов (b) и позитронов (d) с учетом реканалирования

ваться в канал вследствие столкновений с атомами решетки. При больших толщинах кристалла, например $L_{cr} \approx 300 \text{ мкм}$, позитрон может испытывать деканализацию и реканалирование несколько раз при распространении внутри кристалла. Однако при малых значениях толщины кристалла процессы деканализации/реканалирования происходят редко. В периодически изогнутых кристаллах реканалирование позитронов может происходить на участках кристалла с малой кривизной [15] (см. график осцилляции количества частиц на рис. 3, d).

Интенсивность CUR можно оценить как величину, пропорциональную произведению $I \propto A \cdot L_p \cdot a^2$ [16]. Из этого следует, что основной вклад в интенсивность CUR вносят частицы, которые были захвачены на входе в кристалл. Для рассмотренных значений длины кристаллов величина N_p/N практически не зависит от глубины z (см. зависимость $N_p/N(z)$ на рис. 3, a).

Таким образом, с увеличением толщины кристалла интенсивность пика должна расти пропорционально увеличению L_p . При увеличении амплитуды изгиба коэффициент захвата и средняя глубина проникновения незначительно падают, однако это падение компенсируется увеличением квадрата амплитуды изгиба, что приводит в результате к росту интенсивности CUR. Большая глубина проникновения приводит к тому, что при увеличении длины кристалла в 2 раза интенсивность CUR для случая $a = 4,0 \text{ \AA}$ (см. рис. 2, c) возрастает более чем вдвое. Данный факт есть след-

ствием конструктивной интерференции.

При анализе энергетической зависимости ChR становится важным учитывать изменение амплитуды осцилляций при каналировании [16]. Периодический изгиб кристалла снижает амплитуду колебаний в канале, так как глубина потенциальной ямы канала эффективно падает под действием центробежной силы. Этот эффект приводит к тому, что спектральная плотность ChR падает с увеличением амплитуды изгиба. При увеличении толщины кристалла интенсивность ChR растет, так как среднее количество частиц в канале практически не меняется с глубиной (см. рис. 3, c).

Для электронов зависимости параметров каналирования от амплитуды изгиба кристалла носят другой характер. Поскольку траектории электронов проходят в непосредственной близости от ионов решетки, они значительно чаще испытывают столкновения с ионами и, как следствие, деканализуют. Этим объясняются почти на порядок меньшие значения глубины проникновения L_p и полной длины каналирования L_{ch} , по сравнению с аналогичными значениями для позитронов. В прямом кристалле число захваченных в канал электронов быстро падает с расстоянием (см. рис. 1, a). В периодически изогнутом кристалле деканализация происходит еще быстрее. Немного иной становится ситуация при учете реканалирования: появляются дополнительные, чаще всего достаточно короткие, сегменты каналирования, которые эффективно увеличивают время нахождения электронов в канале.

Быстрый процесс деканалирования электронов, захваченных на входе в канал, приводит к тому, что с увеличением толщины кристалла интенсивность CUR растет мало, по сравнению со случаем для позитронов. При изменении амплитуды периодически изогнутого кристалла изменение интенсивности также мало, поскольку рост квадрата амплитуды нивелируется снижением значений двух других параметров.

При анализе поведения интенсивности ChR становится важным учет реканалирования частиц. Как было отмечено выше, электроны реканаллируют на участках кристалла с малой амплитудой изгиба, что приводит к тому, что они могут двигаться на этих участках с амплитудой колебаний, значительно большей, чем таковая возможна на участках с большой амплитудой изгиба. Такой процесс влечет за собой менее выраженное падение интенсивности ChR с увеличением амплитуды изгиба, чем в случае позитронов. С увеличением толщины кристалла интенсивность ChR увеличивается незначительно, так как в более длинном кристалле средняя длина, которую частица прошла в режиме каналлирования, оказывается больше.

Таким образом, динамика каналлирования/деканаллирования/реканаллирования проявляется по-разному для электронов и позитронов. Большое влияние на свойства каналлирования и излучения в периодически изогнутых кристаллах оказывает центробежная сила. Она приводит к подавлению ChR при увеличении амплитуды изгиба, она также ответственна за осцилляции количества частиц в режиме каналлирования. Дополнительные вопросы, касающиеся каналлирования в периодически изогнутых кристаллах алмаза при других энергиях налетающих электронов и позитронов, рассмотрены в работах [15, 16].

Заключение

Проведено компьютерное моделирование процессов планарного каналлирования электронов и позитронов в периодически

изогнутых кристаллах алмаза. Пучки электронов и позитронов с энергией 375 МэВ направлялись вдоль кристаллографической плоскости алмаза (110). Особенности спектров излучения, связанные с осцилляциями частиц в канале и с ондуляторным движением, получили свое объяснение с использованием статистического анализа траекторий частиц, полученных в процессе численного эксперимента.

Низкоэнергетический максимум в области 0,25 МэВ появляется при движении частиц в периодически изогнутом канале и имеет ондуляторную природу. Несмотря на малое число периодов изогнутого кристалла (4 и 8 периодов), это излучение имеет заметную интенсивность, что представляет интерес для возможного создания источника излучения в гамма-диапазоне.

Полученные результаты показывают, например, что увеличение толщины кристаллического ондулятора значительно увеличивает интенсивность CUR в случае позитронов, но данное усиление существенно меньше в случае электронов. При увеличении амплитуды изгиба периодически изогнутого кристалла интенсивность ChR падает как в случае электронов, так и в случае позитронов. Полученные результаты можно использовать при планировании будущих экспериментов, например, при подборе оптимальных параметров кристалла, энергии и типа частиц.

Благодарности

Авторы работы выражают благодарность руководству Суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого за предоставленные вычислительные ресурсы и помощь в проведении вычислений.

Данная работа поддержана в рамках гранта Alexander von Humboldt Foundation Linkage Grant и проекта HORIZON 2020 RISE-PEARL.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lindhard J., Winther A., Dan K. Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles // Kongel. Dan. Vidensk. Selsk., Mat.-Fys. Medd. 1965. Vol. 34. No. 14. Pp. 1–64.
2. Korol A.V., Solov'yov A.V., Greiner W.

Channeling and radiation in periodically bent crystals. 2nd edition. Berlin, Heidelberg: Springer Verlag, 2014. 240 p.

3. Korol A.V., Solov'yov A.V., Greiner W. Coherent radiation of an ultrarelativistic charged



particle channelled in a periodically bent crystal // *Journal of Physics. G: Nuclear and Particle Physics*. 1998. Vol. 24. No. 5. P. L45.

4. **Korol A.V., Solov'yov A.V., Greiner W.** Photon emission by an ultra-relativistic particle channeling in a periodically bent crystal // *International Journal of Modern Physics. E*. 1999. Vol. 8. No. 1. Pp. 49–100.

5. **Wistisen T.N., Andersen K.K., Yilmaz S., et al.** Experimental realization of a new type of crystalline undulator // *Phys. Rev. Lett.* 2014. Vol. 112. No. 25. P. 254801.

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

7. **Sushko G.B., Korol A.V., Greiner W., Solov'yov A.V.** Sub-GeV electron and positron channeling in straight, bent and periodically bent silicon crystals // *Journal of Physics: Conf. Ser.* 2013. Vol. 438. No. 1. P. 012018.

8. **Wistisen T.N., Uggerhøj U.I., Hansen J.L., et al.** Radiation collimation in a thick crystalline undulator // *Eur. Phys. J. D*. 2017. Vol. 71. No. 5. P. 124.

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

10. **Sushko G.B., Bezchastnov V.G., Korol A.V., et al.** Simulations of electron channeling in bent silicon crystal // *Journal of Physics: Conf. Ser.* 2013. Vol. 438. No. 1. P. 012019.

11. **Sushko G.B., Korol A.V., Solov'yov A.V.** Multi-GeV electron and positron channeling in bent silicon crystals // *Nucl. Instrum. Meth. B*. 2015. Vol. 355. 15 July. Pp. 39–43.

12. **Polozkov R.G., Ivanov V.K., Sushko G.B., et al.** Radiation emission by electrons channeling in bent silicon crystals // *Eur. Phys. J. D*. 2014. Vol. 68. No. 9. Pp. 268–277.

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

14. **Агапьев К.Б., Иванов В.К., Король А.В., Соловьев А.В.** Каналирование ультра-релятивистских частиц в кристалле алмаза // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2018. Т. 11. № 2. С. 139–150.

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

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

17. **Kostyuk A.** Crystalline undulator with a small amplitude and a short period // *Phys. Rev. Lett.* 2013. Vol. 110. No. 11. P. 115503.

18. **Korol A.V., Bezchastnov V.G., Sushko G.B., Solov'yov A.V.** Simulation of channeling and radiation of 855 MeV electrons and positrons in a small-amplitude short-period bent crystal // *Nucl. Instrum. Meth. B*. 2016. Vol. 387. 15 November. Pp. 41–53.

19. **Backe H., Lauth W.** Channeling experiments with sub-GeV electrons in flat silicon single crystals // *Nucl. Instrum. Meth. B*. 2015. Vol. 355. 15 July. Pp. 24–29.

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

21. **Backe H., Lauth W., Tran Thi T.N.** Channeling experiments at planar diamond and silicon single crystals with electrons from the Mainz Microtron MAMI // *Journal of Instrumentation*. 2018. Vol. 13. No. 4. P. C04022.

22. **Wistisen T.N., Uggerhøj U.I., Wienands U., et al.** Channeling, volume reflection, and volume capture study of electrons in a bent silicon crystal // *Phys. Rev. Acc. Beams*. 2016. Vol. 19. No. 7. P. 071001.

23. **Bagli E., Bandiera L., Bellucci V., et al.** Experimental evidence of planar channeling in a periodically bent crystal // *Eur. Phys. J. C*. 2014. Vol. 74. No. 10. P. 3114.

24. **Bandiera L., Bagli E., Germogli G., et al.** Investigation of the electromagnetic radiation emitted by sub-GeV electrons in a bent crystal // *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 115. No. 2. P. 025504.

25. **Wienands U., Markiewicz T.W., Nelson J., et al.** Observation of deflection of a beam of multi-GeV electrons by a thin crystal // *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 114. No. 7. P. 074801.

26. **Mazzolari A., Bagli E., Bandiera L., et al.** Steering of a sub-GeV electron beam through planar channeling enhanced by rechanneling // *Phys. Rev. Lett.* 2014. Vol. 112. No. 13. P. 135503.

27. **Uggerhøj U.I., Wistisen T.N.** Intense and energetic radiation from crystalline undulators // *Nucl. Instrum. Meth. B*. 2015. Vol. 355. 15 July. Pp. 35–38.

28. **Boshoff D., Copeland M., Haffjee F.,**

et al. The search for diamond crystal undulator radiation // 4th Int. Conf. "Dynamics of Systems on the Nanoscale" (Bad Ems, Germany, Oct. 3–7, 2016). Book of Abstracts, 2016. P. 38.

29. **Wienands U.** Channeling of electrons and positrons at SLAC. A talk at "Channeling 2016 – Charged & Neutral Particles Channeling Phenomena" (Sirmione del Garda, Italy. Sept. 25–30, 2016). 2016.

30. **Solov'yov I.A., Yakubovich A.V., Nikolaev P.V., et al.** MesoBioNano explorer – a universal program for multiscale computer simulations of complex molecular structure and dynamics // J. Comput. Chem. 2012. Vol. 33. No. 30. Pp. 2412–2439.

31. **Sushko G.B., Bezchastnov V.G., Solov'yov I.A., et al.** Simulation of ultra-relativistic electrons and positrons channeling in crystals with MBN Explorer // J. of Comp. Phys. 2013. Vol. 252. 1 November. Pp. 404–418.

32. **Sushko G.B., Bezchastnov V.G., Korol A.V., et al.** Simulations of electron channeling in bent silicon crystal // Journal of Physics: Conf. Ser. 2019. Vol. 438. No. 1. P. 012019.

33. **Sushko G.B., Korol A.V., Solov'yov A.V.** Electron and positron propagation in straight and periodically bent axial and planar silicon channels // St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2015. No. 3 (225). Pp. 173–184.

34. **Moliere G.** Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I. Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld // Zeitschrift für Naturforschung. A. 1947. Band 2. Num. 3. S. 133–145.

35. **Tsyganov E.N.** Some aspects of the mechanism of a charge particle penetration through a monocrystal // Fermilab TM-682. 1976. Pp. 1– 5.

Статья поступила в редакцию 18.10.2019, принята к публикации 15.11.2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПАВЛОВ Александр Валерьевич – аспирант кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
a.pavlov@physics.spbstu.ru

ИВАНОВ Вадим Константинович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ivanov@physics.spbstu.ru

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

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

СОЛОВЬЕВ Андрей Владимирович – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Научно-исследовательского центра мезобионаносистем (MBN), г. Франкфурт-на-Майне, Германия.

Altenhoferallee 3, 60438 Frankfurt am Main, Germany
solovyov@mbnresearch.com

REFERENCES

1. **Lindhard J., Winther A., Dan K.**, Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles, Kongel. Dan. Vidensk. Selsk., Mat.-Fys. Medd. 34 (14) (1965) 1–64.

2. **Korol A.V., Solov'yov A.V., Greiner W.**,

Channeling and radiation in periodically bent crystals, 2nd edition, Springer Verlag, Berlin Heildeberg, 2014.

3. **Korol A.V., Solov'yov A.V., Greiner W.**, Coherent radiation of an ultrarelativistic charged



particle channelled in a periodically bent crystal, *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*. 24 (5) (1998) L45.

4. **Korol A.V., Solov'yov A.V., Greiner W.**, Photon emission by an ultra-relativistic particle channeling in a periodically bent crystal, *International Journal of Modern Physics, E*. 8(01) (1999) 49–100.

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

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

7. **Sushko G.B., Korol A.V., Greiner W., Solov'yov A.V.**, Sub-GeV electron and positron channeling in straight, bent and periodically bent silicon crystals, *Journal of Physics: Conf. Ser.* 438(1) (2013) 012018.

8. **Wistisen T.N., Uggerh j.U.I., Hansen J.L., et al.**, Radiation collimation in a thick crystalline undulator, *Eur. Phys. J., D*. 71(5) (2017) 124.

9. **Yabashi M., Tanaka H.**, The next ten years of X-ray science, *Nature Photonics*. 11(1) (2017) 12–14.

10. **Sushko G.B., Bezchastnov V.G., Korol A.V., et al.**, Simulations of electron channeling in bent silicon crystal, *Journal of Physics: Conf. Ser.* 438(1) (2013) 012019.

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

12. **Polozkov R.G., Ivanov V.K., Sushko G.B., et al.**, Radiation emission by electrons channeling in bent silicon crystals, *Eur. Phys. J., D*. 68 (9) (2014) 268–277.

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

14. **Agapev K.B., Ivanov V.K., Korol A.V., Solov'yov A.V.**, Channeling of ultrarelativistic particles in a diamond crystal, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 11 (2) (2018) 139–150.

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

16. **Pavlov A.V., Korol A.V., Ivanov V.K., Solov'yov A.V.**, Interplay and specific features of

radiation mechanisms of electrons and positrons in crystalline undulators, *Journal of Physics, B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 52 (11) (2019) 11–16.

17. **Kostyuk A.**, Crystalline undulator with a small amplitude and a short period, *Phys. Rev. Lett.* 110 (11) (2013) 115503.

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

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

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

21. **Backe H., Lauth W., Tran Thi T.N.**, Channeling experiments at planar diamond and silicon single crystals with electrons from the Mainz Microtron MAMI, *Journal of Instrumentation*. 13 (04) (2018) C04022.

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

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

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

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

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

27. **Uggerhoj U.I., Wistisen T.N.**, Intense and energetic radiation from crystalline undulators, *Nucl. Instrum. Meth., B*. 355 (15 July) (2015) 35–38.

28. **Boshoff D., Copeland M., Haffejee F., et al.**, The search for diamond crystal undulator radiation, 4th Int. Conf. "Dynamics of Systems on the Nanoscale" (Bad Ems., Germany, Oct. 3

–7 2016), Book of Abstracts, 2016, P. 38.

29. **Wienands U.**, Channeling of electrons and positrons at SLAC, A talk at "Channeling 2016 – Charged & Neutral Particles Channeling Phenomena" (Sirmione del Garda, Italy, Sept. 25–30 2016), 2016.

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

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

32. **Sushko G.B., Bezchastnov V.G., Korol A.V.,**

et al., Simulations of electron channeling in bent silicon crystal, *Journal of Physics: Conf. Ser.* 438 (1) (2013) 012019.

33. **Sushko G.B., Korol A.V., Solov'yov A.V.**, Electron and positron propagation in straight and periodically bent axial and planar silicon channels, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics.* (3(225)) (2015) 173–184.

34. **Moliere G.**, Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I. Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld, *Zeitschrift für Naturforschung A.* 2 (3) (1947) 133–145.

35. **Tsyganov E.N.**, Some aspects of the mechanism of a charge particle penetration through a monocrystal, *Fermilab TM-682* (1976) 1 – 5.

Received 18.10.2019, accepted 15.11.2019.

THE AUTHORS

PAVLOV Alexander V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
a.pavlov@physics.spbstu.ru

IVANOV Vadim K.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
ivanov@physics.spbstu.ru

KOROL Andrey V.

MBN Research Center UG

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

SOLOV'YOV Andrey V.

MBN Research Center UG

Altenhoferallee 3, 60438 Frankfurt am Main, Germany
solovyov@mbnresearch.com

DOI: 10.18721/JPM.12412
УДК 517.938:070

МОДЕЛЬ РАСПРОСТРАНЕНИЯ НОВОЙ ИНФОРМАЦИИ В ОБЩЕСТВЕ

С.В. Тимофеев, А.П. Суходолов

Байкальский государственный университет, г. Иркутск, Российская Федерация

В статье строится и исследуется базовая математическая модель распространения в обществе новой информации. Предлагаемая модель представлена системой четырех обыкновенных дифференциальных уравнений с квадратичной нелинейностью в правых частях. Для данной системы найдены два стационарных решения, допускающие вполне логичную интерпретацию. В пространстве параметров системы выделены две области, в которых стационарные решения обладают разными свойствами. С помощью качественных методов теории дифференциальных уравнений изучены глобальные свойства фазового портрета построенной динамической системы. Это позволило выделить несколько возможных сценариев распространения новой информации в обществе.

Ключевые слова: распространение новой информации, стационарное решение системы, инвариантное множество, асимптотическая устойчивость

Ссылка при цитировании: Тимофеев С.В., Суходолов А.П. Модель распространения новой информации в обществе // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 119–134. DOI: 10.18721/JPM.12412

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

A MODEL OF NEW INFORMATION DISSEMINATION IN THE SOCIETY

S.V. Timofeev, A.P. Sukhodolov

Baikal State University, Irkutsk, Russian Federation

In the article, a basic mathematical model of new information dissemination in the society is constructed and studied. The suggested model has been described using the system of four ordinary differential equations with square nonlinearity in the right parts. Two stationary solutions furnishing quite logical interpretation for this system were found. Two areas with various properties of stationary solutions were separated in the parameters' space of the system. The global properties of a phase pattern of the constructed dynamic system were investigated by qualitative methods of the differential equations theory. The obtained results allowed finding several possible scenarios of new information dissemination in the society.

Keywords: dissemination of new information, stationary solution of system, invariant set, asymptotic stability

Citation: Timofeev S.V., Sukhodolov A.P., A model of new information dissemination in the society, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (4) (2019) 119–134. DOI: 10.18721/JPM.12412

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

Введение

Очевидным является факт, что средства массовой информации (СМИ) оказывают значительное влияние на все сферы деятельности общества. Их важная роль в формировании и развитии общественного сознания бесспорна. Каждый индивидум ежедневно получает массу новой информации, которая оказывает влияние на его выбор и предпочтения. И это не зависит от того, в каком качестве воспринимаются СМИ — как источник новостей, познавательной информации, развлечения или просто как возможность контактировать с внешней средой.

В мире четко прослеживается тенденция формирования так называемого «информационного общества». Например, в российском законодательстве уже имеется определение данного феномена. Согласно статье 3 «Стратегии развития информационного общества в Российской Федерации на 2017 – 2030 годы», информационное общество — это общество, в котором информация и уровень ее применения и доступности кардинальным образом влияют на экономические и социокультурные условия жизни граждан¹. Таким образом, главным ресурсом в обществе такого типа становятся информация и знания [1]. В этих условиях роль СМИ в формировании общественного мнения и сознания возрастает значительно. Именно они являются первоначальным источником новостей, позволяя получать самую свежую, порой в режиме реального времени, информацию из любой части света. Людям дано право доверять или не доверять предоставленным журналистами сведениям и их оценкам происходящего. В век высоких информационных технологий любая новость может быть представлена в каком-либо сегменте общества или обществе в целом. А современные технологии воздействия на общественное сознание с равным успехом через массмедиа могут применяться как для объединения и стабильности общества, так и его разъединения и дестабилизации. Все будет зависеть от целевых установок инициатора информационного воздействия и от потенциала объекта воздействия,

который либо желает принять эти установки, либо намерен защитить себя от внешнего информационного «давления» [2]. Успех в продвижении новой концепции в общество во многом зависит от позиций влиятельных СМИ, обладающих способностью формировать общественное мнение (с одной стороны), и субъектов общества, например экспертных сообществ, органов исполнительной власти, которые имеют возможность задействовать массмедиа для освещения альтернативной точки зрения и «раскручивания» своих концепций в социуме (с другой стороны) [3]. Такое информационное противоборство характеризуется общими факторами, поэтому представляют интерес формализация и изучение закономерности процесса в целом.

Построение модели

В настоящей статье построена и исследована базовая математическая модель распространения новой информации в обществе. Предложенная математическая модель, разумеется, является весьма обобщенной и в дальнейшем потребует детализации. Но уже в таком виде она позволяет связать выделенные для продвижения новостной информации факторы в некоторую систему и может быть полезной для изучения общей картины.

Будем считать, что основными факторами распространения новой информации являются следующие величины, зависящие от времени t : $N(t)$, $C(t)$, $A(t)$ и $i(t)$. Они выражают следующие понятия:

$N(t)$ (от *англ.* News) — количество новостной информации (сообщения разного рода), способствующей распространению новой концепции в обществе (либо сегменте общества);

$C(t)$ (от *англ.* Censorship) — количество органов со своими информационными ресурсами в структуре общества (либо сегменте общества), заинтересованных в сохранении ранее принятых концепций;

$A(t)$ (от *англ.* Alternative view) — количество информации (сообщения разного рода), препятствующей распространению (в том числе по поручению органов цензуры) новой концепции в обществе (либо сегменте общества);

$i(t)$ (от *англ.* index) — относительная характеристика приятия новой концепции на момент времени t ,

¹«О стратегии развития информационного общества в Российской Федерации на 2017–2030 годы». Указ Президента РФ от 9 мая 2017 года № 203 // Собрание законодательства РФ. 2017. № 20, ст. 2901.



$$i = 1 - \frac{I^*}{I},$$

где $I, \%$ – характеристика полного приятия в обществе определенной идеи, на смену которой претендует новая концепция; $I^*, \%$ – соответствующая характеристика приятия этой идеи при распространении новой концепции.

Очевидно, что до начала процесса продвижения $i = 0$, а при полном приятии новой концепции $i = 1$.

Построим соответствующие соотношения модели. Первое уравнение будет описывать динамику числа сообщений $N(t)$ в средствах массовой информации:

$$dN = \beta N dt - \gamma AN dt.$$

Выражение dN в левой части показывает численное изменение новостной информации, способствующей распространению новой концепции в обществе, за интервал времени dt . Неотрицательные параметры β, γ характеризуют интенсивность распространения информации через СМИ и вероятность нейтрализации эффекта от сообщения путем изложения альтернативной точки зрения соответственно. Разделив соотношение на dt , окончательно приходим к уравнению

$$\frac{dN}{dt} = \beta N - \gamma AN. \quad (1)$$

Следующее уравнение будет описывать реакцию различных органов цензуры на появление информации, связанной с продвижением новых идей в общество. Предполагается, что в социальной среде всегда используется административный ресурс в количестве C_* для поддержки своих концепций. Поэтому при информационном «вбросе» возможно изменение активности органов информационной защиты C и, соответственно, численное изменение ресурса, по сравнению с уровнем C_* :

$$d(C - C_*) = \alpha AN dt - \mu(C - C_*) dt.$$

Неотрицательный коэффициент α характеризует реакцию на интенсивность противоборства альтернативных точек зрения; положительный параметр μ – коэффициент, равный обратной величине времени функционирования дополнительно созданных органов.

С учетом того, что $d(C - C_*) = dC$, окончательно имеем:

$$\frac{dC}{dt} = \alpha AN - \mu(C - C_*). \quad (2)$$

В третьем уравнении будет подсчитан баланс числа альтернативных новостей в качестве возможности общества повлиять через СМИ на продвижение новой непривычной концепции. Предлагается исходить из следующего соотношения:

$$dA = \rho C dt - \eta \gamma AN dt - \lambda A dt, \quad (3)$$

где dA – количество актуальных новостей, появившихся в информационной среде в качестве альтернативы новостям N за интервал времени dt ; первый член $\rho C dt$ в правой части описывает «производство» новостей за время dt , при этом $\rho \geq 0$ – средняя скорость появления новостей из одного органа информации C ; второй член $\eta \gamma AN dt$ описывает уменьшение числа актуальных новостей за счет адресного воздействия на новости N за время dt , $\eta \geq 0$ – среднее количество новостной информации A для нейтрализации эффекта от сообщения N ; третий член $\lambda A dt$ описывает процесс забывания новостной информации за время dt , $\lambda > 0$ – коэффициент, обратно пропорциональный времени забывания информации.

Разделив соотношение (3) на dt , приходим к уравнению

$$\frac{dA}{dt} = \rho C - \eta \gamma AN - \lambda A.$$

Для характеристики приятия новой концепции рассмотрим следующее уравнение:

$$\frac{di}{dt} = \sigma N - \omega i. \quad (4)$$

Данное уравнение (4) показывает, что скорость изменения приятия новой идеи пропорциональна количеству новой информации N с коэффициентом пропорциональности $\sigma > 0$ с учетом инертности и осторожности восприятия нового с соответствующим коэффициентом восстановления приятия прежней концепции $\omega \geq 0$.

В итоге получаем следующую систему нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dN}{dt} &= \beta N - \gamma AN, \\ \frac{dC}{dt} &= \alpha AN - \mu(C - C_*), \\ \frac{dA}{dt} &= \rho C - \eta \gamma AN - \lambda A, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\frac{di}{dt} = \sigma N - \omega i. \quad (5)$$

В дальнейшем будем записывать систему (5) в более удобном для исследования виде:

$$\begin{aligned} \frac{dC}{dt} &= \alpha AN - \mu(C - C_*), \\ \frac{dA}{dt} &= \rho C - (\lambda + \eta\gamma N)A, \\ \frac{dN}{dt} &= (\beta - \gamma A)N, \\ \frac{di}{dt} &= \sigma N - \omega i. \end{aligned} \quad (6)$$

К данной системе уравнений (6) присоединим начальные данные при $t = t_0$:

$$\begin{aligned} C(t_0) &= C_0 \geq 0, \quad A(t_0) = A_0 \geq 0, \\ N(t_0) &= N_0 \geq 0, \quad i(t_0) = i_0 \geq 0, \end{aligned} \quad (7)$$

Систему уравнений (6) с начальными условиями (7) назовем базовой математической моделью распространения новой информации в обществе.

Так как система (6) является автономной, то положим $t_0 = 0$; при этом функции $C(t)$, $A(t)$, $N(t)$, $i(t)$ будем считать непрерывными в области их определения.

Анализ модели

Утверждение 1. Если при всех $t \geq 0$ существует решение системы (6) с начальными условиями (7), то множество

$$\begin{aligned} R_+^4 &= \{(C, A, N, i) \in \\ &\in R^4 : C \geq 0, A \geq 0, N \geq 0, i \geq 0\} \end{aligned}$$

инвариантно для этой системы.

Доказательство. Действительно, из третьего уравнения системы (6) следует, что при $t \geq 0$ справедливо следующее условие:

$$N(t) = N_0 \exp\left[\int_0^t (\beta - \gamma A) dt\right] \geq 0.$$

Это условие обеспечивает неотрицательность функции $i(t)$ при $t \geq 0$. В самом деле, если $N(t) = 0$, то

$$i(t) = i_0 \exp[-\omega t] \geq 0.$$

Если $N(t) \geq 0$, то $i(t) > 0$ вблизи точки $t = 0$. Действительно, при $i_0 = 0$

$$\left.\frac{di}{dt}\right|_{t=0} = \sigma N > 0$$

и $i(t)$ возрастает в окрестности $t = 0$.

Тогда, в силу непрерывности, для того чтобы $i(t)$ стала отрицательной, необходимо существование точки $t = t_1 > 0$, в которой

$$i(t_1) = 0, \quad \left.\frac{di}{dt}\right|_{t=t_1} < 0.$$

Но это невозможно, так как

$$\left.\frac{di}{dt}\right|_{t=t_1} = \sigma N(t_1) - \omega i(t_1) = \sigma N(t_1) > 0.$$

Точно так же легко показать неотрицательность функций $C(t)$ и $A(t)$ при начальных условиях (7).

Утверждение 1 доказано.

Следствие 1. Если в условиях утверждения 1 $C_0 \geq C_*$, то для всех $t \geq 0$ выполняется неравенство $C(t) \geq C_*$.

Неотрицательность решения системы (6) соответствует смыслу описываемого процесса, поскольку переменные модели интерпретируются как величины, значения которых не могут быть отрицательными.

Таким же образом несложно показать [4 – 7], что система (6) обладает свойствами единственности, неограниченной продолжимости решений, а также их непрерывной зависимости от параметров.

Система (6) допускает два стационарных решения:

$$\begin{aligned} X_{1st} &= (C_{1st}, A_{1st}, N_{1st}, i_{1st}) = (C_*, \frac{\rho C_*}{\lambda}, 0, 0); \\ X_{2st} &= (C_{2st}, A_{2st}, N_{2st}, i_{2st}), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} C_{2st} &= \frac{\alpha\lambda\beta - \eta\mu\gamma^2 C_*}{\gamma(\alpha\rho - \mu\eta\gamma)}, \quad A_{2st} = \frac{\beta}{\gamma}, \\ N_{2st} &= \frac{\mu(\lambda\beta - \gamma\rho C_*)}{\beta(\alpha\rho - \mu\eta\gamma)}, \quad i_{2st} = \frac{\sigma\mu(\lambda\beta - \gamma\rho C_*)}{\omega\beta(\alpha\rho - \mu\eta\gamma)}. \end{aligned}$$

Выделим в пространстве параметров системы две области, в которых $X_{ist} \in R_+^4$, $i = 1, 2$:

$$\Omega_1 : \begin{cases} \gamma\rho C_* > \lambda\beta, \\ \mu\eta\gamma > \alpha\rho, \end{cases} \quad \Omega_2 : \begin{cases} \gamma\rho C_* < \lambda\beta, \\ \mu\eta\gamma < \alpha\rho. \end{cases}$$

Интерпретация: Здесь X_{1st} можно определить как состояние общества, в котором доминирует определенная концепция. Для ее поддержки в обществе используется ад-

министративный ресурс в количестве C_* с необходимым количеством информации $\rho C^* / \lambda$ в СМИ. X_{2st} характеризуется как состояние общества, в котором сосуществуют привычная старая и новая концепции (представлены своими долями), а относительная характеристика приятия новых представлений i_{2st} имеет положительное значение.

Для исследования устойчивости стационарных решений системы (6) линеаризуем ее вблизи стационарных точек X_{ist} , $i = 1, 2$, и проанализируем характеристическое уравнение системы ее первого приближения:

$$W(k) = \begin{vmatrix} a_{11} - k & \alpha N_{ist} & \alpha A_{ist} & 0 \\ \rho & a_{22} - k & -\eta \gamma A_{ist} & 0 \\ 0 & -\gamma N_{ist} & a_{33} - k & 0 \\ 0 & 0 & \sigma & a_{44} - k \end{vmatrix} = 0,$$

где

$$a_{11} = -\mu, a_{22} = -\eta \gamma N_{ist} - \lambda, \\ a_{33} = \beta - \gamma A_{ist}, a_{44} = -\omega.$$

Для $X_{1st} = (C_{1st}, A_{1st}, N_{1st}, i_{1st})$, имеем:

$$W_1(k) = \left(\beta - \frac{\rho C_*}{\lambda} - k \right) (\lambda + k) \times (\mu + k) (\omega + k) = 0.$$

Для $X_{2st} = (C_{2st}, A_{2st}, N_{2st}, i_{2st})$, соответственно,

$$W_2(k) = (\omega + k)(k^3 + ak^2 + bk + c) = 0,$$

где

$$a = \mu + \eta \gamma N_{2st} + \lambda, \\ b = \mu(\eta \gamma N_{2st} + \lambda) - (\alpha \rho + \eta \gamma \beta) N_{2st}, \quad (8) \\ c = \beta N_{2st} (\alpha \rho - \mu \eta \gamma).$$

Утверждение 2. В области параметров Ω_1 стационарное решение X_{1st} системы (6) асимптотически устойчиво, а решение X_{2st} неустойчиво.

Доказательство. Для стационарного решения X_{1st} корни характеристического уравнения имеют следующий вид:

$$k_1 = -\omega < 0, k_2 = -\mu < 0, \\ k_3 = -\lambda < 0, k_4 = \beta - \frac{\gamma \rho C_*}{\lambda}.$$

Однако в области параметров Ω_1 $k_4 < 0$. Но, таким образом, корни $W_1(k)$ отрицательны, что и означает асимптотическую устойчивость решения X_{1st} в линеаризованной системе и, следовательно, в системе (6).

Для $W_2(k)$ в области параметров Ω_1 свободный член

$$c = \beta N_{2st} (\alpha \rho - \mu \eta \gamma) < 0,$$

что означает наличие положительного корня для соответствующего характеристического уравнения. Следовательно, стационарное решение X_{2st} системы (6) неустойчиво.

Утверждение 2 доказано.

Утверждение 3. В области параметров Ω_2 стационарное решение X_{1st} системы (6) неустойчиво, а решение X_{2st} при выполнении дополнительного условия $ba - c > 0$ асимптотически устойчиво.

Доказательство. Для стационарного решения X_{1st} корни характеристического уравнения имеют следующий вид:

$$k_1 = -\omega < 0, k_2 = -\mu < 0,$$

$$k_3 = -\lambda < 0, k_4 = \beta - \frac{\gamma \rho C_*}{\lambda}.$$

Однако в области параметров Ω_2 $k_4 > 0$. Таким образом, для $W_1(k)$ существует положительный корень, и, следовательно, стационарное решение X_{1st} системы (6) неустойчиво.

Для $W_2(k)$ имеем $k_1 = -\omega < 0$. Для исследования остальных корней характеристического уравнения рассмотрим многочлен

$$P(k) = k^3 + ak^2 + bk + c$$

с коэффициентами из выражений (8).

Поскольку

$$a = \mu + \eta \gamma N_{2st} + \lambda > 0,$$

$$c = \beta N_{2st} (\alpha \rho - \mu \eta \gamma) > 0$$

в области параметров Ω_2 , то условие

$$ba - c > 0 \quad (9)$$

утверждения 3 предполагает, что и $b > 0$. Наряду с выполнением самого условия (9), на основании критерия Гурвица [8] делаем вывод, что все действительные корни и действительные части комплексных корней многочлена $P(k)$, а поэтому и характеристического уравнения $W_2(k) = 0$, отрицательны. Таким образом, стационарное решение X_{2st} в линеаризованной системе и, следовательно, в системе (6) асимптотически устойчиво.

Утверждение 3 доказано.

Замечание 1. Следует обратить внимание, что переменная $i(t)$ фигурирует только в последнем уравнении системы (6),

поэтому в дальнейшем имеет смысл проводить исследования лишь для системы

$$\begin{aligned} \frac{dC}{dt} &= \alpha AN - \mu(C - C_*), \\ \frac{dA}{dt} &= \rho C - (\lambda + \eta\gamma N)A, \\ \frac{dN}{dt} &= (\beta - \gamma A)N, \\ C(t_0) &= C_0 \geq 0, A(t_0) = A_0 \geq 0, \\ N(t_0) &= N_0 \geq 0, \end{aligned} \quad (10)$$

распространяя затем выводы и результаты на переменную $i(t)$.

Стационарные решения системы (10), (11) имеют вид:

$$\begin{aligned} X_{1st} &= (C_{1st}, A_{1st}, N_{1st}) = (C_*, \frac{\rho C_*}{\lambda}, 0), \\ X_{2st} &= (C_{2st}, A_{2st}, N_{2st}) = \\ &= \left(\frac{\alpha\lambda\beta - \eta\mu\gamma^2 C_*}{\gamma(\alpha\rho - \mu\eta\gamma)}, \frac{\beta}{\gamma}, \frac{\mu(\lambda\beta - \gamma\rho C_*)}{\beta(\alpha\rho - \mu\eta\gamma)} \right). \end{aligned}$$

Анализ модели (10), (11) в области параметров Ω_1

При исследовании трехмерной системы (10), (11) существенно используются свойства вспомогательной двумерной системы дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= \rho C - (\lambda + \eta\gamma N)A, \\ \frac{dN}{dt} &= (\beta - \gamma A)N, \end{aligned} \quad (12)$$

полученной из подсистемы (10) при $\alpha = 0$ и $C(t) = C_*$ при $t \geq 0$.

Интерпретация. Данная система (12) моделирует ситуацию, когда при информационном «вбросе» новой идеи в общество органы информационной защиты не реагируют на него, так как считают, что ранее необходимое количество административного ресурса достаточно для поддержки привычных положений и нейтрализации реакции на появление в СМИ новой информации.

Система (12), очевидно, обладает свойствами единственности, неограниченной продолжимости решений и непрерывной их зависимости от параметров, причем множество

$$R_+^2 = \{(A, N) \in R^2 : A \geq 0, N \geq 0\}$$

для системы (12) инвариантно.

Система (12) в области параметров Ω_1 имеет следующие стационарные решения:

$$\begin{aligned} X_{1st} &= (A_{1st}, N_{1st}) = \left(\frac{\rho C_*}{\lambda}, 0 \right), \\ X_{2st} &= (A_{2st}, N_{2st}) = \left(\frac{\beta}{\gamma}, \frac{\gamma\rho C_* - \lambda\beta}{\beta\eta\gamma} \right), \end{aligned}$$

лежащие в R_+^2 , причем X_{1st} – устойчивый узел, а X_{2st} – седло.

С использованием известных приемов качественного анализа двумерных систем дифференциальных уравнений [9] и результата теоремы 4.1, представленной в статье [10], построен и изучен фазовый портрет поведения траекторий системы (12) (рис. 1).

Исходя из построения и изученных свойств траекторий, для данного фазового портрета можно выделить следующие области подпространства R^2 :

$$\begin{aligned} Q_1 &= \left\{ (A, N) \in R_+^2 : \frac{\beta}{\gamma} \leq A < \infty, 0 \leq N \leq N_{2st} \right\}, \\ Q_2 &= \left\{ (A, N) \in R_+^2 : 0 \leq A < \frac{\beta}{\gamma}, 0 \leq N \leq N_{2st} \right\}, \\ Q_3 &= \left\{ (A, N) \in R_+^2 : 0 \leq A < \frac{\beta}{\gamma}, N_{2st} \leq N < \infty \right\}, \\ Q_4 &= \left\{ (A, N) \in R_+^2 : \frac{\beta}{\gamma} \leq A < \infty, N_{2st} \leq N < \infty \right\}. \end{aligned}$$

К седлообразной точке X_{2st} системы (12) в области параметров Ω_1 примыкают четыре сепаратрисы: устойчивые $p(t), q(t)$ и неустойчивые $r(t), s(t)$; при этом $p(t), q(t) \in Q_4$ при $t \geq 0$, и $p(t), q(t) \rightarrow X_{2st}$ при $t \rightarrow +\infty$, $r(t) \in Q_3, s(t) \in Q_1$ и $r(t), s(t) \rightarrow X_{2st}$ при $t \rightarrow -\infty$. Q_1, Q_3 – инвариантные множества относительно системы (12). Кривая, составленная из устойчивых сепаратрис p, q седла X_{2st} , является границей области притяжения устойчивого узла X_{1st} .

Поскольку аналитическое описание кривых, представляющих собой сепаратрисы $p(t)$ и $q(t)$, затруднительно, в предлагаемом утверждении дается следующая оценка области притяжения X_{1st} , аналог которой ниже приводится и для системы (10).

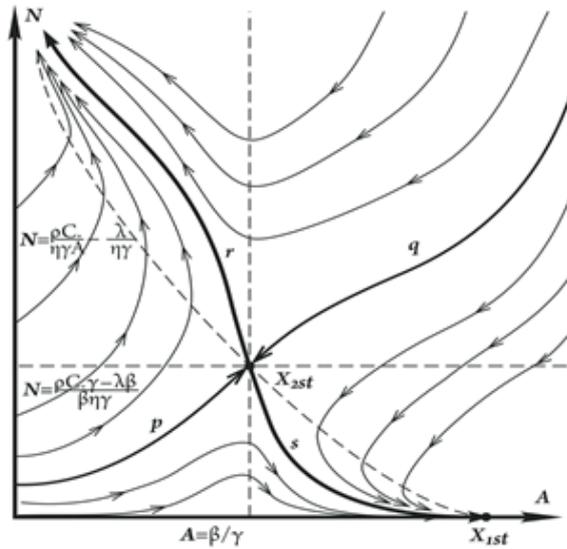


Рис. 1. Фазовый портрет системы (12)

Утверждение 4. Пусть заданы множества

$$Q_1^* = Q_1 \setminus \{X_{2st}\},$$

$$Q_2^* = \left\{ (A, N) \in Q_2 : 0 \leq A < \frac{\beta}{\gamma}, \right.$$

$$\left. 0 \leq N \leq N_{2st} \exp\left(\frac{-\beta^2}{\rho C_* \gamma}\right) \exp\left(\frac{\beta A}{\rho C_*}\right) \right\}.$$

В области параметров Ω_1 множество $Q = Q_1^* \cup Q_2^*$ – оценка области притяжения асимптотически устойчивого стационарного решения X_{1st} системы (12).

Доказательство. Так как Q_1^* – инвариантное множество системы (12), лежащее в области притяжения устойчивого узла X_{1st} , то из того, что $X_0 = (A_0, N_0) \in Q_1^*$, следует что $X(t, X_0) \in Q_1^*$ при всех $t \geq 0$, и $X(t, X_0) \rightarrow X_{1st}$ при $t \rightarrow +\infty$.

Покажем, что, если

$$X_0 = (A_0, N_0) \in Q_2^*,$$

то найдется такой момент времени t_* , при котором

$$X(t_*, X_0) \in Q_1^*.$$

Пусть $N = N(A)$ – интегральная кривая дифференциального уравнения, полученного из системы (12):

$$\frac{dN}{dA} = \frac{(\beta - \gamma A)N}{\rho C_* - (\lambda + \eta \gamma N)A} = f(A, N), \quad (13)$$

а $G = G(A)$ – решение уравнения

$$\frac{dG}{dA} = \frac{(\beta - \gamma A)G}{\rho C_* - (\lambda + \eta \gamma N_{2st})A} \equiv \frac{\beta G}{\rho C_*}. \quad (14)$$

Для любой точки $(A, N) \in Q_2$, очевидно, что

$$f(A, N) \leq \frac{\beta N}{\rho C_*},$$

поэтому по теореме Чаплыгина о дифференциальных неравенствах [11], если

$$N(A_0) \leq G(A_0),$$

$$(A_0, N(A_0)) \in Q_2,$$

$$(A_0, G(A_0)) \in Q_2,$$

то

$$N(A) \leq G(A)$$

для тех $A > A_0$, для которых $(A, N, (A)) \in Q$.

Пусть $G(0)$ – точка оси ON , начиная из которой кривая $G(A)$ проходит через точку (A_{2st}, N_{2st}) . Из формулы (14) следует, что

$$G(A) = G(0) \exp\left(\frac{\beta A}{\rho C_*}\right),$$

поэтому, если $G(A_{2st}) = N_{2st}$, то

$$G(0) = N_{2st} \exp\left(\frac{-\beta^2}{\rho C_* \gamma}\right).$$

На основании теоремы Чаплыгина любая интегральная кривая уравнения (13) при $N(0) \leq G(0)$ попадает с ростом A в множество Q_1^* и, следовательно, будет стремиться

к стационарному решению X_{1st} . Таким образом, каждая точка множества Q_2^* принадлежит области притяжения X_{1st} , а множество $Q = Q_1^* \cup Q_2^*$ – ее оценка.

Утверждение 4 доказано.

Интерпретация. Рис. 1 хорошо иллюстрирует возможное развитие ситуации при отсутствии должного внимания к информационному «вбросу». Если количество сообщений о новой концепции в СМИ незначительно или реакция общества на них слабая, то исходного административного ресурса может быть достаточно, чтобы новые идеи не проникли в общественное сознание. Но если объем новой информации значительный, то традиционной активности органов информационной защиты может оказаться недостаточно для нейтрализации общественной реакции. И тогда без осмысленного управления СМИ новая концепция становится доминирующей в обществе, так как из графика на рис. 1 следует, что не всякая реакция на подавление новой идеи приводит к успеху.

Обращаясь теперь к системе (10), (11), получаем аналогичный результат. Докажем теорему.

Теорема 1. *В пространстве параметров Ω_1 множество $D = D_1 \cup D_2$ фазового пространства $\{C, A, N\}$ системы (10), где*

$$D_1 = \left\{ (C, A, N) : C_* \leq C < \infty, \frac{\beta}{\gamma} \leq A < \infty, 0 \leq N \leq N_* \right\}$$

$$D_2 = \left\{ (C, A, N) : C_* \leq C < \infty, 0 \leq A < \frac{\beta}{\gamma}, 0 \leq N \leq N_* \exp\left(\frac{-\beta^2}{\rho C_* \gamma}\right) \exp\left(\frac{\beta A}{\rho C_*}\right) \right\},$$

$$N_* = \frac{\gamma \rho C_* - \lambda \beta}{\beta \eta \gamma},$$

является оценкой области притяжения асимптотически устойчивого стационарного решения X_{1st} системы (10), (11).

Доказательство. Из утверждения 4, первого и третьего уравнений системы (10), (11) следует инвариантность множества D_1 .

Множество

$$\overline{D_1} = \left\{ (C, A, N) \in \partial D_1 : N = 0 \right\},$$

где ∂D_1 – граница множества D_1 , также,

очевидно, является инвариантным для решения системы (10), (11), и если

$$X_0 = (C_0, A_0, N_0) \in \overline{D_1},$$

то $X(t, X_0) \rightarrow X_{1st}$ при $t \rightarrow +\infty$, поскольку на множестве $\overline{D_1}$ система (10) задается линейными уравнениями

$$\frac{dC}{dt} = -\mu(C - C_*), \frac{dA}{dt} = \rho C - \lambda A, \quad (15)$$

$$N(t, X_0) \equiv 0,$$

для которых особая точка X_{1st} – глобально равномерно асимптотически устойчива.

Пусть $X_0 \in D_1 \setminus \overline{D_1}$, а $X(t, X_0)$ – решение системы (10), (11), начинающееся в X_0 . Для компоненты $N(t, X_0)$ вектора $X(t, X_0)$, согласно третьему уравнению, справедливо неравенство $\dot{N}(t, X_0) \leq 0$ для $t \geq 0$, причем $\dot{N}(t, X_0) = 0$ лишь в изолированной точке временной полуоси $[0; \infty)$, где

$$C(t, X_0) = C_*, A(t, X_0) = \frac{\beta}{\gamma},$$

$$N(t, X_0) \equiv N_*.$$

Поскольку точка $\left(C_*, \frac{\beta}{\gamma}, N_*\right) \in D_1$ не является особой для системы (10), (11), существует такой момент времени $t_1 \geq 0$, когда для неотрицательной функции $N(t, X_0)$ имеем $\dot{N}(t, X_0) \leq 0$ для всех $t \geq t_1 \geq 0$. Но тогда

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} N(t, X_0) = 0,$$

и, следовательно,

$$X(t, X_0) \rightarrow \overline{D_1} \text{ при } t \rightarrow +\infty.$$

На основании теоремы о непрерывной зависимости решений системы (10), (11) от начальных данных (см. работу [12]) следует, что

$$X(t, X_0) \rightarrow X_{1st} \text{ при } t \rightarrow +\infty,$$

поскольку таким свойством обладает каждое решение системы (15).

Изучим поведение траектории системы (10), (11) на множестве D_2 . Согласно приведенному выше, при

$$X_0 \in D_2 : C_0 \geq C_*$$

имеем $C(t) \geq C_*$ при всех $t \geq 0$.

Рассмотрим систему из двух уравнений:

$$\frac{dN_1}{dt} = (\beta - \gamma A_1)N_1, \quad (16)$$

$$\frac{dA_1}{dt} = \rho C(t) - (\lambda + \eta\gamma N_1)A_1,$$

которая эквивалентна уравнению

$$\frac{dN_1}{dA_1} = \frac{(\beta - \gamma A_1)N_1}{\rho C(t) - (\lambda + \eta\gamma N_1)A_1}. \quad (17)$$

В области D_2 из уравнений (17) и (13) следует, что

$$\begin{aligned} \frac{(\beta - \gamma A)N}{\rho C(t) - (\lambda + \eta\gamma N)A} &\leq \\ &\leq \frac{(\beta - \gamma A)N}{\rho C_* - (\lambda + \eta\gamma N)A}. \end{aligned}$$

Из теоремы Чаплыгина о дифференциальных неравенствах [11] следует, что, если только $N_1(0) \leq N(0)$, то в множестве D_2 для систем (16) и (12) будет выполняться неравенство $N_1(t) \leq N(t)$ при всех $t \geq 0$. Поэтому, если $X_0 \in D_2$ для системы (10), (11), то решение $X(t, X_0) \in D_2$ для всех $A < \frac{\beta}{\gamma}$. Но

поскольку в множестве D_2 производная $A(t) > 0$, а переменная $C(t)$ ограничена, то $X(t, X_0)$ попадает в область D_1 за конечный отрезок времени. Поэтому, если $X_0 \in D$, то любое решение

$$X(t, X_0) \rightarrow X_{1st} \text{ при } t \rightarrow +\infty,$$

если только $X_0 \in D$.

Теорема 1 полностью доказана.

При этом справедлива следующая, более сильная теорема.

Теорема 2. Пусть дана система (10), в которой параметры принадлежат области Ω_1 . Тогда для неустойчивого стационара X_{2st} существует сепаратрисная поверхность W^s , которая является точной границей области притяжения асимптотически устойчивого стационарного решения X_{1st} .

Доказательство. Действительно, поскольку параметры системы (10) принадлежат области Ω_1 , через неустойчивый стационар X_{2st} проходит устойчивая сепаратрисная поверхность $W^s(X_{2st})$. Тогда, убедившись в справедливости условий $A1 - A3$ теоремы 4.1, представленных в работе [10], получаем сформулированный в теореме результат.

Теорема 2 доказана.

Интерпретация. Полученные результаты показывают, что при обозначенных соотношениях для параметров системы в пространстве $\{C, A, N\}$ существует область, из которой система стремится к устойчивому состоянию X_{1st} . В этом состоянии в обществе (или в его сегменте) полностью доминирует привычная прежняя концепция. Поэтому теоретически в любой момент времени при грамотном управлении параметрами системы можно добиться попадания траектории в описанную область.

Анализ системы (10), (11) в области параметров Ω_2

Система (10), (11), согласно замечанию 1, есть редукция системы (5), (6). Поэтому, вследствие утверждения 3, в области параметров Ω_2 стационарное решение X_{1st} системы (10) неустойчиво, а решение X_{2st} , при выполнении дополнительного условия (9), асимптотически устойчиво. Представляет интерес исследовать область притяжения стационара X_{2st} системы (10), (11).

В пространстве $\{C, A, N\}$ рассмотрим поверхность, где величина $A(t)$ равна нулю:

$$N = \frac{\rho C}{\eta\gamma A} - \frac{\lambda}{\eta\gamma}. \quad (18)$$

Введем дополнительное соотношение:

$$\rho C_*(\rho\alpha + \eta\beta\gamma) - \lambda\eta\beta(\mu + \beta) \geq 0 \quad (19)$$

и рассмотрим следующее множество (оно графически представлено на рис. 2):

$$G = \{(C, A, N) : 0 < N < \mathbf{p}(C - C_*), A_{1st} \leq A < \infty\}, \quad (20)$$

где

$$\mathbf{p} - \text{const} : \frac{\mu\lambda + (\lambda\beta - \rho C_*\beta\gamma)}{\rho C_*\alpha} < \mathbf{p} < \frac{\rho}{\eta\beta}.$$

Утверждение 5. Пусть для системы (10), (11) в области параметров Ω_2 выполняется условие (19). Тогда для этой системы множество G — инвариантно.

Доказательство. Установим направление векторного поля на поверхности $N = \mathbf{p}(C - C_*)$, определенной в соотношении (19).

Скалярное произведение векторов

$$\mathbf{n} = \left(\frac{\partial N}{\partial C}; \frac{\partial N}{\partial A}; -1 \right) = (\mathbf{p}; 0; -1)$$

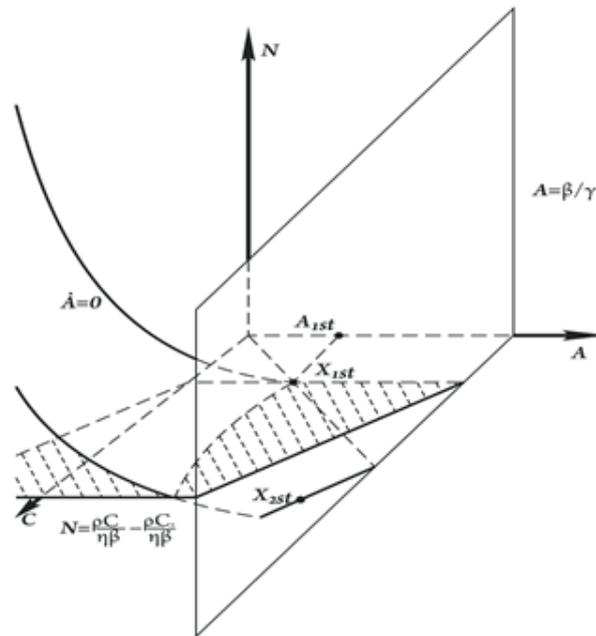


Рис. 2. Множество G (см. формулу (20)) в фазовом пространстве системы (10), (11)

и

$$\frac{dX}{dt} = \left(\frac{dC}{dt}, \frac{dA}{dt}, \frac{dN}{dt} \right)$$

имеет вид

$$\mathbf{p}(C - C_*) [(\alpha\mathbf{p} + \gamma)A - (\mu + \beta)].$$

Это выражение больше нуля при

$$A > \frac{\mu + \beta}{\alpha\mathbf{p} + \gamma} = \bar{A},$$

что означает попадание траекторий системы при таких A с плоскости

$$N = \mathbf{p}(C - C_*)$$

в множество G . Но в этом множестве $A_{1st} \leq A$.

Другими словами, для того чтобы множество G было инвариантно, требуется выполнение условия $\bar{A} \leq A_{1st}$. Но при \mathbf{p} из выражения (20) оно справедливо лишь при выполнении соотношения (19) (см. ниже замечание 2). На части плоскости $A = A_{1st}$, которая принадлежит множеству G , векторное поле направлено внутрь этого множества, поскольку с учетом того, что $N > 0$, справедливы неравенства

$$\left. \frac{dA}{dt} \right|_{A=A_{1st}} > \rho(C - C_*) \frac{\lambda\beta - \rho C_*\gamma}{\lambda\beta} > 0.$$

Следовательно, все траектории этой системы с границы $A = A_{1st}$ попадают в множество G . А поскольку плоскость $N = 0$ является инвариантной, траектории не могут

попасть из множества G на эту плоскость (иначе будет нарушена теорема единственности).

Утверждение 5 доказано.

Замечание 2. Ограничение на параметр \mathbf{p} снизу следует из того, что неравенство $\bar{A} \leq A_{1st}$ справедливо лишь при

$$\frac{\mu\lambda + (\lambda\beta - \rho C_*\beta\gamma)}{\rho C_*\alpha} < \mathbf{p}.$$

Ограничение же на параметр \mathbf{p} сверху потребуется далее в утверждении 6.

При \mathbf{p} из выражения (20) условие $\bar{A} \leq A_{1st}$ действительно выполняется лишь при соотношении (19). Выражение

$$q \frac{\rho}{\eta\beta} + (1-q) \frac{\mu\lambda + (\lambda\beta - \rho C_*\beta\gamma)}{\rho C_*\alpha},$$

$$q \in (0; 1)$$

описывает интервал

$$\left(\frac{\mu\lambda + (\lambda\beta - \rho C_*\beta\gamma)}{\rho C_*\alpha}, \frac{\rho}{\eta\beta} \right).$$

Тогда условие $\bar{A} \leq A_{1st}$ при

$$\mathbf{p} \in \left(\frac{\mu\lambda + (\lambda\beta - \rho C_*\beta\gamma)}{\rho C_*\alpha}, \frac{\rho}{\eta\beta} \right)$$

принимает вид

$$q\rho^2 C_*\alpha + (1-q)\eta\beta[\mu\lambda + (\lambda\beta - \rho C_*\gamma)] + \rho C_*\eta\beta\gamma > \lambda\eta\beta(\mu + \beta).$$

Отсюда следует неравенство

$$(q-1)[\rho^2 C_* \alpha - \eta \beta (\mu \lambda + \lambda \beta - \rho C_* \gamma)] + \rho C_* \eta \beta \gamma + \rho^2 C_* \alpha - \lambda \eta \beta (\mu + \beta) > 0,$$

что эквивалентно выполнению неравенства

$$q[\rho C_* (\rho \alpha + \eta \beta \gamma) - \lambda \eta \beta (\mu + \beta)] > 0.$$

Утверждение 6. Пусть для системы (10), (11) в области параметров Ω_2 выполняется условие (19). Тогда траектории этой системы ограничены на множестве G .

Доказательство. Проведем доказательство в три этапа.

Первый этап. Пусть G_1 – подмножество G , где

$$A_{1st} \leq A \leq \frac{\beta}{\gamma}.$$

Покажем, что в подмножестве G_1 траектории системы ограничены.

Рассмотрим для этого плоскость

$$\mathbf{a}A - C + \mathbf{b} = 0 \quad (21)$$

с нормалью $\mathbf{n}_1 = (-1; \mathbf{a}; 0)$. Коэффициенты $\mathbf{a}, \mathbf{b} > 0$ выберем так, чтобы плоскость (21) пересекала подмножество G_1 . Рассмотрим на этой плоскости в G_1 векторное поле

$$\frac{dX}{dt} = \left(\frac{dC}{dt}; \frac{dA}{dt}; \frac{dN}{dt} \right)$$

системы уравнений (10). А именно, определим часть плоскости (21), где скалярное произведение векторов \mathbf{n}_1 и dX/dt больше нуля. Это произведение имеет вид:

$$\begin{aligned} & \mu(C - C_*) - \alpha AN + \alpha \rho C - \\ & - \mathbf{a} \lambda A - \mathbf{a} \eta \gamma AN > \\ & > \mu(C - C_*) - \alpha \frac{\beta}{\gamma} N + \\ & + \alpha \rho C - \mathbf{a} \lambda A - \mathbf{a} \eta \gamma \frac{\beta}{\gamma} N. \end{aligned}$$

С учетом данной оценки и уравнения плоскости (21) скалярное произведение гарантированно будет положительным при

$$N < \frac{\mathbf{a} \gamma (\mathbf{a} \rho + \mu - \lambda)}{\beta (\mathbf{a} \eta \gamma + \alpha)} A - \frac{\gamma (\mu C_* - \mathbf{a} \mathbf{b} \rho)}{\beta (\mathbf{a} \eta \gamma + \alpha)}.$$

Найдем соотношение, при котором это произведение больше нуля в любой точке плоскости (21) из подмножества G_1 . Для этого найдем пересечение плоскости

$$N = \mathbf{p} (C - C_*)$$

с плоскостью (21). Уравнение этой прямой имеет вид:

$$N = \mathbf{p} \mathbf{a} A + \mathbf{p} \mathbf{b} - \mathbf{p} C_*. \quad (22)$$

Если коэффициент при A в уравнении для прямой (22) будет меньше соответствующего коэффициента прямой

$$N = \frac{\mathbf{a} \gamma (\mathbf{a} \rho + \mu - \lambda)}{\beta (\mathbf{a} \eta \gamma + \alpha)} A - \frac{\gamma (\mu C_* - \mathbf{a} \mathbf{b} \rho)}{\beta (\mathbf{a} \eta \gamma + \alpha)}, \quad (23)$$

то в уравнении (21) можно найти такую постоянную \mathbf{b} , что прямые (22) и (23) пересекутся в точке A_{1st} , а при условии

$$A_{1st} \leq A \leq \frac{\beta}{\gamma} \quad (24)$$

вектор системы на плоскости (21) в подмножестве G_1 будет направлен в одну сторону с вектором \mathbf{n}_1 от плоскости (21). Это будет означать, что для любой траектории из множества G при условии (24) существует «перегородка», которая не позволяет ей уйти в бесконечность на подмножестве G_1 .

Остается показать, что всегда можно подобрать \mathbf{a} такое, что для коэффициентов при A в уравнениях (22) и (23) будет выполняться соотношение

$$\mathbf{p} < \frac{\gamma (\mathbf{a} \rho + \mu - \lambda)}{\beta (\mathbf{a} \eta \gamma + \alpha)}.$$

Качественное поведение функции

$$f(\mathbf{a}) = \frac{\gamma (\mathbf{a} \rho + \mu - \lambda)}{\beta (\mathbf{a} \eta \gamma + \alpha)}$$

схематично представлено на графике рис. 3. При его анализе видно, что при любом $\mathbf{p} < \rho / \eta \beta$ существует

$$0 < \mathbf{a} < \infty: f(\mathbf{a}) > \mathbf{p}.$$

Таким образом, траектория системы (10), попав в множество G при условии (24), может уйти в бесконечность, если только пересечет плоскость $A = \beta / \gamma$.

Второй этап. Начинаясь в подмножестве множества G , где $A > \beta / \gamma$, траектория также не может уйти в бесконечность. Действительно, при $A > \beta / \gamma$ из третьего уравнения системы (10) следует, что $\dot{N}(t) < 0$. Поэтому, если воспользоваться рассуждениями, аналогичными использованным при доказательстве теоремы 1, то можно показать, что для компоненты $N(t, X_0)$ вектора $X(t, X_0)$ справедливо соотношение

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} N(t, X_0) = 0,$$

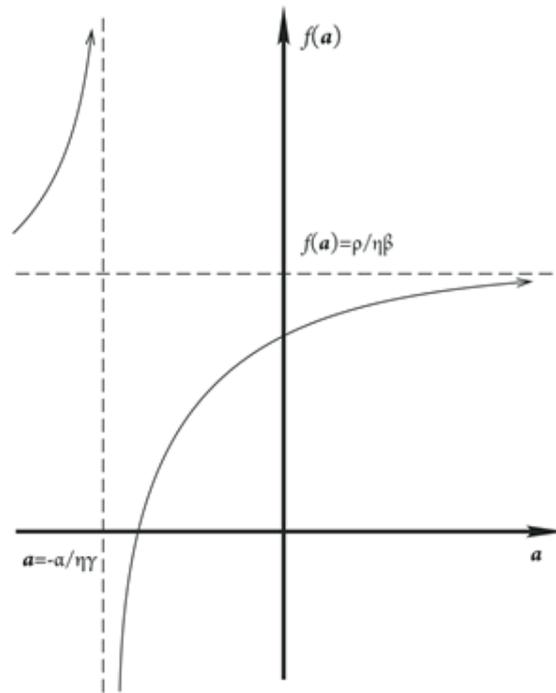


Рис. 3. График функции $f(a)$

если только X_0 принадлежит этому подмножеству.

Другими словами, за конечный промежуток времени траектория системы попадает в достаточно малую окрестность плоскости $N = 0$. Но на этой плоскости нет решений, которые уходят в бесконечность. Поэтому теорема о непрерывной зависимости от начальных данных [12] гарантирует, что траектория на этом подмножестве также не может уйти в бесконечность. Следовательно, если предположить существование такой траектории, то она должна через плоскость $A = \beta/\gamma$ попасть в G_1 .

Третий этап. Рассуждения предыдущих этапов позволяют сделать вывод, что если в множестве G найдется траектория, которая уходит в бесконечность, то она должна бесконечное число раз пересекать плоскость $A = \beta/\gamma$. Допустим, что такая траектория существует. Заметим при этом, что пересечение плоскости $A = \beta/\gamma$ в сторону убывания $A(t)$, в силу выражения (18), происходит при

$$N > \frac{\rho C}{\eta\beta} - \frac{\lambda}{\eta\gamma},$$

(так как прямая

$$N = \frac{\rho C}{\eta\beta} - \frac{\lambda}{\eta\gamma}$$

есть пересечение поверхности (18) с

плоскостью $A = \beta/\gamma$ (см. рис. 2)) и при $N < \mathbf{p}(C - C_*)$. Поскольку $\mathbf{p} < \rho/\eta\beta$, прямые

$$N = \frac{\rho C}{\eta\beta} - \frac{\lambda}{\eta\gamma}, N = \mathbf{p}(C - C_*)$$

имеют пересечение в конечной точке плоскости $A = \beta/\gamma$. При этом в множестве G образуется предкомпактный сегмент

$$S = \left\{ (C, A, N) \in G : A = \frac{\beta}{\lambda}, \frac{\rho C}{\eta\beta} - \frac{\lambda}{\eta\gamma} < N < \mathbf{p}(C - C_*) \right\}.$$

Составим из таких точек пересечения траектории плоскости $A = \beta/\gamma$ последовательность $\{x_k\}$, из которой выделим сходящуюся подпоследовательность. Обозначим ее предел как x^* . Тогда из точки x^* траектория попадает в подмножество G_1 , где $A < \beta/\gamma$, откуда, согласно доказанному на первом этапе, пересекает плоскость $A = \beta/\gamma$ уже в сторону возрастания $A(t)$ в конечной точке.

В итоге возникло противоречие с предположением о том, что траектория уходит в бесконечность. Следовательно, все траектории исследуемой системы ограничены в множестве G .

Утверждение 6 доказано.

Теорема 3. Если для системы (10), (11) в



пространстве параметров Ω_2 выполняется условие (19), то множество G , определенное выражением (20), является оценкой области притяжения асимптотически устойчивого стационарного решения X_{2st} .

Доказательство. Зададим на множестве G (напомним, что оно инвариантно согласно утверждению 5) функцию Ляпунова:

$$V(X, t) = \gamma AN - \beta N - \gamma \int_0^t \dot{A} N d\tau.$$

Ее производная, в силу системы (10), (11), имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \dot{V}(X, t) &= \gamma \dot{N} A + \gamma \dot{A} N - \beta \dot{N} - \gamma \dot{A} N = \\ &= \dot{N}(\gamma A - \beta) = -(\beta - \gamma A)^2 N \leq 0. \end{aligned}$$

Докажем ограниченность функции $V(X, t)$ снизу. Ввиду ограниченности траекторий системы на множестве G , слагаемое $\gamma AN - \beta N$ ограничено снизу. На множестве, где $A < 0$, последнее слагаемое функции $V(X, t)$ является положительным. На множестве, где $A > 0$, указанное слагаемое можно оценить таким образом:

$$\begin{aligned} -\gamma \int_0^t \dot{A} N d\tau &\geq -\gamma \int_0^t \dot{A} N_{\max} d\tau = \\ &= -\gamma N_{\max} [A(t) - A(0)] \geq \\ &\geq -\gamma N_{\max} A_{\max} + \gamma N_{\max} A(0). \end{aligned}$$

Следовательно, функция $V(X, t)$ ограничена снизу. Очевидно, что и производная $\dot{V}(X, t)$ также будет ограничена снизу. Таким образом, согласно утверждению VIII.4.7, приведенному в работе [13], можно утверждать, что

$$V(X, t) \text{ при } t \rightarrow +\infty.$$

Это означает, что траектория системы стремится к своему ω -предельному множеству

$$M_0 \in M = \left\{ (C, A, N) \in G : A = \frac{\beta}{\lambda} \right\}.$$

По свойству ω -предельных множеств для автономных систем, M_0 инвариантно в силу системы (10), (11). Но на плоскости $A = \beta/\gamma M_0$ инвариантно только в том случае, если $M_0 = \{X_{2st}\}$. Следовательно,

$$X(t, X_0) \rightarrow X_{2st} \text{ при } t \rightarrow +\infty.$$

Таким образом, G — это оценка области

притяжения для X_{2st} .

Теорема 3 доказана.

Теорема 4. Пусть для системы (10), (11) в пространстве параметров Ω_2 выполняются условие (19) и соотношение

$$\rho\alpha - \mu\eta\gamma > \beta\eta\gamma. \quad (25)$$

Тогда все пространство

$$R^+ = \{(C, A, N) \in R^3 : C \geq 0, A \geq 0, N > 0\}$$

является частью области притяжения асимптотически устойчивого стационарного решения X_{2st} .

Доказательство. Покажем, что все траектории, имеющие начало в R^+ , попадают в множество G , откуда, согласно теореме 3, стремятся при $t \rightarrow +\infty$, к стационарному решению X_{2st} .

Правая часть уравнения для $C(t)$ системы (10) гарантирует попадание траектории с начальными данными из R^+ в инвариантное подпространство, где $C(t) \geq C_*$. Поэтому проведем исследование лишь в этом подпространстве. Разобьем его на два подмножества:

$$T_1 = \{(C, A, N) \in R^+ : C \geq C_*, A \geq A_{1st}\},$$

$$T_2 = \{(C, A, N) \in R^+ : C \geq C_*, 0 \leq A \leq A_{1st}\}.$$

Пусть точка траектории находится в $T_1 \setminus G$. Тогда для некоторого числа $q > 0$ эта точка, согласно соотношению (21), лежит на плоскости

$$N = p(C - C_*) + q.$$

С этой плоскости, следовательно, траектории попадают в множество G , либо в подмножество T_2 . Покажем теперь, что из T_2 все траектории попадают в область, где

$$N < \frac{\rho C}{\eta\beta} - \frac{\lambda}{\eta\gamma},$$

(см. рис. 2) и, следовательно, $\dot{A} > 0$.

Зададим в подмножестве T_2 функцию $V_{T_2} = A$ и исследуем знак ее производной, учитывая свойства системы (10) на поверхности $V_{T_2}(X) = 0$. Принимая во внимание выражение (18), имеем:

$$\begin{aligned} \dot{V}_{T_2} &= \dot{A} = \rho\dot{C} - \eta\gamma\dot{N}A = \\ &= \left(\frac{\rho C - \lambda A}{\eta\gamma} \right) (\rho\alpha - \mu\eta\gamma - \beta\eta\gamma + \eta\gamma^2 A) + \\ &\quad + \rho\mu C_* - \lambda\mu A. \end{aligned}$$

Если в подмножестве T_2 выполняется соотношение (25), то

$$\dot{V}_{T_2}(X) \Big|_{X:V_{T_2}(X)=0} > 0.$$

Если $V_{T_2}(X) < 0$ в некоторой части пространства T_2 , то исследование знака производной $\dot{V}_{T_2}(X)$ в силу системы (10) сводится к вычислению знака производной на поверхности $V_{T_2}(X) = 0$, так как

$$\begin{aligned} \dot{V}_{T_2}(X) \Big|_{X:V_{T_2}(X)=0} &= \ddot{A} = \rho \dot{C} - \lambda \dot{A} - \\ &- \eta \dot{N} A - \eta \dot{A} N \geq \\ &\geq \rho \dot{C} - \eta \dot{N} A = \dot{V}_{T_2}(X) \Big|_{X:V_{T_2}(X)=0} > 0. \end{aligned}$$

Это значит, что все траектории из T_2 падают в область, где $A > 0$, а, следовательно, и в область G , из которой стремятся к асимптотически устойчивому стационарному решению X_{2st} .

Теорема 4 доказана.

Интерпретация. В данном разделе получены соотношения для параметров системы, которые характеризуют готовность общества вместе с имеющейся концепцией принять новые положения. Поэтому любая новая идея, появившаяся в СМИ, находит отклик. Со временем старые и новые представления приходят к совместному сосуществованию со своими долями притяжения в обществе.

Заключение

Проведенное исследование позволяет сформулировать следующие основные итоги.

1. Выделены обобщенные факторы и закономерности продвижения новостной информации в обществе, на основании которых строится базовая математическая модель распространения новой информации. Полученная модель является системой четырех обыкновенных дифференциальных уравнений с квадратичной нелинейностью в правых частях.

2. С использованием методов качественного анализа изучены глобальные свойства фазового портрета построенной динамической системы.

3. Дана интерпретация основных результатов исследования, которая позволила выделить несколько возможных сценариев развития событий и влиять на них.

Результаты, изложенные в данной статье, авторы считают продолжением системного исследования, начало которому было положено в работе [14] и далее развито в работах [15 – 18]. Эта научно-исследовательская программа направлена на изучение медиасистемы как одной из самых актуальных и высокоскоростных динамических систем. Использование математических методов дает возможность проводить медиаисследования более глубоко и на новом научном уровне. А обращение к методам нелинейной динамики позволяет наиболее полно изучить структуру и свойства процессов в такой системе, как средства массовой информации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Погорельский Д.Е., Фесенко В.Ю., Филиппов К.В. Информационное общество. Политологический словарь-справочник. Ростов-на-Дону: Наука-Спектр, 2008. 320 с.
2. Информационное право: актуальные проблемы теории и практики. Под общ. ред. И.Л. Бачило. М.: Изд-во «Юрайт», 2009. 530 с.
3. Марущак А.В. Политико-социальный образ России в американском медиапространстве // Журналистский ежегодник. 2012. № 1. 2012. С. 93–96.
4. Понтрягин Л.С. Обыкновенные дифференциальные уравнения. М.: Наука, 1974. 332 с.
5. Еругин Н.П. Книга для чтения по общему курсу дифференциальных уравнений. Минск: Наука и техника, 1972. 664 с.
6. Чезаре Л. Асимптотическое поведение и устойчивость решений обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1964. 478 с.
7. Lakshmikantham V., Ladas G.E. Differential equations in abstract spaces. New-York: Academic Press, 1972. 231 p.
8. Четаев Н.Г. Устойчивость движения. М.: Наука, 1965. 234 с.
9. Баутин Н.Н., Леонтович Е.А. Методы и приемы качественного исследования динамических систем на плоскости. М.: Наука, 1990. 486 с.
10. Chang H.-D., Hirsch M.W., Wu F.F. Stability regions of nonlinear autonomous dynamical



systems // IEEE Trans. Automat. Contrl., 1988. Vol. 33. No. 1. Pp. 16–27.

11. **Барбашин Е.А., Табуева В.А.** Динамические системы с цилиндрическим фазовым пространством. М.: Наука, 1969. 387 с.

12. **Федорюк М.В.** Обыкновенные дифференциальные уравнения. М.: Наука, 1985. 448 с.

13. **Руш Н., Абетс П., Лалуа М.** Прямой метод Ляпунова в теории устойчивости. М.: Мир, 1980. 300 с.

14. **Суходолов А.П., Рачков М.П.** К созданию теории средств массовой информации: постановка задачи // Вопросы теории и практики журналистики. 2016. Т. 5. № 1. С. 6–13.

15. **Баенхаева А.В., Тимофеев С.В.** Эволюционный подход к развитию средств массовой информации: построение матема-

тической модели // Известия Байкальского государственного университета. 2016. Т. 26. № 5. С. 825–833.

16. **Суходолов А.П., Кузнецова И.А., Тимофеев С.В.** Анализ подходов в моделировании средств массовой информации // Вопросы теории и практики журналистики. 2017. Т. 6. № 3. С. 287–305.

17. **Суходолов А.П., Тимофеев С.В.** СМИ и виртуальная реальность: новые возможности и перспективы // Вопросы теории и практики журналистики. 2018. Т. 7. № 4. С. 567–580.

18. **Суходолов А.П., Анохов И.В., Маренко В.А.** Информационное импульсно-волновое взаимодействие СМИ и общества // Вопросы теории и практики журналистики. 2019. Т. 8. № 1. С. 5–19.

Статья поступила в редакцию 14.06.2019, принята к публикации 22.07.2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ТИМОФЕЕВ Сергей Викторович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики и статистики Байкальского государственного университета, г. Иркутск, Российская Федерация.

664003, Российская Федерация, г. Иркутск, ул. Ленина, 11
timofeevsv12@gmail.com

СУХОДОЛОВ Александр Петрович – доктор экономических наук, проректор по научной работе Байкальского государственного университета, г. Иркутск, Российская Федерация.

664003, Российская Федерация, г. Иркутск, ул. Ленина, 11
science@bgu.ru

REFERENCES

1. **Pogoreliy D.E., Fesenko V.Yu., Filippov K.V.**, Informationsnoye obshchestvo. Politologicheskiy slovar-spravochnik [Society of information. Reference book]. Nauka-Spektr, Rostov-on-Don, 2008.

2. Informationsnoye pravo: aktualnyye problemy teorii i praktiki [Information right: current problems of theory and practice], Ed. I.L. Bachilo, YouRight Publishing, Moscow, 2009.

3. **Marushchak A.V.**, Politiko-sotsialnyy obraz Rossii v amerikanskom mediaprostranstve [Political and social image of Russia in the American media space], Zhurnalistskiy yezhegodnik [Journalistic Year-Book]. (1) (2012) 93–96.

4. **Pontryagin L.S.**, Obyknovennyye differentsialnyye uravneniya [Ordinary differential equations], Nauka, Moscow, 1974.

5. **Erugin N.P.**, Kniga dlya chteniya po obshchemu kursu differentsialnykh uravneniy

[The book for reading on the general course of differential equations], Nauka i Tekhnika, Minsk, 1972.

6. **Cesari L.**, Asymptotic behavior and stability problems in ordinary differential equations, Inbunden Engelska, 1971.

7. **Ladas G.E., Lakshmikantham V.**, Differential equations in abstract spaces, Academic Press, New York, 1972.

8. **Chetayev N.G.**, Ustoychivost dvizheniya [Motion stability], Nauka, Moscow, 1965.

9. **Bautin N.N., Leontovich E.A.**, Metody i priyemy kachestvennogo issledovaniya dinamicheskikh sistem na ploskosti [Methods and technique of qualitative study of dynamical systems on the plane], Nauka, Moscow, 1990.

10. **Chang H.-D., Hirsch M.W., Wu F.F.**, Stability regions of nonlinear autonomous dynamical systems, IEEE Trans. Automat. Contrl. 33 (1) (1988) 16–27.

11. **Barbashin E.A., Tabuyeva V.A.**, Dinamicheskiye sistemy s tsilindricheskim fazovym prostranstvom [Dynamical systems with cylindrical phase space]. M.: Nauka, Moscow, 1969.
12. **Fedoryuk M.V.**, Obyknoennyye differentsialnyye uravneniya [Ordinary differential equations], Nauka, Moscow, 1985.
13. **Rouche N., Habets P., Laloy N.**, Stability theory by Liapunov's direct method, Springer-Verlag 1977.
14. **Sukhodolov A.P., Rachkov M.P.**, To create a theory of the media: statement of the problem, Theoretical and Practical Issues of Journalism. 5 (1) (2016) 6–13.
15. **Bayenkhayeva A.V., Timofeev S.V.**, The evolutionary approach to development of mass media: construction of a mathematical model, Izvestiya Baykalskogo Gosudarstvennogo Universiteta [News of Baikal State University]. 26 (5) (2016) 825–833.
16. **Sukhodolov A.P., Kuznetsova I.A., Timofeev S.V.**, The analysis of approaches in modelling of mass media, Theoretical and Practical Issues of Journalism. 6 (3) (2017) 287–305.
17. **Sukhodolov A.P., Timofeev S.V.**, Mass media and virtual reality: new opportunities and prospects, Theoretical and Practical Issues of Journalism. 7 (4) (2018) 567–580.
18. **Sukhodolov A.P., Anokhov I.V., Marenko V.A.**, Information impulse-wave interaction between the media and society, Theoretical and Practical Issues of Journalism. 8 (1) (2019) 5–19.

Received 14.06.2019, accepted 22.07.2019.

THE AUTHORS

TIMOFEEV Sergey V.

Baikal State University

11, Lenin St., Irkutsk, 664003, Russian Federation

timofeevsv12@gmail.com

SUKHODOLOV Alexander P.

Baikal State University

11, Lenin St, Irkutsk, 664003, Russian Federation

science@bgu.ru

DOI: 10.18721/JPM.12413
УДК 532.529:532.59:534.2

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УДАРНОЙ ВОЛНЫ СО СЛОЕМ ПРОНИЦАЕМОГО МАТЕРИАЛА

С.В. Булович¹, А.В. Масюкевич²

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург,
Российская Федерация

В работе экспериментально исследовано взаимодействие ударной волны с гранулированным слоем сферических частиц в атмосферной ударной трубе. Между пористым слоем и торцевой стенкой трубы располагалась приторцевая область чистого газа. Были рассмотрены две постановки задачи. В первом варианте структура и положение пористого слоя предполагались неизменными. Во втором – гранулированный слой разрушался под действием падающей ударной волны и превращался в подвижное облако частиц. Для обоих вариантов получены и проанализированы волновые структуры, которые возникают как перед пористым слоем гранулированных частиц, так и в приторцевой области между гранулированным слоем и торцевой стенкой ударной трубы. Исходная информация была получена при помощи измерительно-регистрирующей аппаратуры, которая включала пьезоэлектрические датчики давления и многоканальную плату АЦП для сбора информации.

Ключевые слова: ударная волна, проницаемый слой материала, нестационарная фильтрация газа, волновая структура

Ссылка при цитировании: Булович С.В., Масюкевич А.В. Экспериментальное исследование взаимодействия ударной волны со слоем проницаемого материала // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 135–144. DOI: 10.18721/JPM.12413

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

THE INTERACTION OF A SHOCK WAVE WITH A PERMEABLE LAYER: AN EXPERIMENTAL STUDY

S.V. Bulovich¹, A.V. Masiukevich²

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation;

²The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russian Federation

In the paper, the interaction of a shock wave with a granular layer of spherical particles has been experimentally studied in an atmospheric shock tube. A near-edge space of pure gas was located between the porous layer and the tube's end wall. Two problem statements were considered. In the first embodiment, the structure and position of the porous layer remained unchanged. In the second one, the granular layer was destroyed under the action of the incident shock wave and turned into a mobile cloud of particles. For both variants, wave structures

that occurred both in front of the porous layer of granular particles and in the gap between the granular layer and the end wall of the shock tube were derived and analyzed. The initial information was obtained by measuring and recording equipment, which included piezoelectric pressure sensors and a multichannel ADC board for data collection.

Keywords: shock wave, permeable material layer, nonstationary gas filtration, wave structure

Citation: Bulovich S.V., Masiukevich A.V., The interaction of a shock wave with a permeable layer: an experimental study, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (4) (2019) 135–144. DOI: 10.18721/JPM.12413

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

Введение

При рассмотрении нестационарных процессов в виде ударных волн или импульсных струй одним из важных прикладных аспектов является определение аэродинамических нагрузок на поверхность. Сложность задачи возрастает многократно при допущении о газопроницаемости преграды. Последняя может представлять собой перфорированные элементы, решетки, пакеты из плетеных сеток, губчатые структуры, слои гранулированных сред и т. п. При распространении волн через подобные преграды, как правило, уменьшается их амплитуда и происходит трансформация волновых профилей. При интенсивных воздействиях преграда может испытывать деформации, в том числе и необратимые. Интерес исследователей к каркасным преградам, допускающим значительные деформации, обусловлен тем, что при определенных обстоятельствах усиливается эффект динамического воздействия на преграду [1, 2]. Не менее важен и предельный случай, когда, например, при использовании сыпучих сред происходит разрушение конструкции пористого слоя и возникает двухфазное течение [3, 4].

Для такого типа задач важна первичная информация, получаемая в ходе экспериментальных исследований. Она позволяет охарактеризовать основной круг явлений и обнаружить важные закономерности. На основе экспериментальных данных возможно уточнение существующих и построение новых математических моделей, обладающих различной полнотой описания процессов.

Многофакторное изучение нестационарной фильтрации началось в 50-е годы XX века и достаточно полно систематизировано, например в монографии [5]. Для разрушаемых каркасов узловые вопросы механики гетерогенных сред представлены в трудах [6, 7]. Обратим внимание на

экспериментальные работы, пополняющие банк данных по гранулированным течениям. В частности, обобщение экспериментальных исследований в работах [8, 9] привело к модификации модели, основанной на силе Стокса. Адекватный учет влияния сжимаемости среды и общего нестационарного характера протекания рассматриваемого явления выполнено в работе [10].

Репрезентативными признаны работы [3, 4], в которых проведено исследование в широком диапазоне изменения геометрических факторов и режимных параметров течения. Работы [11, 12] послужили основой для создания законов, описывающих прохождение ударных волн через слои из «густой смеси» и учитывающих тот или иной механизм столкновения частиц [13 – 15]. В дополнение к изложенному, обратим внимание на работы [16, 17], где при помощи датчиков, расположенных непосредственно в пористом слое, изучалось изменение давления как отдельно газа, так и давление в смеси газ – частицы. Показано, что амплитуда давления проходящей волны зависит от ряда параметров, передающих различные свойства пористого слоя: протяженность (глубина), диаметр и форма элементов, теплофизические характеристики материала (плотность, теплоемкость и т. п.), возможность уплотнения и переупорядочивания элементов структуры.

Фокус современных исследований в этой сфере смещен в область численного моделирования [18, 19]. Его развитие ведется в двух направлениях. С одной стороны, уточняется полнота описания и детализация рассматриваемых процессов, с другой – создаются новые и совершенствуются существующие алгоритмы численного интегрирования дифференциальных уравнений для рассматриваемого круга задач.

Из краткого анализа литературы по за-



тронутой тематике можно сделать вывод об отсутствии работ по прямому сравнению режимов течения для удерживаемого и разрушаемого пористых слоев в идентичных условиях. Отсутствуют работы по исследованию влияния расположения пористых слоев (удерживаемого и разрушаемого) относительно непроницаемой поверхности на мгновенные и интегральные характеристики ослабления динамического воздействия на нее.

Предметом настоящего исследования является взаимодействие ударной волны со слоем сыпучего (гранулированного) материала в двух постановках задачи.

В первом варианте слой остается неподвижным и сохраняется каркасная структура пористого слоя; во втором варианте, при разрушении структуры пористого слоя, происходит формирование подвижного облака частиц. В последнем (втором) случае определенную роль играет размер области, свободной от гранул между пористым слоем и непроницаемой стенкой; ее величина может оказывать разнонаправленное влияние на интегральные характеристики [1]. При этом важным фактором становится импульс, сообщаемый облаку частиц, и последующее ударно-волновое взаимодействие этого облака с «газовой подушкой», которая существует в виде области с чистым газом.

Экспериментальный стенд и метод исследования

Эксперименты проводились в атмосферной ударной трубе диаметром 55 мм, расположенной горизонтально. Отличительной особенностью этой трубы является исходный уровень давления воздуха в камере высокого давления, который совпадает с давлением окружающей среды. Схема ударной трубы, расположение отверстий под датчики давления, приведены на рис. 1 (линейные размеры в миллиметрах). Для

контроля однородности в окружном направлении рассматриваемых процессов и получаемых результатов датчики давления G1 и G2 были расположены в одном и том же сечении трубы, один напротив другого.

В эксперименте были использованы электрические пьезодатчики давления с постоянной времени 10^{-4} с. Сигнал с датчиков усиливался с помощью катодных повторителей и поступал на плату АЦП, которая работала в режиме мультиплексора с частотой дискретизации 100 кГц на канал. Для обеспечения во всех опытах одного и того же режима течения газа в ударной трубе, из камеры низкого давления (LPC – low pressure chamber) откачивался воздух до значения давления, ниже атмосферного в 10 раз. Диафрагма, отделяющая камеру высокого давления (HPC – high pressure chamber) от вакуумируемой части ударной трубы, разрушалась механическим пробойником. Для выбранного отношения давлений в камерах ударной трубы число Маха ударной волны имело значение, равное 1,7.

Для создания пористого слоя использовались частицы полиуретана правильной сферической формы. Плотность материала составляла 200 кг/м^3 . Размер частиц не был унифицирован и лежал в диапазоне от 2 до 3 мм. Толщина гранулированного слоя равнялась 30 мм. Для рассматриваемой серии экспериментов в ударной трубе гранулированный слой располагался на равном удалении от датчиков G3 и G4.

Для расположения и удержания сыпучего материала в горизонтально расположенной установке, были разработаны контейнеры различного типа, в зависимости от нужного функционала. Для создания неразрушаемого гранулированного слоя, удерживающий его контейнер состоял из тонкостенной металлической опоры цилиндрической формы и двух сеток, закрывающих ее торцевые части. Для создания разрушаемого гранулированного слоя, одна из сеток заменялась

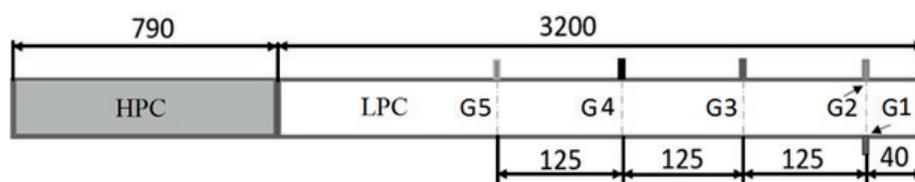


Рис. 1. Схема экспериментальной ударной трубы:

G1 – G5 – датчики давления; HPC, LPC – камеры высокого и низкого давления соответственно; линейные размеры даны в мм

папиросной бумагой, которая легко разрушалась под действием ударной волны. Продольный размер контейнера составлял 30 мм. Сетка была выполнена из текстильной ткани и имела размер ячеек примерно $0,5 \times 0,5$ мм. Влияние сетки и папиросной бумаги на волновую структуру исследовалось отдельно. Были проведены опыты в «пустой» трубе и в трубе с пустыми контейнерами, без гранулированного слоя. Установлено, что влияние контейнера с двумя сетками не превышает 15 %, что является малым возмущением при условии их использования для удержания гранулированных материалов (см. раздел ниже).

Следует отметить, что приводимые ниже иллюстрации, относящиеся к «пустой» трубе, трубе с пустым контейнером и различные варианты с гранулированным слоем отражают не среднее значение по серии

экспериментов, а один из вариантов первичной информации от сигналов, полученных с датчиков G1 – G5. При этом в каждой серии экспериментов регистрировалась полная воспроизводимость наблюдаемых закономерностей и получена необходимая повторяемость результатов.

Эксперименты без гранулированного слоя

Здесь и далее на графиках иллюстраций все давления представлены в относительных величинах. В качестве числа для нормирования функции было выбрано значение начального уровня давления в камере низкого давления. Отсчет времени начинался с момента порогового отклонения сигнала в датчике G5 от его начального уровня, т. е. при регистрации датчиком падающей ударной волны.

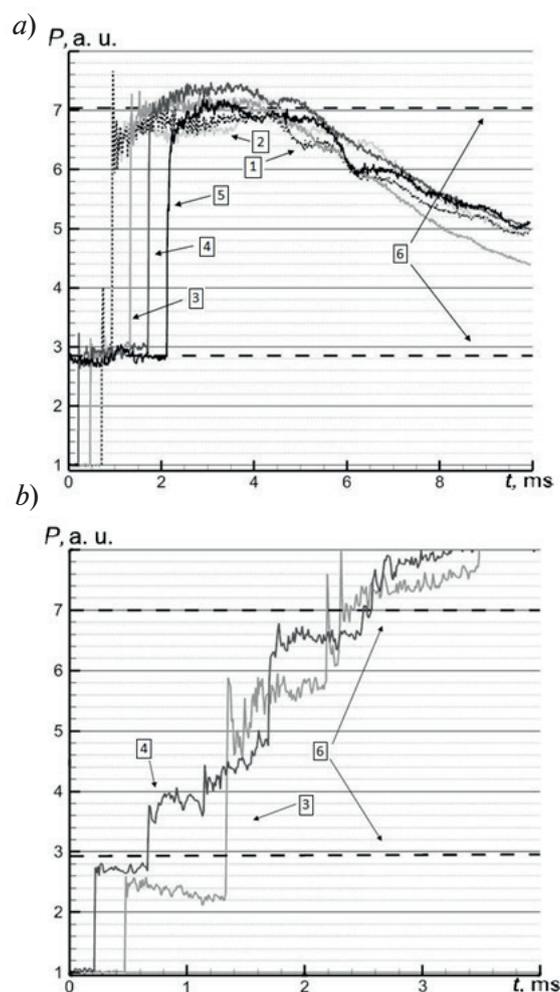


Рис. 2. Графики изменения давления во времени в точках мониторинга в ударной трубе низкого давления без контейнера (а) и в той же трубе с помещенным в нее пустым контейнером (б): 1 – 5 – номера датчиков, 6 – аналитические решения



На рис. 2,а представлены изменения давления во времени для датчиков G1 – G5 в «пустой» камере низкого давления без контейнера и гранулированного слоя. За рассматриваемый интервал времени каждый из датчиков регистрирует две ударные волны: волну сжатия и волну разрежения. В частности, два скачкообразных изменения давления на уровень 30 кПа и далее на уровень 70 кПа соответствуют регистрации падающей ударной волны и ударной волны, отраженной от торца камеры низкого давления. Наблюдаемое снижение давления, начиная с четвертой миллисекунды, соответствует регистрации волны разрежения. Предшествующее ей плавное повышение давления выше уровня 70 кПа соответствует волне сжатия, которая возникла при взаимодействии отраженной ударной волны с фрагментами контактной поверхности.

Использование термина «контактная поверхность» требует разъяснения. В рамках упрощенного описания структуры течения газа в ударной трубе, контактную поверхность представляют в виде плоскости, которая разделяет газы высокого и низкого давления в начальный и последующие моменты времени. Однако при поступлении воздуха в камеру низкого давления конечные скорости разрушения диафрагмы приводят к возникновению интенсивного течения газа как в осевом, так и радиальном направлениях. Это вызывает не только искривление фронта, где наблюдается скачок плотности и температуры, но и частичное перемешивание воздуха из разных камер ударной трубы. В этой ситуации взаимодействие отраженной ударной волны происходит фактически с областью из фрагментов контактной поверхности.

Давление газа за падающей и отраженной ударными волнами (показания датчиков G1 – G5) хорошо согласуется с давлением, которое было рассчитано при помощи аналитической зависимости. Вычисления были проведены на основании элементарной теории ударной трубы, опирающейся на решение задачи Римана о распаде произвольного разрыва [20]. Заметим, что для данной постановки задачи, когда течение газа априорно обладает свойствами осевой симметрии, расхождение показаний датчиков G1 и G2 демонстрирует уровень погрешности единичного измерения.

На рис. 2,б представлены изменения давления во времени для датчиков G3 и G4

при установке в трубу пустого контейнера. Интерпретация этих результатов вызывает некоторые затруднения, поскольку волновая структура формируется не только от взаимодействия ударной волны с торцом камеры низкого давления и контактной поверхностью, но и от влияния двух сеток, порождающих многократные отражения волн внутри пустого контейнера. Однако по-прежнему можно идентифицировать уровень давления в падающей ударной волне и в волне, отраженной от торца LPC. В качестве реперных значений выступают соответствующие уровни давления в «пустой» трубе. Об ослаблении падающей волны, вызванном конструктивными элементами контейнера, можно судить по данным на первой миллисекунде; из сопоставления значений функций ко второй миллисекунде, когда датчики G3 и G4 регистрируют отраженную от торца камеры низкого давления ударную волну, влияние двух сеток на давление можно определить величиной, не превышающей 15 % от измеряемой величины.

Эксперименты с неподвижным гранулированным слоем

На рис. 3 представлены изменения давления во времени для датчиков G3 и G4, расположенных по разные стороны гранулированного слоя, остающегося неподвижным в процессе данного эксперимента. Для датчика G4 первый подъем давления до уровня 30 кПа соответствует падающей ударной волне. При взаимодействии с гранулированным слоем возникают отраженная и проходящая ударные волны. По сравнению с вариантом отражения от торца трубы, амплитуда отраженной ударной волны от поверхности гранулированного слоя ниже и регистрируется датчиком G4 на уровне 60 – 65 кПа. Как и в трубе без гранулированного слоя, отраженная ударная волна взаимодействует с элементами контактной поверхности. Для рассматриваемого положения гранулированного слоя возникает многократное отражение волны сжатия как от контактной поверхности, так и от поверхности гранулированного слоя, что приводит к повышению давления до более высокого уровня (80 кПа). Последующее снижение значения давления на датчике G4 вызвано прохождением волны разрежения.

Датчик G3 расположен в области между

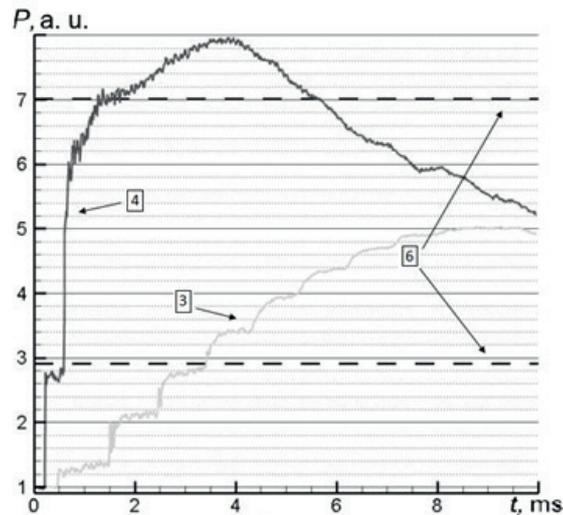


Рис. 3. Графики изменения давления во времени на датчиках G3 и G4 для варианта с неразрушаемым гранулированным слоем:
3, 4 – номера датчиков, 6 – аналитическое решение

пористым слоем и торцом камеры низкого давления. По показаниям датчика G3 можно судить об образовании волновой структуры в виде бегущей волны с многократным отражением как от поверхности гранулированного слоя, так и торца камеры низкого давления. Об этом свидетельствует ступенчатая структура зависимости давления от времени. С течением времени интенсивность ударной волны затухает. Рост давления связан с непрерывным поступлением газа в приторцевую область через гранулированный слой. Механизм поступления газа основан на явлении фильтрации, т. е. массовый расход газа есть функция от

перепада давления на толщине гранулированного слоя. При выравнивании давлений по разные стороны гранулированного слоя и последующей инверсии градиента давления, возникает «обратная фильтрация газа», т. е. газ в гранулированном слое меняет направление течения и движется в сторону от торца камеры низкого давления.

Эксперименты с разрушаемым гранулированным слоем

На рис. 4 представлены изменения давления во времени для датчиков G3 и G4, расположенных в начальный момент по разные стороны от гранулированного слоя.

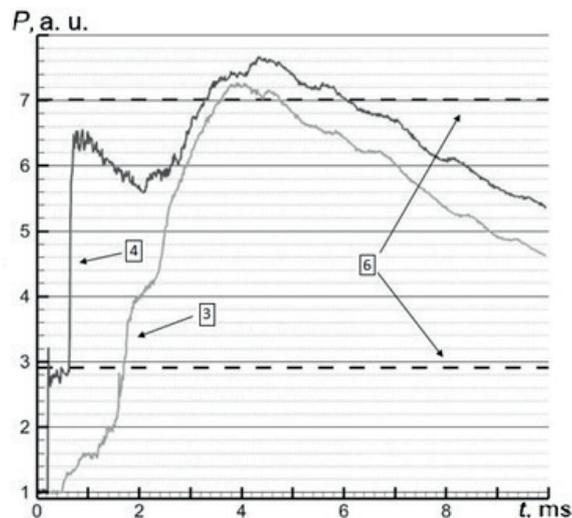


Рис. 4. График изменения давления во времени на датчиках G3 и G4 для варианта с разрушаемым гранулированным слоем:
3, 4 – номера датчиков, 6 – аналитическое решение



Укажем на важные аспекты, которые разъясняют поведение кривых, приведенных на этом рисунке. В результате взаимодействия с падающей ударной волной гранулированный слой разрушается и превращается в облако частиц. Можно выделить две стадии разгона частиц в облаке:

«мгновенную», связанную с фронтом ударной волны, когда частица получает импульс за счет прохождения ударной волны мимо частицы сферической формы;

«медленную», которая связана с разной скоростью движения частицы и окружающей среды, т. е. в первую очередь с силой Стокса.

Скорость движения границ подвижного пористого слоя различна, т. е. облако не только смещается в сторону торца камеры низкого давления, но и увеличивается в размерах. В результате увеличения размеров облака проницаемость подвижного пористого слоя увеличивается. До тех пор, пока облако существенно не увеличилось в размерах от границ пористого слоя, по-прежнему возможно отражение ударных волн или волн разрежения.

Датчик G4, находящийся перед гранулированным слоем, регистрирует несколько процессов. На начальных стадиях сценарий с регистрацией датчиком G4 падающей и отраженной ударных волн полностью совпадает со случаем неразрушаемого гранулированного слоя. В следующие моменты времени датчик G4 регистрирует волну разрежения. Интенсивность волны разрежения обусловлена двумя процессами.

Во-первых, происходит увеличение массы газа, проходящей через гранулированный слой. Во-вторых, смещение границы пористого слоя порождает волну разрежения как за движущимся поршнем.

По показаниям датчика G3 можно судить о закономерностях изменения давления в приторцевой области. Для варианта с разрушением гранулированного слоя этот процесс происходит более интенсивно. Во-первых, за счет увеличения проницаемости гранулированного слоя, большее количество газа поступает в приторцевую область. Во-вторых, сам размер приторцевой области с чистым газом уменьшается из-за смещения облака частиц. В данном случае граница пористого слоя действует как вдвигаемый в область поршень. После второй миллисекунды на графике зависимости давления от времени наблюдается пологий линейный участок. В этот момент времени датчик G3 находится в облаке частиц, т. е. в области двухфазного течения. После двух с половиной миллисекунд оба датчика — G3 и G4 находятся по одну сторону от облака частиц и их показания выравниваются.

На рис. 5 для двух рассмотренных вариантов гранулированного слоя представлено изменение давления во времени на датчике G2, как наиболее близко расположенного к торцевой поверхности трубы.

Обратим внимание на наблюдаемые волновые закономерности. Как следует из поведения функций, в первые моменты вре-

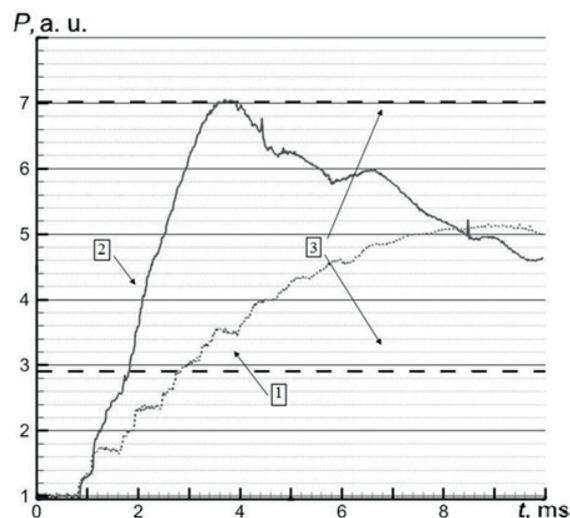


Рис. 5. График изменения давления во времени на датчике G2 для обоих вариантов гранулированного слоя:

1, 2 — неразрушаемый и разрушаемый слои, соответственно; 3 — аналитическое решение

мени давление в приторцевой области растёт по одной и той же закономерности. Это свидетельствует о том, что до тех пор, пока гранулы не обрели определенного уровня скорости, законы фильтрации для удерживаемого и разрушаемого гранулированного слоев мало различимы. Последующее расхождение в поведении давления на торце трубы, как отмечалось выше, связано с тем, что для разрушаемого гранулированного слоя, помимо увеличения давления за счет процесса нестационарной фильтрации, газ в приторцевой области испытывает сжатие облаком частиц. Если переходить к интегральным оценкам, то в обоих случаях, по сравнению с «пустой» трубой, наблюдается уменьшение импульса воздействия на торцевую поверхность ударной трубы, а в случае неразрушаемого гранулированного слоя

– и снижение абсолютного уровня давления.

Заключение

В работе выполнены эксперименты по исследованию взаимодействия ударной волны с гранулированным слоем. Установлены закономерности нестационарной фильтрации газа через разрушаемые и сохраняющие свою структуру гранулированные слои. Получены зависимости динамического воздействия проходящей ударной волны на непроницаемую поверхность для двух рассмотренных вариантов пористого слоя.

Работа выполнялась в рамках проекта 3.3314.2017/4.6 государственного задания Министерства образования и науки РФ на период 2017 – 2019 гг.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Kitagawa K., Takayama K.** Attenuation of shock waves propagating in polyurethane foams // *Shock Waves*. 2006. Vol. 15. No. 6. Pp. 437–445.
2. **Seitz W.M., Skews B.W.** Effect of compressible foam properties on pressure amplification during shock wave impact // *Shock Waves*. 2006. Vol. 15. No. 3–4. Pp. 177–197.
3. **Boiko V.M., Kiselev V.P., Kiselev S.P., Papyrin A.N., Poplavsky S.V., Fomin V.M.** Shock wave interaction with a cloud of particles // *Shock Waves*. 1997. Vol. 7. No. 5. Pp. 275–285.
4. **Rogue X., Rodriguez G., Haas J.F., Saurel R.** Experimental and numerical investigation of the shock-induced fluidization of a particles bed // *Shock Waves*. 1998. Vol. 8. No. 1. Pp. 29–45.
5. **Баренблатт Г.И., Ентов В.М., Рыжик В.М.** Теория нестационарной фильтрации жидкости и газа. М.: «Недра», 1972. 288 с.
6. **Нигматулин Р.И.** Динамика многофазных сред. Ч. I. М.: Наука, 1987. 464 с.
7. **Нигматулин Р.И.** Динамика многофазных сред. Ч. II. М.: Наука, 1987. 360 с.
8. **Britan A., Elperin T., Igra O., Jiang J.P.** Acceleration of a sphere behind planar shock waves // *Experiments in Fluids*. 1995. Vol. 20. No. 2. Pp. 84–90.
9. **Sun M., Saito T., Takayama K., Tanno H.** Unsteady drag on a sphere by shock wave loading // *Shock Waves*. 2004. Vol. 14. No. 1–2. Pp. 3–9.
10. **Parmar M., Haselbacher A., Balachandar S.** Modeling of the unsteady force for shock-particle interaction // *Shock Waves*. 2009. Vol. 19. No. 4. Pp. 317–329.
11. **Wagner J.L., Beresh S.J., Kearney S.P., Trott W.M., Castaneda J.N., Pruett B.O., Baer M.R.** A multiphase shock tube for shock wave interactions with dense particle fields // *Experiments in Fluids*. 2012. Vol. 52. No. 6. Pp. 1507–1515.
12. **Ling Y., Wagner J.L., Beresh S.J., Kearney S.P., Balachandar S.** Interaction of a planar shock wave with a dense particle curtain: Modeling and experiments // *Physics of Fluids*. 2012. Vol. 24. No. 1. P. 113301.
13. **Regele J.D., Rabinovitch J., Colonius T., Blanquart G.** Unsteady effects in dense, high speed, particle laden flows // *International Journal of Multiphase Flow*. 2014. Vol. 61. May. Pp. 1–13.
14. **Liu H., Guo Y., Lin W.** Simulation of shock-powder interaction using kinetic theory of granular flow // *Powder Technology*. 2015. Vol. 273. March. Pp. 133–144.
15. **Houim R.W., Oran E.S.** A multiphase model for compressible granular-gaseous flows: Formulation and initial tests // *J. Fluid Mech.* 2016. Vol. 789. 25 February. Pp. 166–220.
16. **Ben-Dor G., Britan A., Elperin T., Igra O., Jiang J.P.** Experimental investigation of the interaction between weak shock waves and granular layers // *Experiments in Fluids*. 1997. Vol. 22. No. 6. Pp. 432–443.
17. **Ben-Dor G., Britan A., Elperin T., Igra O., Jiang J.P.** Mechanism of compressive stress formation during weak shock waves impact with granular materials // *Experiments in Fluids*. 1997. Vol. 22. No. 6. Pp. 507–518.

18. **Zhu F., Chou C.C., Yang K.H.** Shock enhancement effect of lightweight composite structures and materials // Composites. Part B: Engineering. 2011. Vol. 42. No. 5. Pp. 1202–1211.

19. **Уткин П.С.** Некоторые вычислительные аспекты моделирования взаимодействия

ударной волны с облаком частиц в рамках двухжидкостной модели // Горение и взрыв. 2017. Т. 10. № 3. С. 53–57.

20. **Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П.** Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976. 400 с.

Статья поступила в редакцию 17.09.2019, принята к публикации 05.11.2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БУЛОВИЧ Сергей Валерьевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Гидроаэродинамика, горение и теплообмен» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
bulovic@yandex.ru

МАСЮКЕВИЧ Алексей Владимирович – инженер Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
79313165906@yandex.ru

REFERENCES

1. **Kitagawa K., Takayama K.**, Attenuation of shock waves propagating in polyurethane foams, Shock Waves. 15 (6) (2006) 437–445.

2. **Seitz W.M., Skews B.W.**, Effect of compressible foam properties on pressure amplification during shock wave impact, Shock Waves. 15 (3–4) (2006) 177–197.

3. **Boiko V.M., Kiselev V.P., Kiselev S.P., et al.**, Shock wave interaction with a cloud of particles, Shock Waves. 7 (5) (1997) 275–285.

4. **Rogue X., Rodriguez G., Haas J.F., Saurel R.**, Experimental and numerical investigation of the shock-induced fluidization of a particles bed, Shock Waves. 8 (1) (1998) 29–45.

5. **Barenblatt G.I., Entov V.M., Ryzhik V.M.**, Theory of nonstationary flow of liquids and gases in porous media [in Russian], Nedra, Moscow, 1972.

6. **Nigmatulin R.I.**, Dynamics of multiphase media, Vol. 1, Hemisphere, New York, 1990.

7. **Nigmatulin R.I.**, Dynamics of multiphase media, Vol. 2, Hemisphere, New York, 1990.

8. **Britan A., Elperin T., Igra O., Jiang J.P.**, Acceleration of a sphere behind planar shock waves, Experiments in Fluids. 20 (2) (1995) 84–90.

9. **Sun M., Saito T., Takayama K., Tanno H.**, Unsteady drag on a sphere by shock wave loading, Shock Waves. 14 (1–2) (2004) 3–9.

10. **Parmar M., Haselbacher A., Balachandar S.**, Modeling of the unsteady force for shock-

particle interaction, Shock Waves. 19 (4) (2009) 317–329.

11. **Wagner J.L., Beresh S.J., Kearney S.P., et al.**, A multiphase shock tube for shock wave interactions with dense particle fields, Experiments in Fluids. 52 (6) (2012) 1507–1515.

12. **Ling Y., Wagner J.L., Beresh S.J., et al.**, Interaction of a planar shock wave with a dense particle curtain: Modeling and experiments, Physics of Fluids. 24 (1) (2012) 113301.

13. **Regele J.D., Rabinovitch J., Colonius T., Blanquart G.**, Unsteady effects in dense, high speed, particle laden flows, International Journal of Multiphase Flow. 61 (May) (2014) 1–13.

14. **Liu H., Guo Y., Lin W.**, Simulation of shock-powder interaction using kinetic theory of granular flow, Powder Technology. 273 (March) (2015) 133–144.

15. **Houim R.W., Oran E.S.**, A multiphase model for compressible granular-gaseous flows: Formulation and initial tests, J. Fluid Mech. 789 (25 February) (2016) 166–220.

16. **Ben-Dor G., Britan A., Elperin T., et al.**, Experimental investigation of the interaction between weak shock waves and granular layers, Experiments in Fluids. 22 (6) (1997) 432–443.

17. **Ben-Dor G., Britan A., Elperin T., et al.**, Mechanism of compressive stress formation during weak shock waves impact with granular materials, Experiments in Fluids. 22 (6) (1997) 507–518.

18. **Zhu F., Chou C.C., Yang K.H.**, Shock enhancement effect of lightweight composite structures and materials, *Composites. Part B: Engineering*. 42 (5) (2011) 1202–1211.

19. **Utkin P.S.**, Nekotoryye vychislitelnyye aspekty modelirovaniya vzaimodeystviya udarnoy volny s oblakom chastits v ramkakh dvukhzhidkostnoy modeli [Some computational aspects of modeling the interaction of a shock

wave with a cloud of particles in the terms of a two-fluid model], *Goreniye i Vzryv* [“Burning and Explosion”– Russian Journal]. 10 (3) (2017) 53–57.

20. **Godunov S.K., Zabrodin A.V., Ivanov M.Ya., et al.**, Résolution numérique des problèmes multidimensionnels de la dynamique des gaz, Mir, Moscou, 1979.

Received 17.09.2019, accepted 05.11.2019.

THE AUTHORS

BULOVICH Sergei V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
bulovic@yandex.ru

MASIUKEVICH Aleksei V.

The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences

26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
79313165906@yandex.ru



АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Аладов А.В.	79	Ляпкосова И.А.	38
Баранов М.А.	25	Мамошин А.В.	79
Барышников С.В.	17	Маннанов Э.Р.	61
Булович С.В.	135	Масюкевич А.В.	135
Вакуленко А.Ф.	89	Меределина Т.А.	17
Валюхов В.П.	79	Павлов А.В.	108
Вахрушев С.Б.	89	Павлова Е.С.	69
Величко Е.Н.	25	Потапова Е.В.	70
Галиханов М.Ф.	9	Привалов В.Е.	97
Галль Н.Р.	69	Розов С.В.	25
Галунин С.А.	61	Синицына Д.Э.	50
Гороховатский Ю.А.	9	Соловьев А.В.	108
Гулякова А.А.	9	Стукова Е.В.	17
Зайцев Д.К.	50	Суходолов А.П.	119
Закгейм А.Л.	79	Тимофеев С.В.	119
Иванов В.К.	108	Титов Ю.А.	69
Кожевников В.А.	97	Туркина М.В.	50
Король А.В.	108	Филимонов А.В.	89
Кузьмин А.Г.	69	Фотиади А.Э.	79, 97
Кулешова Т.Э.	69	Фрюбинг П.	9
Купцов В.Д.	79	Черняков А.Е.	79
Лебедев Н.Г.	38	Чжан Н	89
Лебедева О.С.	38	Юхнев А.Д.	50

Научное издание

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

**«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
ТОМ 12, № 4, 2019**

Учредитель и издатель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор).
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-51457 от 19.10.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор *В.К. Иванов* – председатель ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *А.Э. Фотиади* – зам. председателя ред. коллегии
канд. физ.-мат. наук, доцент *В.М. Капралова* – ответственный секретарь
канд. физ.-мат. наук *О.А. Ящуржинская* – научный редактор, корректор
А.С. Колгатина – переводчик
Н.А. Бушманова – технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

Сайт <http://ntv.spbstu.ru>

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *Н.А. Бушмановой*

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Адрес университета: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

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 двойными 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: 01.02.04, 01.02.05, 01.04.01, 01.04.02, 01.04.03, 01.04.04, 01.04.05, 01.04.06, 01.04.07, 01.04.10, 01.04.15, 01.04.21.

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. Рисунки представляются только в черно-белом варианте. 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 переносов. 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**.

Более подробную информацию можно получить по телефону редакции:

(812) 294-22-85 с 10.00 до 18.00 – Бушманова Наталья Александровна

или по e-mail: physics@spbstu.ru