

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



# НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

---

---

Физико-математические  
науки

---

---

**4(206) 2014**

Издательство Политехнического университета  
Санкт-Петербург  
2014

**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.*, чл.-кор. РАН – зам. председателя;  
*Рутберг Ф.Г.*, академик РАН;  
*Суриц Р.А.*, академик РАН.

**РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА**

*Иванов В.К.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия – главный редактор;  
*Фотиади А.Э.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия – зам. главного редактора;  
*Капралова В.М.*, канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбГПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь;  
*Антонов В.И.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;  
*Блинов А.В.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;  
*Кожевников Н.М.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;  
*Козловский В.В.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;  
*Остряков В.М.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;  
*Самойлов В.О.*, чл.-кор. РАН, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;  
*Соловьёв А.В.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, Франкфуртский ун-т им. И.В. Гёте,  
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, СПбГПУ, СПб., Россия;  
*Тропп Э.А.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;  
*Фирсов Д.А.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия.

*Журнал с 1995 года издается под научно-методическим руководством Российской академии наук.*

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» ISSN 1994-2354.

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 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.

THE MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF THE RUSSIAN FEDERATION



**ST. PETERSBURG STATE  
POLYTECHNICAL UNIVERSITY  
JOURNAL**

---

---

Physics  
and Mathematics

---

---

**4(206) 2014**

Polytechnical University Publishing House  
Saint Petersburg  
2014

# 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;  
*D.A. Varshalovich* – full member of RAS; *V.A. Glukhikh* – full member of RAS;  
*A.Ye. Zhukov* – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council;  
*V.K. Ivanov* – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.; *D.A. Indeitsev* – corresponding member of RAS;  
*A.I. Rudskoy* – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council;  
*Ph.G. Rutberg* – full member of RAS;  
*R.A. Suris* – full member of RAS.

## JOURNAL EDITORIAL BOARD

*V.K. Ivanov* – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia – editor-in-chief;  
*A.E. Fotiadi* – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia – deputy editor-in-chief;  
*V.M. Kapralova* – Candidate of Phys.-Math. Sc., associate prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia – executive secretary;  
*V.I. Antonov* – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;  
*A.V. Blinov* – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;  
*D.A. Firsov* – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;  
*N.M. Kozhevnikov* – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;  
*V.V. Kozlovsky* – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;  
*V.M. Ostryakov* – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;  
*V.O. Samoilo* – corresponding member of RAMS, prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;  
*A.V. Solovyev* – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., Johann Wolfgang Goethe University Frankfurt am Main, Germany;  
*A.K. Tagantsev* – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;  
*I.N. Toptygin* – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;  
*E.A. Tropp* – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia

*The journal is published under the scientific and methodical guidance of RAS since 1995.*

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

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

The journal is published since 2008 as part of the periodical edition 'Nauchno-tehnicheskie vedomosti SPb-GPU' (ISSN 1994-2354).

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 Russian Science Citation Index (RSCI) database.

© 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 Politeknicheskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.

Phone: (812) 294-22-85.

## Содержание

### Физика конденсированного состояния

<b>Глушков В.Л., Еркович О.С.</b> Энергетические характеристики поверхностей щелочных металлов с учетом фриделевских осцилляций электронной плотности .....	9
<b>Королева Е.Ю., Бурдин Д.А., Кумзеров Ю.А., Сысоева А.А., Филимонов А.В.</b> Диэлектрические свойства нанокompозита палладий – нитрит натрия в пористом стекле .....	19
<b>Андроникова Д.А., Бурковский Р.Г., Вахрушев С.Б., Филимонов А.В.</b> Моделирование структурной неустойчивости в цирконате свинца .....	30

### Приборы и техника физического эксперимента

<b>Аладов А.В., Валюхов В.П., Закгейм А.Л., Черняков А.Е., Цацульников А.Ф.</b> Динамически управляемые светодиодные источники света для новых технологий освещения .....	38
---	----

### Физическая электроника

<b>Кораблев В.В., Дубов В.В.</b> Влияние естественных неоднородностей на приповерхностное рассеяние электронов .....	48
<b>Копытов Г.Ф., Мартынов А.А., Акинцов Н.С.</b> Движение заряженной частицы в поле электромагнитной волны и в постоянном магнитном поле (статья на английском языке) .....	55

### Физическая оптика

<b>Привалов В.Е., Половченко С.В., Чартий П.В.</b> Экспериментальное зондирование промышленных аэродисперсных потоков .....	64
---	----

### Биофизика и медицинская физика

<b>Добровольская И.П., Дресвянина Е.Н., Юденко А.Н., Попрядухин П.В., Ивановка Е.М., Юдин В.Е.</b> Структура и свойства одномерных матриц на основе хитозана и наночибрилл хитина для клеточных технологий .....	74
<b>Побегалов Г.Е., Арсениев А.Н., Якунина М.В., Минахин Л.С.</b> Определение силы взаимодействия промотора с РНК-полимеразой <i>Pseudomonas aeruginosa</i> на стадии инициации транскрипции .....	89
<b>Добровольская И.П., Попрядухин П.В., Юдин В.Е., Ивановка Е.М.</b> Формирование пористой структуры пленок из алифатического сополиамида .....	97

### Механика

<b>Кожанов Д.А.</b> Структурная модель гибких тканых, предварительно поврежденных композитов в условиях одноосного растяжения .....	107
---	-----

### Радиофизика

<b>Смирнов А.С., Голубев А.Г.</b> Оптимизация чувствительности амплитудно-частотной характеристики интерференционных волоконно-оптических гидрофонов .....	115
--	-----

**Математическая физика**

**Петриченко М.Р.** *Типичные и нетипичные предельные задачи для уравнения Крокко* ..... 122

**Математическое моделирование физических процессов**

**Халидов И.А.** *Особенности взаимодействия разреженного газа с шероховатой поверхностью с позиций полигауссовской математической модели* ..... 129

*Авторский указатель* ..... 139

## Contents

### Condensed Matter Physics

- Glushkov V.L., Erkovitch O.S.** *Energy characteristics of the surfaces of alkali metals with consideration for the Friedel oscillations of the electron density* ..... 9
- Koroleva E.Yu., Burdin D.A., Kumzerov Yu.A., Sysoeva A.A., Filimonov A.V.** *Dielectric properties of Pd-NaNO<sub>2</sub> nanocomposite in porous glass* ..... 19
- Andronikova D.A., Burkovsky R.G., Vakhrushev S.B., Filimonov A.V.** *Modeling of structural instability in lead zirconate* ..... 30

### Experimental Technique and Devices

- Aladov A.V., Valyukhov V.P., Zakgeim A.L., Chernyakov A.E., Tsatsulnikov A.F.** *Type LED dynamically controlled light sources for novel lighting technology* ..... 38

### Physical Electronics

- Korablev V.V., Dubov V.V.** *The influence of natural irregularities on surface electron scattering* ..... 48
- Kopytov G.F., Martynov A.A., Akintsov N.S.** *The motion of a charged particle in the field of an electromagnetic wave and in the constant magnetic field* ..... 55

### Physical Optics

- Privalov V.E., Polovchenko S.V., Chartiy P.V.** *An experimental study of industrial air disperse flows* ..... 64

### Biophysics and Medical Physics

- Dobrovolskaya I.P., Dresvyanina E.N., Yudenko A.N., Popryadukhin P.V., Ivankova E.M., Yudin V.E.** *The structure and properties of one-dimensional composite matrix based on chitosan and chitin nanofibrils and intended for cell technologies* ..... 74
- Pobegalov G.E., Arsenyev A.N., Yakunina M.V., Minakhin L.S.** *The determination of binding force between promoter and Pseudomonas aeruginosa RNA polymerase during transcription initiation* ..... 89
- Dobrovolskaya I.P., Popryadukhin P.V., Yudin V.E., Ivankova E.M.** *Porous structure forming of the aliphatic copolyamide films* ..... 97

### Mechanics

- Kozhanov D.A.** *A structural model for flexible woven and pre-damaged composites under conditions of uniaxial tension* ..... 107

### Radiophysics

- Smirnov A.S., Golubev A.G.** *The optimization of sensitivity of frequency response of interferometric fiber-optic hydrophones* ..... 115

**Mathematical Physics**

**Petritchenko M.R.** *Typical and atypical boundary problems for the Crocco equation* ..... 122

**Simulation of Physical Processes**

**Khalidov I.A.** *Salient features of rarefied gas flow interaction with rough surface in the context of the poly-Gaussian mathematical model* ..... 129

*Author index*..... 139

УДК 539.2

*В.Л. Глушков, О.С. Еркович*

Московский государственный технический университет им. Н.Э.Баумана

## **ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОВЕРХНОСТЕЙ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ С УЧЕТОМ ФРИДЕЛЕВСКИХ ОСЦИЛЛЯЦИЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ**

Данная работа изучает возможности метода функционалов плотности в рамках модели «желе» для описания поверхностных характеристик некоторых щелочных металлов. Основная задача исследования – построить оптимальный вид новых пробных функций распределения, которые бы учитывали осцилляции Фриделя, и рассчитать вариационные параметры этих функций. Решение задачи включало самосогласованный расчет поверхностной энергии ряда щелочных металлов; в нем учитывались градиентные поправки на неоднородность электронного газа в их приповерхностной области для кинетической энергии. Определены поверхностные характеристики объектов исследования, в частности работа выхода и высота потенциального барьера. Построены эффективные потенциалы для выбранных металлов.

ТЕОРИЯ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ, ОСЦИЛЛЯЦИЯ ФРИДЕЛЯ, ЩЕЛОЧНОЙ МЕТАЛЛ, ПРОБНАЯ ФУНКЦИЯ ПЛОТНОСТИ.

### **Введение**

Исследование физических процессов и явлений на поверхностях металлов имеет большое практическое значение в таких областях, как микроэлектроника, оптика, материаловедение. Поверхность представляет значительный интерес и с фундаментальной точки зрения, так как может рассматриваться как особый род дефекта твердого тела. Свойства объемных кристаллов в основном рассматриваются на основе предположения об идеальной периодичности их атомной структуры в трех измерениях. Наличие поверхности разрушает периодичность в одном из направлений, что приводит к структурным изменениям в поверхностном слое. Резкая неоднородность переходного слоя, когда вблизи границы плотность спадает от объемного значения до нуля на расстояниях порядка атомных размеров, создает основную проблему при построении теории, описывающей поверх-

ность всего ряда металлов [1].

Для предсказания свойств и поиска материалов с нужными свойствами широко используются расчеты из первых принципов, поскольку именно они обладают высокой предсказательной способностью. Использование квантовомеханических расчетов позволяет предсказать и объяснить многие особенности и свойства материалов и тем самым существенно сузить круг поиска новых, ранее неизвестных, материалов с заданными свойствами. Это, в свою очередь, позволяет минимизировать затраты на эксперименты. Особую роль здесь играют теоретические исследования структурных, электронных и адсорбционных свойств поверхностей наноматериалов. При этом критерием правильности той или иной модели описания поверхности и предсказываемых ею значений соответствующих параметров может служить сопоставление различных рассчитанных и измеренных характеристик металлов.

Цели данной работы состоят в следующем:

найти поверхностные характеристики щелочного металла – работу выхода, потенциальный барьер, поверхностную энергию (с использованием метода функционала плотности);

построить распределение электронной плотности объекта и его потенциала для различных пробных функций;

изучить влияние вида пробных функций, которые учитывают осцилляции Фриделя, затухающие в глубь металла, на поверхностные характеристики.

#### Методика расчета поверхностных характеристик и электронной плотности у поверхности металла

Одним из перспективных направлений в описании многочастичных систем является метод функционалов плотности, который позволяет представить основные характеристики многочастичных систем в виде однозначных функционалов плотности частиц в системе. В основе этого подхода лежит теорема Хоэнберга – Кона [2 – 7].

Использование такого подхода позволяет определить основные характеристики системы, не прибегая к исследованию ее точной волновой функции, что значительно упрощает численные расчеты. Кроме того, плотность частиц  $n(r)$  можно наблюдать экспериментально [8 – 10]. Благодаря использованию функции  $n(r)$  исключается огромное количество избыточной информации, которое содержится в волновой функции.

Рассмотрим электронный газ (состоит из  $N$  частиц) в неоднородном внешнем поле с потенциалом  $v(r)$ , который описывается гамильтонианом вида

$$H = T + V + U, \quad (1)$$

где  $T$ ,  $V$  и  $U$  описывают соответственно кинетическую энергию, кулоновское взаимодействие электронов друг с другом и их взаимодействие с внешним полем.

Пусть  $\psi$  – вектор основного состояния системы частиц в заданном поле;  $n(r)$  – соответствующая электронная плотность, удовлетворяющая условию

$$\int n(r)dr = N. \quad (2)$$

Согласно теореме Хоэнберга – Кона [2 – 7], существует универсальный функционал плотности  $G[n(r)]$  такой, что плотность, соответствующая любому внешнему потенциалу  $v(r)$ , должна минимизировать функционал полной энергии основного состояния системы

$$E_v[n] = -\int v(r)n(r)dr + \frac{1}{2} \iint \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} drdr' + G[n], \quad (3)$$

при дополнительном условии (2).

Функционал  $G[n]$  определяется соотношением

$$G[n] = \langle \psi | T + V | \psi \rangle - \frac{1}{2} \iint \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} drdr'. \quad (4)$$

Введем множитель Лагранжа  $\mu$ ; тогда можно записать условие экстремума, следующее из теоремы Хоэнберга – Кона, в виде

$$\delta [E_v[n] - \mu \int n(r)dr] = 0, \quad (5)$$

из которого следует, что

$$\mu = \frac{\delta E_v[n]}{\delta n}.$$

При  $N \gg 1$  множитель Лагранжа  $\mu$  совпадает с химическим потенциалом системы [1].

Для изучения поверхностных характеристик вблизи поверхности металлов часто используют упрощенную модель, в которой решетка заменяется однородным положительным фоном (модель однородного фона, или модель «желе» [1, 11]).

Плотность положительного заряда для кристалла, занимающего полупространство  $z < 0$ , в этой модели имеет вид

$$n_{ion}(z) = n_0 \theta(-z), \quad (6)$$

где

$$\theta(z) = \begin{cases} 1, & z > 0; \\ 0, & z < 0 \end{cases}$$

– функция Хевисайда.

Ввиду одномерности функции  $n_{ion}(z)$ , электронная плотность также зависит толь-

ко от координаты  $z$ . Кроме того, она должна удовлетворять условиям

$$\lim_{|z| \rightarrow +\infty} n(z) = n_{ion}(z) \quad (7)$$

и (для электронейтрального кристалла)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [n(z) - n_{ion}(z)] dz = 0. \quad (8)$$

Функционал полной энергии  $E[n]$  основного состояния системы электронов можно представить в виде градиентного разложения [1], если использовать атомную систему единиц ( $e = m_e = \hbar = 1$ ) и ограничиться двумя первыми порядками разложения:

$$E[n(z)] = \int_{-\infty}^{+\infty} \{ \omega_0[n(z)] + \omega_2[n(z), |\nabla n|^2] \} dz, \quad (9)$$

где  $\omega_0[n(z)]$  – плотность энергии однородного электронного газа;

$$\omega_0[n(z)] = \omega_{kul}(z) + \omega_{kin}(z) + \omega_x(z) + \omega_c(z); \quad (10)$$

при этом  $\omega_{kul}(z)$  – плотность электростатической энергии электронов;

$$\omega_{kul}(z) = \frac{1}{2} \varphi(z) n(z) \quad (11)$$

( $\varphi(z)$  – потенциал, создаваемый распределением электронов и фоном положительного заряда (возможен учет потенциала внешнего поля));  $\omega_{kin}(z)$  – плотность кинетической энергии электронного газа плотности  $n$  в приближении Томаса – Ферми [12];

$$\omega_{kin}(z) = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} n(z)^{\frac{5}{3}}; \quad (12)$$

$\omega_x(z)$  – плотность электростатической энергии электронного газа, обусловленная обменным взаимодействием электронов (в приближении Хартри – Фока [13, 14]);

$$\omega_x(z) = -\frac{3}{4} \left( \frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} n(z)^{\frac{4}{3}}; \quad (13)$$

$\omega_c(z)$  – плотность корреляционной энергии (интерполяционная формула Вигнера [15, 16]);

$$\omega_c(z) = \frac{-0,056 n(z)^{\frac{4}{3}}}{0,079 + n(z)^{\frac{1}{3}}}. \quad (14)$$

В формуле (9)  $\omega_2(z)$  – поправка на не-

однородность электронного газа для плотности кинетической энергии (формула Вейцзеккера – Киржница [18, 19]), она выражается как

$$\omega_2[n(z), |\nabla n|^2] = \frac{\nabla n(z)^2}{72n(z)}. \quad (15)$$

Для определения электронного распределения вблизи поверхности металла мы использовали метод пробных функций [11]. Суть метода состоит в рассмотрении двух семейств пробных функций  $n = n(\alpha_i, z)$  и  $\varphi = \varphi(\alpha_i, z)$ , связанных между собой уравнением Пуассона; последнее обеспечивает самосогласование для кулоновского потенциала. Значения параметров  $\alpha_i$  находят из условия минимума полной энергии системы. Подставляя вводимые таким образом  $n(z)$  и  $\varphi(z)$  в выражение (9), находим полную энергию основного состояния системы. Выбранные пробные функции должны удовлетворять условиям (6) и (7), быть непрерывными на границе металл – среда, приводя к условию непрерывности нормальной составляющей электростатической индукции [17].

В работе [11] Дж. Смит представил пробную функцию  $n(z)$  без обсуждения и обоснования в виде

$$n_0(z) = n_0 \left[ \left( 1 - \frac{1}{2} e^{\beta z} \right) \theta(-z) + \frac{1}{2} e^{-\beta z} \theta(z) \right], \quad (16)$$

где  $n_0$  – объемная электронная плотность,  $\beta$  – вариационный параметр.

Для устранения неясности в характере пробных функций решалась упрощенная задача: в функционале полной энергии системы учитывались только слагаемые кинетической энергии (12) и электростатической энергии электронов (11) (приближение Томаса – Ферми). Однако при углубленном рассмотрении по-прежнему использовалась пробная функция (16), так как, во-первых, она, будучи экспоненциально затухающей вне металла, больше соответствует решению квантовомеханической задачи для электронной плотности, чем степенное решение уравнения Томаса – Ферми [10], а во-вторых, несмотря на простоту модели, обеспечивает разумное согласие с экспериментом для большинства простых металлов [8, 9, 11, 19].

К недостаткам пробной функции (16) и степенных пробных функций, полученных из решения уравнения Томаса – Ферми, следует отнести отсутствие осцилляций Фриделя, затухающих от поверхности в глубь металла [17, 19].

Для нахождения вариационного параметра необходимо минимизировать функционал (9), но данный интеграл расходится, так как полная энергия электронного газа полуограниченной системы бесконечна. С целью устранения этого препятствия вместо указанной задачи минимизации

$$\frac{dE[n(z)]}{d\beta} = 0$$

решается эквивалентная задача на минимизацию поверхностной энергии, а именно

$$\frac{d\sigma}{d\beta} = 0, \quad (17)$$

где

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} (\omega[n(z)] - \omega[n_0\theta(-z)])dz; \quad (18)$$

при этом

$$\omega[n(z)] = \omega_0[n(z)] + \omega_2[n(z), |\nabla n|^2]. \quad (19)$$

Проводя численное интегрирование, получаем значение вариационного параметра  $\beta$  и значения характеристик поверхности металла, которые могут быть сопоставлены с результатами эксперимента [8, 9, 11, 19].

Подобные расчеты были выполнены для следующих пробных функций плотности:

$$n_1(z) = n_0 \left[ \left( 1 - \frac{1}{2} \frac{1}{(1-z)^{a_1}} \right) \theta(-z) + \frac{1}{2} \frac{1}{(1+z)^{a_1}} \theta(z) \right], \quad (20)$$

$$n_2(z) = n_0 \left[ \left( 1 - \frac{a_{2L}}{(b_{2L}z - 1)^2} \right) \theta(-z) + (1 - a_{2L})e^{-a_{2R}z} \theta(z) \right], \quad (21)$$

$$n_3(z) = n_0 \left[ \left( 1 - \frac{a_{3L} \cos(b_{3L}z - c_{3L})}{(b_{3L}z - 1)^2 \cos(c_{3L})} \right) \theta(-z) + \right. \quad (22)$$

$$\left. + (1 - a_{3L})e^{-a_{3R}z} \theta(z) \right], \quad (22)$$

где  $a_1, a_{2L}, a_{3L}, c_{3L}$  – вариационные коэффициенты; коэффициенты  $a_{2R}, a_{3R}$  находятся из условия электронейтральности (8) электронной плотности на границе раздела металл – вакуум; коэффициент  $b_{2L} = b_{3L} = 2k_F$  [12, 19].

Как уже отмечалось выше, в качестве пробной функции плотности в ряде работ (см., например, [11, 17]) использовалась функция (16). Возможность использования пробной функции электронной плотности на границе раздела металл – вакуум, которая имеет вид, отличный от экспоненциального (16), отражена в формуле для  $n_1(z)$ . Данная функция является однопараметрической, аналогично функции (16).

Выбор функции, которая учитывает осцилляции Фриделя у границы металл – вакуум, а именно –  $n_3(z)$ , основан на результатах работы [19]. Она имеет колебания плотности, затухающие в глубь металла, и экспоненциальное уменьшение  $n(z)$  в вакууме. Применение экспоненциального затухания правых частей функций (21) и (22) связано с тем, что характеристики поверхности металла, получаемые при использовании пробной функции (16), лучше совпадают с результатами эксперимента, чем при использовании степенной пробной функции (19). Вид функции  $n_2(z)$  совпадает с таковым для  $n_3(z)$ , за исключением осцилляций. Такую зависимость необходимо исследовать с тем, чтобы оценить влияние колебаний электронной плотности вблизи поверхности металла на соответствие экспериментальным данным.

### Расчет поверхностных характеристик металла

Выбор работы выхода  $A$  для расчетов связан с тем, что это одна из основных характеристик поверхности металла; для нее существует большое количество экспериментальных данных (см., например, публикации [7, 15]). Работа выхода есть минимальная работа, которую необходимо совершить для удаления электрона из металла при абсолютной температуре  $T = 0$ .

Для ее расчета можно использовать следующее выражение [1]:

$$A = \Delta\varphi - \bar{\mu}, \quad (23)$$

где

$$\bar{\mu} = \mu - \bar{\varphi}(r) = \left\langle \frac{\delta G[n]}{\delta n} \right\rangle \quad (24)$$

– объемный химический потенциал, который отсчитывается от среднего электростатического потенциала  $\bar{\varphi}$  и усредняется по объему металла;

$$\Delta\varphi = \varphi(\infty) - \bar{\varphi} \quad (25)$$

– разность потенциалов внутри и вне металла (кулоновский барьер).

Функционал  $G[n]$  с учетом величин плотности энергий (12) – (14), в пренебрежении градиентной поправкой (15), имеет вид

$$G[n] = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int n(z)^{\frac{5}{3}} dz - \frac{3}{4} \left( \frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \int n(z)^{\frac{4}{3}} dz - \int \frac{0,056n(z)^{\frac{4}{3}}}{0,079 + n(z)^{\frac{1}{3}}} dz. \quad (26)$$

В соответствии с формулами (24) и (26) выражение для работы выхода можно записать в виде

$$A = -\varphi(-\infty) - \frac{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}}{2} n_0^{\frac{2}{3}} + \quad (27)$$

$$+ \frac{0,056n_0^{\frac{2}{3}} + 0,0059n_0^{\frac{1}{3}}}{\left(0,079 + n_0^{\frac{1}{3}}\right)^2} + \left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}} n_0^{\frac{1}{3}}. \quad (27)$$

Внутри металла каждый электрон понижает свою энергию за счет образования обменно-корреляционной «дырки». Поэтому в выражение для полного эффективного потенциала внутри металла, помимо кулоновского барьера, вводят поправки на обменную и корреляционную энергии:

$$v_{ef}(z) = \varphi(z) - \left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}} n(z)^{\frac{1}{3}} - \frac{0,056n(z)^{\frac{2}{3}} + 0,0059n(z)^{\frac{1}{3}}}{\left(0,079 + n(z)^{\frac{1}{3}}\right)^2}. \quad (28)$$

Высота потенциального барьера определяется выражением

$$h = v_{ef}(\infty) - v_{ef}(-\infty). \quad (29)$$

### Результаты расчетов

Значения вариационных параметров, минимизирующих функционал  $\sigma_{0,l}[n]$ , были получены путем численных расчетов (табл. 1). Численное интегрирование выражения (18) позволило определить их значения для пробных функций всех трех типов

Таблица 1

Результаты расчета вариационных коэффициентов, минимизирующих поверхностную энергию щелочных металлов для различных пробных функций  $n_i(z)$

Металл	Коэффициент						
	$n_0(z)$	$n_1(z)$	$n_2(z)$		$n_3(z)$		
	$\beta$	$a_1$	$a_{2L}$	$b_{2L}$	$a_{3L}$	$b_{3L}$	$c_{3L}$
Cs	1,34	2,55	0,36	0,68	0,57	0,68	-0,10
Rb	1,29			0,73			
K				0,77			
Na	1,31	2,50	0,40	0,96	0,51	0,96	-0,70
Li	1,23	2,48	0,41	1,18		1,18	-1,10

Примечание. Коэффициенты  $b_{2L} = b_{3L} = 2k_F$  ( $k_F$  – импульс Ферми), значение коэффициента  $\beta$  получены в работе [11].

Таблица 2

Сравнение с экспериментом рассчитанных значений поверхностной энергии  $\sigma_i$  щелочных металлов для различных пробных функций  $n_i(z)$

Металл	Поверхностная энергия, $10^5$ а.с.е.				
	$\sigma_0$	$\sigma_1$	$\sigma_2$	$\sigma_3$	$\sigma_{exp}$ [11]
К	4,42	5,68	6,06	4,30	9,41
Na	7,09	9,77	11,40	6,86	15,46
Li	8,42	13,94	20,64	8,31	32,86

(см. формулы (19) – (21)). Данный расчет выполнен только для ряда щелочных металлов, так как модель «желе» хорошо зарекомендовала себя для описания поверхностной энергии металлов с достаточно малой концентрацией свободных электронов ( $n < 0,008$ ) [1, 11].

Результаты расчета поверхностной энергии и их сравнение с экспериментальными значениями представлены в табл. 2.

Как было отмечено в статье [11], работа выхода и другие поверхностные характеристики зависят от вариационной производной  $\delta\sigma[n]/\delta n$  функционала поверхностной

энергии, а не от значения  $\sigma[n]$ . Этим объясняется тот факт, что полученная поверхностная энергия только по порядку величины совпадает с ее экспериментальным значением, в то время как работа выхода и высота потенциального барьера существенно лучше соответствуют результатам эксперимента. Результаты расчета работы выхода и высоты потенциального барьера, а также их сравнение с экспериментальными данными представлены в табл. 3.

Распределения электронной плотности функций  $n_0(z)$  и  $n_3(z)$  при  $n_0 = 0,00377$  (для натрия) приведены на рис. 1. Эффектив-

Таблица 3

Сравнение с экспериментом рассчитанных характеристик поверхностей щелочных металлов с использованием различных пробных функций

Пробная функция и эксперимент	Величина	Значение величины, эВ				
		Cs	Rb	K	Na	Li
$n_0(z)$	$A_0$	2,64	2,73	2,77	2,90	3,13
	$h_0$	4,22	4,57	4,81	6,05	7,86
$n_1(z)$	$A_1$	2,74	2,84	2,90	3,24	3,63
	$h_1$	4,32	4,67	4,93	6,39	8,36
$n_2(z)$	$A_2$	3,09	3,16	3,21	3,46	3,37
	$h_2$	4,67	4,99	5,24	6,61	8,11
$n_3(z)$	$A_3$	2,46	2,51	2,50	2,65	2,89
	$h_3$	4,03	4,35	4,54	5,81	7,63
Эксперимент [11]	$A_{exp}$	1,81	2,16	2,22	2,35	2,38
	$h_{exp}$	—	—	4,12	4,85	6,08

Обозначения:  $A_i$ ,  $A_{exp}$  – работа выхода электронов с поверхности;  $h_i$ ,  $h_{exp}$  – высота потенциального барьера.

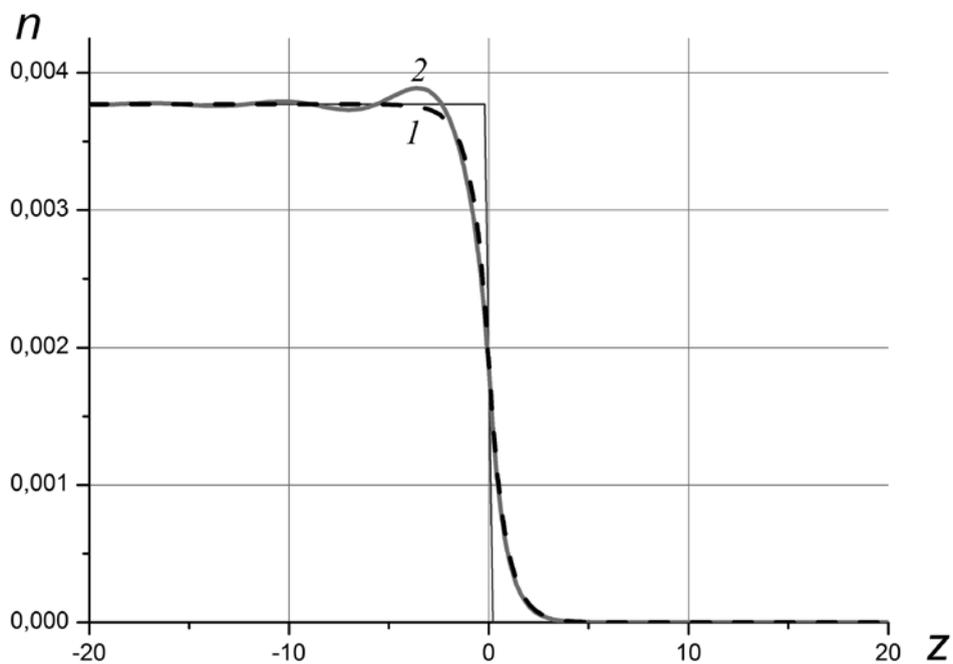


Рис. 1. Распределения электронной плотности с использованием пробных функций  $n_0(z)$  (1) и  $n_3(z)$  (2) при  $n_0 = 0,00377$  для натрия

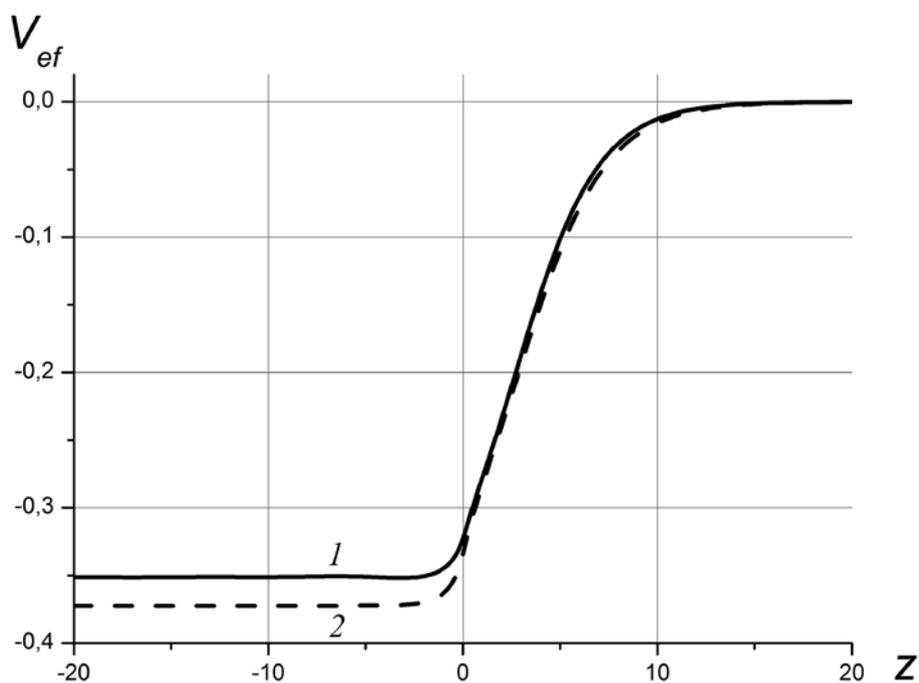


Рис. 2. Расчетные зависимости эффективного потенциала  $V_{ef}$  от расстояния  $z$  по нормали к поверхности, полученные с использованием пробных функций  $n_0(z)$  (1) и  $n_3(z)$  (2) при  $n_0 = 0,00377$  для натрия

ный потенциал, полученный с использованием соответствующих функций, представлен на рис. 2.

### Заключение

Данная работа ставила своей целью изучить возможности применения метода функционалов плотности в рамках модели «желе», причем с использованием новых пробных функций распределения для описания поверхностных характеристик ряда щелочных металлов. Проведен самосогласованный расчет поверхностной энергии щелочных металлов с учетом градиентных поправок для кинетической энергии на неоднородность электронного газа в их приповерхностной области. Был найден оптимальный вид этих функций, рассчитаны вариационные параметры и такие поверхностные характеристики, как рабо-

та выхода и высота потенциального барьера. Построены эффективные потенциалы для выбранных металлов. Показано, что пробные функции распределения, отличные от экспоненциальных, дают приемлемые результаты, но ближе всех остальных совпадает с экспериментальными данными функция, учитывающая осцилляции Фриделя.

Результаты данной работы могут быть использованы при описании как чистой поверхности металлов, так и процессов взаимодействия излучения с веществом, в частности элементарных процессов, происходящих на границе раздела металл – плазма. Кроме того, метод функционала плотности в рамках модели «желе» применим для описания воздействия электромагнитного излучения высокой мощности на поверхность металла [20].

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Партенский М.Б.** Самосогласованная электронная теория металлической поверхности // УФН. 1979. Т. 128. Вып. 1. С. 69–106.
2. **Hohenberg P., Kohn W.** Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.* 1964. Vol. 136, pp. 864–871.
3. **Levy M., Freed K.** Direct first principles algorithm for the electron density functional. *J. Chem. Phys.* 1982. Vol. 77, pp. 396–398.
4. **Koch W., Holthausen M.C.** A chemist's guide to density functional theory. Weinheim. Wiley-VCH, 2000. 294 p.
5. **Глушков В.Л., Еркович О.С.** Метод многочастичных функционалов плотности в описании двухкомпонентных систем // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011. № 1. С. 33–39.
6. **Еркович О.С.** Формулировка вариационного принципа в методе функционалов плотности // Вестник МГТУ им. Баумана. Сер. Естественные науки. 2000. № 1(4). С. 84–96.
7. **Сатанин А.М.** Введение в теорию функционала плотности. Учебно-методическое пособие. Нижний Новгород: НГУ им. Лобачевского, 2009. 64 с.
8. **Saravanan R., Rani M.P.** Metal and alloy bonding: An experimental analysis. Charge density in metals and alloys. London: Springer, 2012. 151 p.
9. **Suryanarayana C.** Experimental techniques in materials and mechanics. CRC Press, Taylor & Francis Group, 2011. 430 p.
10. **Цирельсон В.Г.** Функция электронной плотности в кристаллохимии: методы определения и интерпретация // Итоги науки и техники. Сер. Кристаллохимия. Т. 20. Электронная кристаллохимия. М.: ВИНТИ, 1986. С. 3–123.
11. **Smith J.R.** Self-consistent theory of electron work functions and surface potential characteristics for selected metals. *Phys. Rev.* 1969. Vol. 181. No. 2, pp. 522–529.
12. Теория неоднородного электронного газа. Под ред. С. Лундквиста, Н.М. Марча. М.: Мир, 1987. 400 с.
13. **Martin R.M.** Electronic structure. Basic theory and practical methods. Cambridge University Press, 2004. 624 p.
14. **Parr R.G., Yang W.** Density-functional theory of atoms and molecules. New York: Oxford University Press, 1989. 333 p.
15. **Balbas L.C., Martins J.L., Soler J.M.** Evaluation of exchange-correlation energy, potential and stress. Режим доступа: arXiv:cond-mat/01047171, 10 Apr. 2001. P. 1–4.
16. **Dreizler R.M., Gross E.K.U.** Density functional theory. Berlin: Springer-Verlag, 1990. 303 p.
17. **Киржниц Д.А.** Полевые методы теории многих частиц. М.: Госатомиздат, 1963. 344 с.
18. **Lang N.D., Kohn W.** Theory of metal surfaces: charge density and surface energy. *Phys. Rev. B.* 1970. Vol. 1. No. 12, pp. 4555–4568.
19. **Еркович О.С., Курочкин А.В., Яковлев М.А.**



Построение физической модели распределения приповерхностного электронного слоя при импульсном лазерном воздействии на металлическую мишень // Труды 6-й Всерос. конф. Необратимые процессы в науке и технике. М.:

МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011. С. 235–238.

20. **Вакилов А.Н., Мамонова М.В., Матвеев В.В., Прудников В.В.** Теоретические модели и методы в физике поверхности. Учебное пособие. Омск: Изд-во ОмГУ, 2005. 212 с.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ГЛУШКОВ Владимир Леонидович** – ассистент Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана.

105005, Россия, г. Москва, 2-я Бауманская ул., 5  
vladimirglushkov@yandex.ru

**ЕРКОВИЧ Ольга Станиславовна** – кандидат физико-математических наук, доцент Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана.

105005, Россия, г. Москва, 2-я Бауманская ул., 5  
erkovitch@mail.ru

---

### *Glushkov V.L., Erkovitch O.S.* ENERGY CHARACTERISTICS OF THE SURFACES OF ALKALI METALS WITH CONSIDERATION FOR THE FRIEDEL OSCILLATIONS OF THE ELECTRON DENSITY.

The present work studies possibilities for description of surface characteristics of alkali series in terms of the density functional theory. The metal surface is considered in the model of a metal in which the positive charges are replaced by a uniform charge background of density. The main objective was to build the optimal type of new trial functions for electron number density distribution, which would take into account the Friedel oscillations, and to calculate the variational parameters of those functions. Self-consistent calculation of the surface energy of alkali metals was carried out taking into account the gradient corrections for inhomogeneity of electron gas in the surface region for the kinetic energy. In this paper, we determined surface characteristics, such as the work of exit and the potential barrier height. The effective potentials for selected alkali metals were constructed.

DENSITY FUNCTIONAL THEORY, SURFACE CHARACTERISTICS, FRIEDEL OSCILLATION, ALKALI METAL, TRIAL FUNCTION.

#### REFERENCES

1. **Partenskij M.B.** Samosoglasovannaya elektronnaya teoriya metallicheskoj poverkhnosti. *UFN*, 1979, No. 128, Iss.1, pp. 69-106. (rus)
2. **Hohenberg P., Kohn W.** Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, 1964, Vol. 136, pp. 864-871.
3. **Levy M., Freed K.** Direct first principles algorithm for the electron density functional. *J. Chem. Phys.*, 1982, Vol. 77, pp. 396-398.
4. **Koch W., Holthausen M.C.** *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*. Weinheim. WILEY-VCH, 2000. 294 p.
5. **Glushkov V.L., Erkovich O.S.** Metod mnogochastichnykh funktsionalov plotnosti v opisani dvukhkomponentnykh sistem. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Estestvennye Nauki*. Moscow, MGTU im. N.E. Baumana, 2011, No.1, pp. 33-39. (rus)
6. **Erkovich O.S.** Formulirovka variatsionnogo printsipa v metode funktsionalov plotnosti. *Vestnik MGTU im. Baumana. Ser. Estestvennye nauki*, 2000, No. 1(4), pp. 84-96. (rus)
7. **Satanin A.M.** *Vvedenie v teoriyu funktsionala plotnosti. Uchebno-metodicheskoe posobie*. Nizhnij Novgorod, NGU im. Lobachevskogo, 2009. 64 p. (rus)
8. **Saravanan R., Rani M.P.** *Metal and Alloy Bonding: An Experimental Analysis. Charge Density in Metals and Alloys*. London: Springer, 2012. 151 p.
9. **Suryanarayana C.** *Experimental Techniques in Materials and Mechanics*. CRC Press, Taylor & Francis Group, 2011, 430 p.
10. **Tsirel'son V.G.** Funktsiya elektronnoj plotnosti v kristallokhemii. *Itogi nauki i tekhniki. Ser. Kristallokhemiya*, Vol. 20. Moscow, VINITI, 1986, pp. 3-123. (rus)
11. **Smith J.R.** Self-consistent theory of electron work functions and surface potential characteristics for selected metals. *Phys. Rev.*, 1969, Vol. 181, No. 2, pp. 522-529.
12. *Teoriya neodnorodnogo elektronogo gaza*.

Pod red. Lundkvista C., Marcha N. Moscow, Mir, 1987. 400 p. (rus)

13. **Martin R.M.**. *Electronic Structure. Basic Theory and Practical Methods*. Cambridge University Press, 2004. 624 p.

14. **Parr R.G., Yang W.** *Density-functional Theory of Atoms and Molecules*. New York: Oxford University Press, 1989. 333 p.

15. **Balbas L.C., Martins J.L., Soler J.M.** Evaluation of exchange-correlation energy, potential and stress. Available at: arXiv:cond-mat/01047171, 10 Apr, 2001, pp. 1-4.

16. **Dreizler R.M., Gross E.K.U.** *Density Functional Theory*. Berlin: Springer-Verlag, 1990. 303 p.

17. **Kirzhnits D.A.** *Polevyie metody teorii mnogikh*

*chastits*. Moscow, Gosatomizdat, 1963. 344 p. (rus)

18. **Lang N.D., Kohn. W.** Theory of metal surfaces: charge density and surface energy. *Phys. Rev. B*, 1970, Vol. 1, No. 12, pp. 4555-4568.

19. **Erkovich O.S., Kurochkin A.V., Yakovlev M.A.** Postroenie fizicheskoy modeli raspredeleniya pripoverkhnostnogo elektronnoy sloya pri impul'snom lazernom vozdeystvii na metallicheskiy mishen'. *Trudy 6-j Vseros. konf. Neobratimye protsessy v nauke i tekhnike*. Moscow, MGTU im. N.E. Baumana, 2011, pp. 235-238. (rus)

20. **Vakilov A.N., Mamonova M.V., Matveev V.V., Prudnikov V.V.** *Teoreticheskie modeli i metody v fizike poverkhnosti. Uchebnoe posobie*. Omsk: Izdvo OmGU, 2005. 212 p. (rus)

#### THE AUTHORS

**GLUSHKOV VLADIMIR L.**

*Bauman Moscow State Technical University*  
2-nd Baumanskaya St., 5, 105005, Moscow, Russia  
vladimirglushkov@yandex.ru

**ERKOVITCH Olga S.**

*Bauman Moscow State Technical University*  
2-nd Baumanskaya St., 5, 105005, Moscow, Russia  
erkovitch@mail.ru



УДК 538.956

<sup>1</sup>Е.Ю. Королева, <sup>1</sup>Д.А. Бурдин,  
<sup>1</sup>Ю.А. Кумзеров, <sup>2</sup>А.А. Сысоева, <sup>1</sup>А.В. Филимонов

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

<sup>2</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

## ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТА ПАЛЛАДИЙ – НИТРИТ НАТРИЯ В ПОРИСТОМ СТЕКЛЕ

В работе исследован композит на основе нанопористого стекла, в поры которого внедрены частицы палладия (примерно 10 % от объема пор), а оставшееся пространство заполнено сегнетоэлектриком – нитритом натрия. Исследованы и проанализированы температурные и дисперсионные зависимости диэлектрического отклика исследуемого нанокompозита, содержащего частицы металла и не содержащего. Обнаружено, что созданный нанокompозит Pd–NaNO<sub>2</sub> (металл – сегнетоэлектрик) обладает высокой эффективной диэлектрической проницаемостью (до 10<sup>9</sup>). Проводимость на постоянном токе композита с нитритом натрия и металлическими частицами более чем на порядок превышает таковую для чистого нитрита натрия, что связано, по-видимому, с появлением дополнительной электронной проводимости.

НАНОКОМПОЗИТ, ПОРИСТОЕ СТЕКЛО, СЕГНЕТОЭЛЕКТРИК, ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ОТКЛИК.

### Введение

Композитные материалы, которые состоят из нескольких взаимодействующих между собой на наноуровне подсистем, обладающих разными свойствами (магнитные, сегнетоэлектрические, диэлектрические и т. п.), привлекают все большее внимание исследователей всего мира в связи с их уникальными физическими свойствами и широкими перспективами их применения в микроэлектронике. Один из способов создать такие материалы – внедрить активные составляющие в природные и искусственные пористые структуры с характерным размером пор порядка единиц и десятков нанометров. В качестве нанопористых матриц можно использовать искусственные опалы, хризотилловые асбесты, пористые стекла. В наноструктурированном состоянии свойства каждой из подсистем – сегнетоэлектриков в нанопористых матрицах (например, нитрата калия KNO<sub>3</sub> и нитрита натрия в NaNO<sub>2</sub>), а также металлов и их соединений (в частности палладия Pd, оксида железа Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>), внедренных в нанопористые матрицы, – достаточно хорошо изучены по отдельности.

Нитрит натрия является прекрасным модельным объектом для исследования свойств наноструктурированных сегнетоэлектриков. В силу хорошей смачиваемости он легко вводится в различные искусственные и природные пористые матрицы с различной геометрией, топологией и связностью пор. А возможность получения больших объемов подобных нанокompозитных материалов (НКМ) позволяет использовать для их изучения дополнительные методы, например рассеяние нейтронов, измерение теплоемкости, ЯМР и т. п. Такие исследования, в том числе и исследование диэлектрического отклика, проводились для НКМ с нитритом натрия на основе пористых стекол [1 – 9], опалов [10], хризотилловых асбестов [11] и мезопористых структур MCM-41 и SBA-15 [12]. Для данных НКМ были обнаружены не только гигантский рост диэлектрической проницаемости на низких частотах [1, 5, 10] и значительное увеличение проводимости в параэлектрической фазе [9, 13], но и смена рода фазового перехода (ФП) от первого ко второму при размерах нанокластера менее 50 нм [2, 8, 14]. Было также показано, что в высокотемпературной фазе возникает состояние

объемного предплавления, которое характеризуется значительным ростом амплитуд тепловых колебаний ионов [7], увеличением подвижности ионов натрия [6]. Для НКМ на основе пористых стекол наблюдалось понижение температуры сегнетоэлектрического ФП при уменьшении среднего диаметра пор [14].

Подробное исследование диэлектрических свойств пористых стекол с внедренными в их поры частицами металлического палладия было проведено группой Фельдмана [15]. Был обнаружен существенный рост проводимости композита на постоянном токе (DC-проводимость) при отсутствии связанных металлических кластеров. Концентрация палладия составляла менее 10 % от объема пор. Величина DC-проводимости составляла от  $10^{-12}$  до  $10^{-9}$  См/м.

При внедрении не одной, а нескольких активных компонент в матрицу, с сохранением большой площади контакта между ними в ограниченной геометрии, есть основания ожидать появления уникальных эффектов, вызванных межфазным взаимодействием на наноуровне. Представляет интерес выяснить, какими макроскопическими свойствами будут обладать нанокомпозиты, состоящие из нескольких взаимодействующих между собой подсистем с различными физическими свойствами.

В данной работе исследуются диэлектрические свойства впервые созданного композита на основе пористого стекла, в поры которого внедрены одновременно частицы металла – палладия и сегнетоэлектрика – нитрита натрия.

#### Образцы и методика эксперимента

Пористые стекла были получены из стандартного натриево-боросиликатного стекла. При нагревании исходных стекол до температуры порядка  $550^{\circ}\text{C}$  происходит спиновальное фазовое расслоение на две фазы: одна из них – химически нестойкая, обогащенная бором, а вторая – практически чистый диоксид кремния  $\text{SiO}_2$ . Затем в процессе травления удаляется химически нестойкая фаза и остается пористая матрица из практически чистого  $\text{SiO}_2$  с системой взаимопроникающих пор со средним диа-

метром  $7 \pm 1$  нм и пористостью 23 %. После этого полученные матрицы отжигали на воздухе при температуре  $450^{\circ}\text{C}$  в течение 7 ч. Диаметр пор определяли по данным ртутной порометрии и сорбции-десорбции азота.

На следующем этапе приготовления образцов пористую матрицу насыщали раствором хлористого палладия в соляной кислоте. После такой пропитки образцы пористых стекол сушили на воздухе при комнатной температуре, чтобы избежать растрескивания. Восстановление хлористого палладия проводили в потоке водорода при температуре  $330^{\circ}\text{C}$  в течение 5–8 ч до полного испарения соляной кислоты и стабилизации массы образца. Для получения большего заполнения пор процедуру повторяли три раза. После каждого цикла поверхность образцов механически очищали от массивного палладия. Количество палладия в пористых стеклах составляло приблизительно 10 % от объема пор. Средний (эффективный) размер наночастиц палладия, согласно данным дифракции рентгеновского излучения (по уширению брэгговских рефлексов), составил  $11 \pm 1$  нм. Важно отметить, что он оказался большим, чем средний диаметр пор матрицы, указанный выше. Это различие объясняется предпочтительным расположением частиц палладия в местах пересечения пор матрицы стекла.

Высушенные пластины матрицы с частицами палладия помещали в расплав нитрита натрия и выдерживали в нем в течение 24 ч, что позволяло получить практически полное заполнение пор (90 % от их объема). Далее поверхность шлифовали для удаления остатков массивного материала.

Комплексный диэлектрический отклик нанокомпозита исследовали с помощью широкополосного диэлектрического спектрометра Novocontrol BDS'80 в широких температурном ( $300 - 500$  К) и частотном ( $0,1$  Гц –  $10$  МГц) диапазонах. Все образцы предварительно прогревали для удаления остаточной воды.

#### Экспериментальные результаты и их обсуждение

Диэлектрические свойства композита изучались последовательно на всех эта-



пах его приготовления с целью выявления вкладов от различных подсистем в результирующий отклик. На рис. 1 представлены температурные зависимости вещественной части диэлектрической проницаемости и проводимости исходного пустого пористого стекла, которое использовалось при получении нанокompозита. Перед проведением измерений образец тщательно сушили в парах азота в течение 2 ч при температуре 200 °С с целью удаления паров воды из пор, которые, как известно, существенно влияют на диэлектрические свойства. Видно, что образец обладает характерными для стекол значениями диэлектрической проницаемости и ярко выраженной низкочастотной дисперсией. При этом на частотах свыше 1 кГц практически во всем температурном диапазоне значение  $\epsilon'$  остается постоянным. Можно

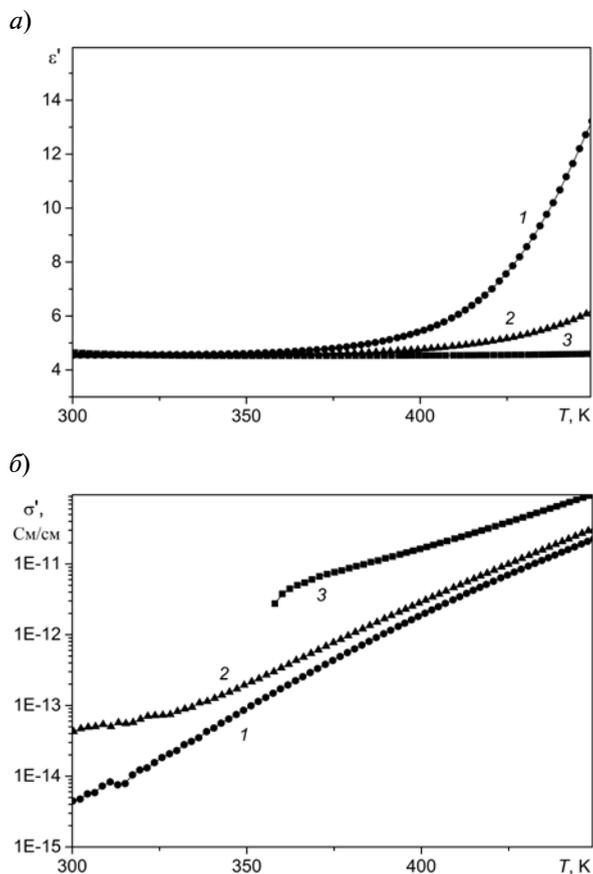


Рис. 1. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости (а) и проводимости (б) пористого стекла (7 нм). Значения измерительной частоты, Гц: 1,2 (1), 10 (2), 1200 (3)

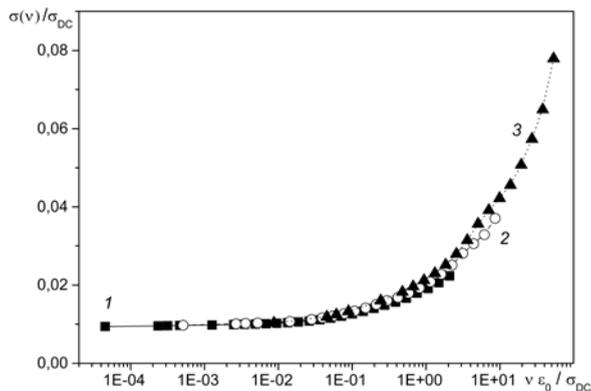


Рис. 2. Зависимость нормированной проводимости пористого стекла как функция нормированной (на величину DC-проводимости) частоты для разных температур, °С: 200 (1), 250 (2), 300 (3)

также отметить сильный рост проводимости с температурой. Подробный анализ поведения диэлектрического отклика таких систем представлен в работах [16, 17].

Те же данные, что и на рис. 1, б, приведены на рис. 2 после масштабирования проводимости  $\sigma(v)$  и частоты измерительного сигнала  $v$  на величину  $\sigma_{DC}$  в стекле. Видно, что все экспериментальные точки лежат практически на одной кривой, т. е.  $\sigma(v) / \sigma_{DC}$  представляет собой функцию от безразмерного аргумента  $(v \cdot \epsilon_0 / \sigma_{DC})$ , где  $\epsilon_0$  — диэлектрическая проницаемость вакуума. Температурно-частотная инвариантность формы кривой проводимости является известным экспериментальным фактом для нетравленных стекол различных составов, содержащих ионы щелочных металлов (см., например, работы [18 – 20]). Однако, как видно, такое поведение ионной проводимости наблюдается и в пористых боросиликатных стеклах, в которых вытравлена щелочная фаза. Отсюда следует, что либо данное соотношение является универсальным (не зависит от типа носителя заряда) для стекол, либо даже после травления ионы натрия присутствуют в матрице в достаточном количестве, чтобы вносить значительный вклад в проводимость образца.

На следующем этапе исследований, как уже было указано выше, в поры полученной матрицы внедряли металлические ча-

стицы палладия. Подробное исследование диэлектрических свойств пористых стекол с внедренными в их поры частицами металлического палладия было представлено ранее в работе группы Фельдмана [15]. Было показано, что в такой системе имеют место два релаксационных процесса: один из них связан с релаксацией носителей в аморфной матрице стекла, а другой – с активацией прыжковой электронной проводимости между частицами палладия. При этом за счет появления дополнительного типа проводимости увеличилась DC-проводимость образца. Величина DC-проводимости составляла, согласно данным работы [15], от  $10^{-12}$  до  $10^{-9}$  См/м. Энергия активации проводимости была при этом порядка 1 эВ, что превышало соответствующее значение для незаполненной матрицы. Полученные нами композиты обладали сходными диэлектрическими свойствами, поэтому в данной работе не приводятся.

На рис. 3 представлена зависимость диэлектрического отклика композита от температуры и измерительной частоты после заполнения его нитритом натрия. Из трехмерной зависимости хорошо виден экспоненциальный рост диэлектрической проницаемости композита с повышением температуры и с понижением измерительной частоты. На низких частотах наблюдаются крайне высокие значения диэлектрического отклика, что характерно также для композита пористое стекло – нитрит натрия и вообще для нанопористых структур, заполняемых сегнетоэлектриком [4]. На графике отчетливо видны два релаксационных процесса, для которых положение максимумов диэлектрической постоянной смещается с температурой.

Для того чтобы определить вклад металла в эффективный диэлектрический отклик композита, мы провели сравнение температурных и частотных зависимостей диэлектрической проницаемости и проводимости композитов, содержащих наночастицы палладия и не содержащих.

На рис. 4 представлены температурные зависимости вещественной и мнимой частей диэлектрической проницаемости пористого стекла с сегнетоэлектриком и такой же

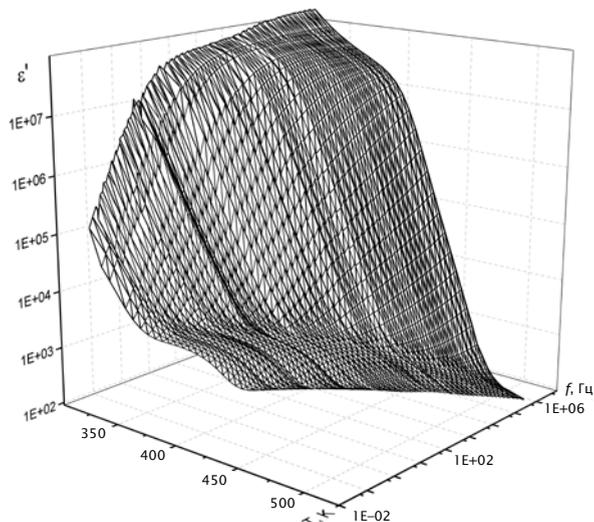


Рис. 3. Зависимость диэлектрической проницаемости композита от температуры и измерительной частоты

матрицы с сегнетоэлектриком и частицами палладия, на нескольких измерительных частотах. Соответствующие зависимости на одинаковых частотах для композитов, содержащих палладий и без него, представлены на рисунке для большей наглядности одинаковыми символами, только для стекла без палладия – пустыми, а для стекла с палладием – затушеванными. Хорошо видно, что при повышении температуры в исследуемой области и вещественная, и мнимая части диэлектрической проницаемости возрастают примерно на порядок.

Если же проанализировать дисперсионные зависимости (рис. 5), то видно, что при низких температурах (около 350 К) наблюдается более заметный рост величин  $\epsilon'$  и  $\epsilon''$  в низкочастотной области, тогда как при более высоких температурах – в области более высоких измерительных частот. Таким образом, внедрение наночастиц металла, не связанных между собой, приводит к значительному росту как диэлектрической проницаемости, так и проводимости нанокompозита во всем исследованном частотном диапазоне.

На рис. 6 представлены температурные зависимости DC-проводимости  $\sigma_{DC}$  пористых стекол до и после их заполнения сегнетоэлектриком и металлическими ча-

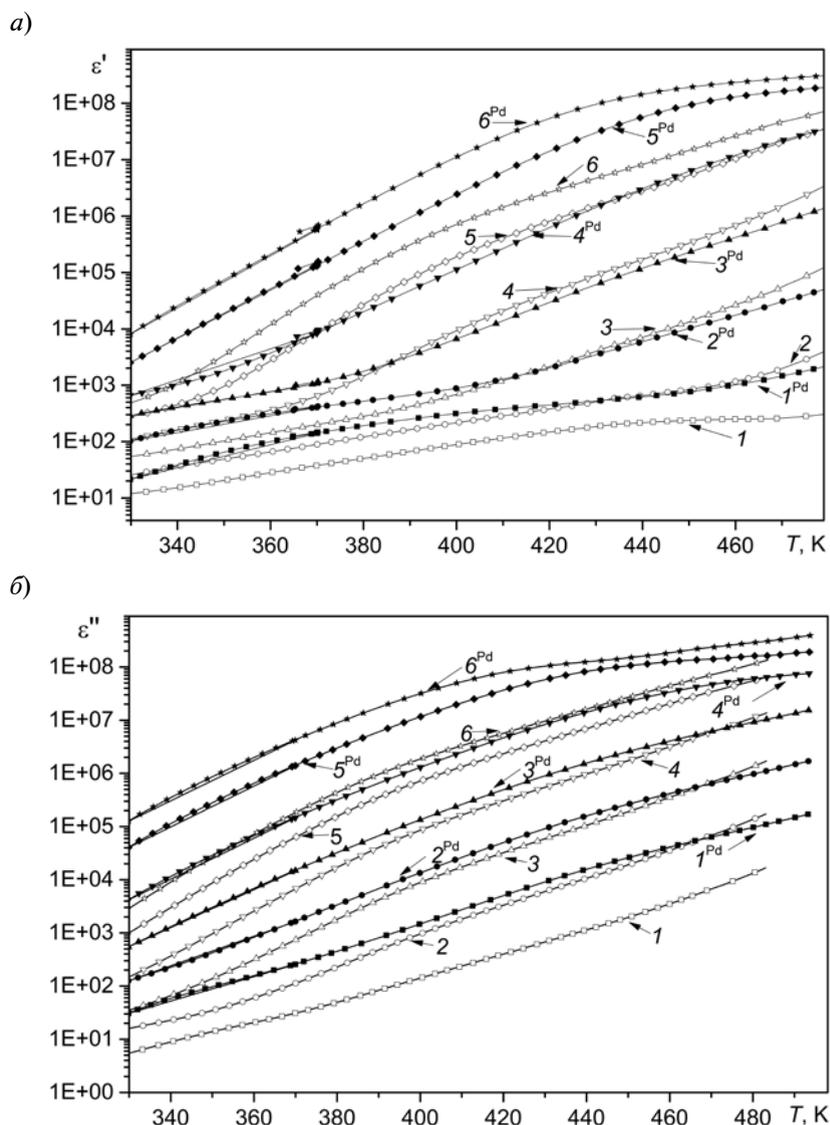


Рис. 4. Температурные зависимости вещественной (а) и мнимой (б) частей диэлектрической проницаемости пористого стекла с нитритом натрия ( $1 - 6$ ) и пористого стекла с палладием и нитритом натрия ( $1^{Pd} - 6^{Pd}$ ) на нескольких измерительных частотах, Гц: 0,4 ( $1, 1^{Pd}$ ), 1,3 ( $2, 2^{Pd}$ ), 13 ( $3, 3^{Pd}$ ), 140 ( $4, 4^{Pd}$ ), 1 500 ( $5, 5^{Pd}$ ), 15 000 ( $6, 6^{Pd}$ )

стицами (данные получены из предварительного анализа дисперсионных кривых). Полученные зависимости в области высоких температур хорошо аппроксимируются законом Аррениуса – Френкеля [21]:

$$\sigma_{DC} \cdot T = \sigma_0 \exp(-E_a / kT),$$

где  $\sigma_0$  – константа,  $E_a$  – энергия активации,  $T$  – температура,  $k$  – постоянная Больцмана.

Это означает, что процесс проводимости при высоких значениях температу-

ры имеет термоактивационный характер. Энергия активации DC-проводимости пористого стекла оказалась равной 1,1 эВ (диапазон значений проводимости составил  $10^{-10} - 10^{-8}$  См/см в области температур 400 – 480 К). Выше мы уже обсуждали возможную природу носителей заряда в данном образце. В наших пористых оксидных, как и во всех оксидных стеклах, фактически неподвижный анионный каркас заполняет большую часть пространства. Поскольку эта часть пространства не доступна под-

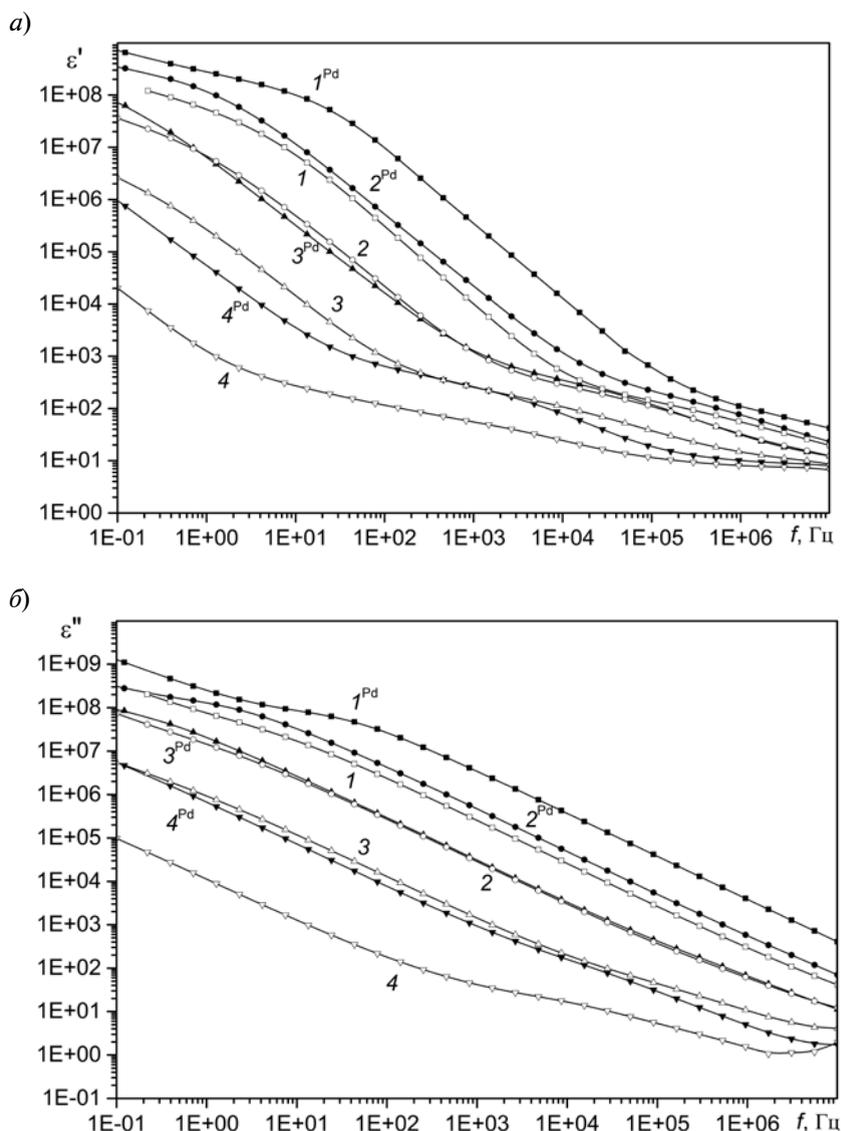


Рис. 5. Частотные зависимости вещественной (а) и мнимой (б) частей диэлектрической проницаемости пористого стекла с нитритом натрия (1 – 4) и пористого стекла с палладием и нитритом натрия ( $1^{Pd}$  –  $3^{Pd}$ ,  $5^{Pd}$ ) для нескольких температур, К: 350 (1,  $1^{Pd}$ ), 400 (2,  $2^{Pd}$ ), 450 (3,  $3^{Pd}$ ), 483 (4), 500 ( $5^{Pd}$ )

вижным катионам типа  $H^+$  или  $Na^+$ , они могут диффундировать только по достаточно разреженной сетке путей, сформированных неподвижным диоксидом кремния  $SiO_2$ . В такой модели способы транспорта частиц можно обсуждать в терминах теории протекания. Согласно этой теории, транспорт частиц на большие расстояния происходит по бесконечному кластеру, который представляет собой квазипериодическую сетку, узлами которой являются уже конеч-

ные кластеры. Прежде чем переместиться из одного кластера в другой, частица может достаточно долго совершать колебания в пределах конечного кластера. Можно предположить, что частотная зависимость проводимости определяется как раз такими кластерами, которые представляют собой области с динамической поляризацией и имеют разный размер и структуру. Теоретическое моделирование в данной области существенно осложняется тем фактом, что

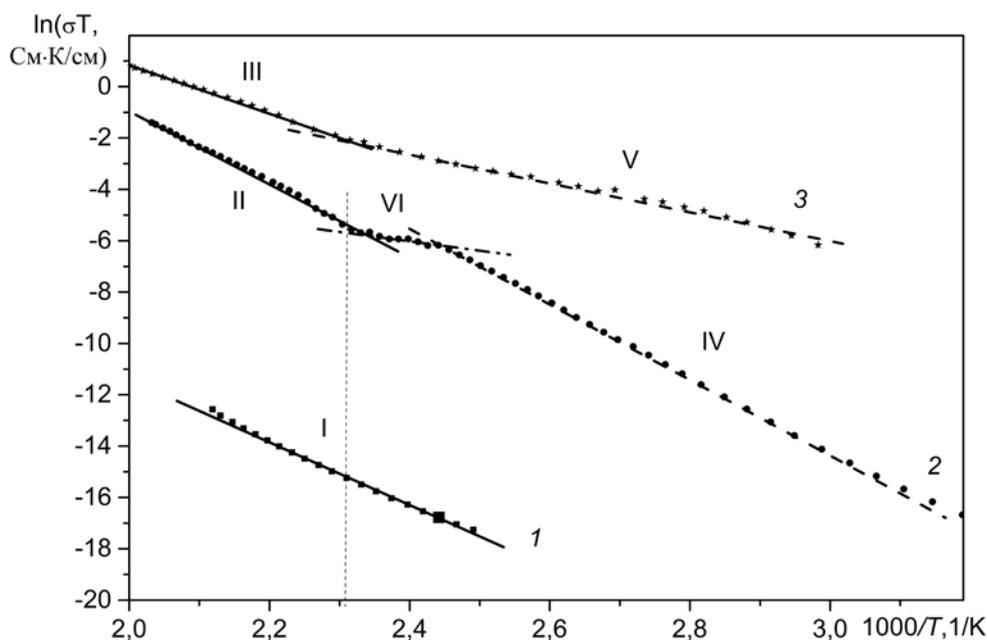


Рис. 6. Температурные зависимости DC-проводимости (символы) исходного пористого стекла (1), а также этих стекол, заполненных  $\text{NaNO}_2$  (2) и  $\text{NaNO}_2$  с частицами Pd (3).

Прямые линии – аппроксимация зависимостей законом Аррениуса – Френкеля.

Значения энергий активации DC-проводимости для различных участков прямых, эВ: 1,08 (I), 1,2 (II), 0,80 (III), 1,26 (IV), 0,48 (V), 0,42 (VI).

Вертикальный пунктир соответствует температуре фазового перехода 435 К

пористые стекла относятся к системам с фрактальной размерностью. Но можно отметить, что ионная проводимость в рамках модели протекания неоднократно обсуждалась в литературе (см., например, работы [22, 23]). Кроме того, такая модель может обеспечить наблюдаемую на практике (см. рис. 1, б) дисперсию проводимости в широком диапазоне частот.

При заполнении матрицы сегнетоэлектриком  $\text{NaNO}_2$  DC-проводимость существенно возрастает ( $10^{-5} - 10^{-3}$  См/см в области температур 420 – 500 К). Энергия активации также увеличивается до 1,2 эВ. Здесь логично предположить, что носителями заряда выступают ионы  $\text{Na}^+$ . При этом (как и в случае с пустым пористым стеклом) вопрос о механизме транспорта ионов остается открытым. Температурная зависимость DC-проводимости пористой матрицы, заполненной нитритом натрия, имеет достаточно сложный вид: она претерпевает два излома и образует три линейных участка со значениями энергии активации

1,20, 0,48 и 1,26 эВ. Аналогичная ситуация наблюдалась и в объемном нитрите натрия, согласно данным работы [24], где изучали образец из прессованного порошка. Энергии активации DC-проводимости на соответствующих температурных участках в объемном образце нитрита натрия  $\text{NaNO}_2$  были 1,64, 2,07 и 1,22 эВ, а температуры фазовых переходов –  $T_c = 436,5$  и  $448,0$  К, где последняя соответствует наивысшей точке ФП (образец поликристаллический). Таким образом, в сегнетоэлектрике  $\text{NaNO}_2$ , внедренном в ограниченную геометрию, происходит снижение значений энергии активации во всем температурном диапазоне и смещение температуры фазового перехода (она составила 435 К) в область более низких температур; такая закономерность уже наблюдалась для нанокompозитного нитрита натрия [14].

В случае стекла, заполненного сегнетоэлектриком с частицами палладия, значения DC-проводимости еще выше ( $10^{-3} - 10^{-2}$  См/см в области температур 440 – 500 К),

но энергия активации процесса в области высоких температур при этом уменьшается до 0,80 эВ. Для данного образца зависимость также испытывает излом в районе 435 К, что указывает на наличие фазового перехода в нитрите натрия, а также на наиболее вероятную природу основных носителей заряда в данном образце – на ионы натрия. Интересно отметить отсутствие явного второго излома на анализируемой зависимости, как и на полученной для образца, не содержащего палладий. Возможно, указанное отсутствие связано с размытостью по температуре ФП для данного образца. В работе [15] авторы получили значение энергии активации DC-проводимости в 1 эВ для стекла с частицами палладия (стекло не содержало нитрита натрия) и указали при этом, что оно соответствует механизму электронной прыжковой проводимости. В нашем случае дополнительный вклад в полученное значение проводимости от прыжковой электронной проводимости мог бы дать объяснение повышению значений проводимости относительно соответствующих значений для стекла, не содержащего палладий.

### Заключение

Впервые создан наноккомпозит Pd–NaNO<sub>2</sub> (металл – сегнетоэлектрик) в по-

ристом стекле с высокой эффективной диэлектрической проницаемостью (до 10<sup>9</sup>). Проанализированы температурные и дисперсионные зависимости диэлектрического отклика наноккомпозита, содержащего частицы металла, и не содержащего. Внедрение в матрицу наночастиц металла, не связанных между собой, привело к увеличению как вещественной, так и мнимой частей диэлектрической проницаемости композита почти в десять раз. Получена температурная зависимость DC-проводимости композита с палладием и проведено ее сравнение с аналогичной зависимостью для наноккомпозита, не содержащего палладий. Установлено, что DC-проводимость композита с металлическими частицами более чем на порядок превышает проводимость чистого нитрита натрия в стекле. Эффект увеличения DC-проводимости связан, по видимому, с появлением дополнительной электронной проводимости. Энергии активации в образцах, содержащих палладий, уменьшаются, по сравнению с образцами без палладия, во всем исследованном температурном диапазоне.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №14-22-00136).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Colla E.V., Koroleva E.Yu., Kumzerov Yu. A., Savenko B.N. Ferroelectric phase transitions in materials embedded in porous media. *Ferroelectric Letters*. 1996. Vol. 20, pp.143-147.
2. Kutnjak Z., Vodopivec B., Blinc R., Fokin A.V., Kumzerov Yu.A., Vakhrushev S.B. Calorimetric and dielectric studies of ferroelectric sodium nitrite confined in a nanoscale porous glass matrix. *Journal of Chemical Physics*. 2005. Vol. 123, pp. 084708-1-084708-5.
3. Tien C., Charnaya E.V., Lee M.K., Baryshnikov S.V., Sun S.Y., Michel D., Böhlmann W. Coexistence of melted and ferroelectric states in sodium nitrite within mesoporous sieves. *Physical Review B*. 2005. Vol. 72. P. 104105.
4. Барышников С.В., Стукова Е.В., Чарная Е.В., Tien C., Lee M.K., Böhlmann W., Michel D. Диэлектрические и ЯМР-исследования нанопористых матриц, заполненных нитритом натрия // ФТТ. 2006. Т. 48 № 3. С. 551– 557.
5. Colla E.V., Fokin A.V., Kumzerov Yu.A. Ferroelectric properties of nanosize KDP particles. *Solid State Communications*. 1997. Vol. 103, pp. 127-130.
6. Vakhrushev S.B., Kumzerov Yu.A., Fokin A.V., Naberezhnov A.A., Zalar B., Lebar A., Blinc R. 23Na spin-lattice relaxation of sodium nitrite in confined geometry. *Physical Review B*. 2004. Vol. 70. P. 132102-1.
7. Golosovsky I.V., Fokin A.V., Kumzerov Yu.A., Kurbakov A.I., Naberezhnov A.A., Okuneva N.M., Vakhrushev S.B. Temperature evolution of sodium nitrite structure in a restricted geometry. *Physical Review Letters*. 2002. Vol. 89. P. 175503-1.
8. Naberezhnov A., Fokin A., Kumzerov Yu., Sotnikov A., Vakhrushev S., Dorner B. Structure and properties of confined sodium nitrite. *European Physical Journal. E*. 2003. Vol.12, pp. s21-s24.
9. Kinka M., Banys J., Naberezhnov A. Dielectric properties of sodium nitrite confined in porous glass. *Ferroelectrics*. 2007. Vol. 348, pp. 67-74.
10. Pan'kova S.V., Poborchii V.V., Solov'ev V.G.



The giant dielectric constant of opal containing sodium nitrate nanoparticles. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1996. Vol. 8, pp. L203-L206.

11. Borisov S., Hansen T., Kumzerov Yu., Naberezhnov A., Simkin V., Smirnov O., Sotnikov A., Tovar M., Vakhrushev S. Neutron diffraction study of  $\text{NaNO}_2$  ferroelectric nanowires. *Physica B*. 2004. Vol. 350. Iss. 1, pp. E1119-E1121.

12. Барышников С.В., Чарная Е.В., Cheng Tien, Michel D., Андриянова Н.П. Стукова Е.В. Диэлектрические параметры мезопористых решеток, заполненных  $\text{NaNO}_2$  // ФТТ. 2007. Т. 49, № 4. С. 751–755.

13. Golosovsky I., Dvornikov V., Hansen T., Fokin A., Koroleva E., Korotkov L., Naberezhnov A., Tovar M. Structure and conductivity of nanostructured sodium nitrite. *Solid State Phenomena*. 2006. Vol. 115, pp. 221-228.

14. Вахрушев С.Б., Королева Е.Ю., Кумзеров Ю.А., Набережнов А.А., Фокин А.В., Коротков Л.Н., Товар М., Colla E.V. Структура и свойства нитрита натрия в условиях искусственно ограниченной геометрии // Нанотехника. 2006. Вып. 1. С. 18–25.

15. Trakhtenberg L.I., Kozhushner M.A., Gerasimov G.N., Gromov V.F., Bodneva V.L., Antropova T.V., Axelrod E., Greenbaum (Gutina) A., Feldman Yu. Non-phenomenological description of complex dielectric permittivity of metal-containing porous glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2010. Vol. 356. No. 11-17, pp. 642-646.

16. Gutina A., Axelrod E., Puzenko A., Rysiakiewicz-Pasek E., Kozlovich N., Feldman Yu.

Dielectric relaxation of porous glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 1998. Vol. 235-237, pp. 302-307.

17. Gutina A., Antropova T., Rysiakiewicz-Pasek E., Virnik K., Feldman Yu. Dielectric relaxation in porous glasses. *Microporous and Mesoporous Materials*. 2003. Vol. 58, pp. 237-254.

18. Martin S.W., Angell C.A. Dc and ac conductivity in wide composition range  $\text{Li}_2\text{O}-\text{P}_2\text{O}_5$ . *Journal of Non-Crystalline Solids*. 1986. Vol. 83, No. 1, pp. 185-207.

19. Syutkin V.M., Tolkatchev V.A., Dmitryuk A.V., Paramzina S.E., Uvarov N.F. On the mechanism of electrical relaxation in  $\text{Na}^+$ -conductive phosphate glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 1997. Vol. 220. No. 2, pp. 280-290.

20. Roling B., Happe A., Funke K., Ingram M.D. Carrier concentrations and relaxation spectroscopy: new information from scaling properties of conductivity spectra in ionically conducting glasses. *Physical Review Letters*. 1997. Vol. 78. No. 11, pp. 2160-2163.

21. Иванов-Шиц А.К., Мурич И.В. Ионика твердого тела: В 2 т. Т. 1. СПб.: Изд-во С.-Петербургского ун-та, 2000. 616 с.

22. Ingram M.D. Ionic conductivity and glass structure. *Philosophical Magazine*. 1989. Vol. 60. No. 6, pp. 729-740.

23. Hunt A. Transport in ionic conducting glasses: II. Scaling relations and approximate power law behavior. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1992. Vol. 4. No. 24, pp. 5371-5381.

24. Ahmed S.A., Ali M.H. Electrical and thermal studies of  $\text{NaNO}_2$ . *Physica Status Solidi (b)*. 1996. Vol. 194. Iss. 2, pp. 517-524.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**КОРОЛЕВА Екатерина Юрьевна** — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.  
e.yu.koroleva@mail.ioffe.ru

**БУРДИН Дмитрий Андреевич** — студент ИФНиТ Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.  
espanol2006@yandex.ru

**КУМЗЕРОВ Юрий Александрович** — доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.  
yu.kumzerov@mail.ioffe.ru

**СЫСОЕВА Анна Августовна** — научный сотрудник Физико-технического института имени А.Ф. Иоффе РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26.  
annasysoeva07@mail.ru

**ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович** – доктор физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

filimonov@rphf.spbstu.ru

*Koroleva E.Yu., Burdin D.A., Kumzerov Yu.A., Sysoeva A.A., Filimonov A.V.*  
**DIELECTRIC PROPERTIES OF Pd-NaNO<sub>2</sub> NANOCOMPOSITE IN POROUS GLASS.**

We have studied composite on the base of nanoporous glass into the pores of which palladium particles (about 10% of the pore volume) are embedded, and the remaining space is filled with ferroelectric – sodium nitrite. The temperature and frequency dependences of the dielectric response for the nanocomposite with metal particles and without it were measured and analyzed. The Pd-NaNO<sub>2</sub> nanocomposite (metal – ferroelectric) created was found to have high effective dielectric permittivity (up to 10<sup>9</sup>). DC-conductivity of the composite with metal particles was more than an order of magnitude greater than that of pure sodium nitrite in the porous glass, due, apparently, to the appearance of additional electronic conductivity.

NANOCOMPOSITE, POROUS GLASS, FERROELECTRICS, DIELECTRIC RESPONSE.

**REFERENCES**

1. Colla E.V., Koroleva E.Yu., Kumzerov Yu.A., Savenko B.N. Ferroelectric phase transitions in materials embedded in porous media. *Ferroelectr. Lett.*, 1996, Vol. 20, pp.143-147.
2. Kutnjak Z., Vodopivec B., Blinc R., Fokin A.V., Kumzerov Yu.A., Vakhrushev S.B. Calorimetric and dielectric studies of ferroelectric sodium nitrite confined in a nanoscale porous glass matrix. *J. Chem. Phys.*, 2005, Vol. 123, pp. 084708-1-084708-5.
3. Tien C., Charnaya E.V., Lee M.K., Baryshnikov S.V., Sun S.Y., Michel D., Böhlmann W. Coexistence of melted and ferroelectric states in sodium nitrite within mesoporous sieves. *Phys. Rev. B*, 2005, Vol. 72, 104105.
4. Baryshnikov S.V., Stukova E.V., Charnaya E.V., Tien C., Lee M.K., Böhlmann W., Michel D. Dielektricheskie i YaMR-issledovaniya nanoporistykh matrits, zapolnennykh nitritom natriya. *FTT*, 2006, No. 48(3), pp. 551-557. (rus)
5. Colla E.V., Fokin A.V., Kumzerov Yu.A. Ferroelectrics properties of nanosize KDP particles. *Sol. State Commun.*, 1997, Vol.103, pp. 127-130.
6. Vakhrushev S.B., Kumzerov Yu.A., Fokin A.V., Naberezhnov A.A., Zalar B., Lebar A., Blinc R. 23Na spin-lattice relaxation of sodium nitrite in confined geometry. *Phys. Rev. B*, 2004, Vol. 70, pp. 132102-1.
7. Golosovsky I.V., Fokin A.V., Kumzerov Yu.A., Kurbakov A.I., Naberezhnov A.A., Okuneva N.M., Vakhrushev S.B. Temperature evolution of sodium nitrite structure in a restricted geometry. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, Vol. 89, pp. 175503-1.
8. Naberezhnov A., Fokin A., Kumzerov Yu., Sotnikov A., Vakhrushev S., Dorner B. Structure and properties of confined sodium nitrite. *Europ. Phys. J. E*, 2003, Vol.12, pp. s21-s24.
9. Kinka M., Banys J., Naberezhnov A., Dielectric properties of sodium nitrite confined in porous glass. *Ferroelectrics*, 2007, Vol. 348, pp. 67-74.
10. Pan'kova S.V., Poborchii V.V., Solov'ev V.G. The giant dielectric constant of opal containing sodium nitrate nanoparticles. *J. Phys.: Cond. Matt.*, 1996, Vol. 8, pp. L203-L206.
11. Borisov S., Hansen T., Kumzerov Yu., Naberezhnov A., Simkin V., Smirnov O., Sotnikov A., Tovar M., Vakhrushev S. Neutron diffraction study of NaNO<sub>2</sub> ferroelectric nanowires. *Phys. B*, 2004, Vol. 350. Iss.1, pp. E1119-E1121.
12. Baryshnikov S.V., Charnaya E.V., Cheng Tien, Michel D., Andriyanova N.P. Stukova E.V. Dielektricheskie parametry mezoporistykh reshetok, zapolnennykh NaNO<sub>2</sub>. *FTT*, 2007, No. 49 (4), pp. 751-755. (rus)
13. Golosovsky I., Dvornikov V., Hansen T., Fokin A., Koroleva E., Korotkov L., Naberezhnov A., Tovar M. Structure and conductivity of nanostructured sodium nitrite. *Sol. St. Phen.*, 2006, Vol. 115, pp. 221-228.
14. Vakhrushev S.B., Koroleva E.Yu., Kumzerov Yu.A., Naberezhnov A.A., Fokin A.V., Korotkov L.N., Tovar M., Colla E.V. Struktura i svojstva nitrita natriya v usloviyakh iskusstvenno ogranichennoj geometrii. *Nanotekhnika*, 2006, No. 1, pp. 18-25. (rus)
15. Trakhtenberg L.I., Kozhushner M.A., Gerasimov G.N., Gromov V.F., Bodneva V.L., Antropova T.V., Axelrod E., Greenbaum (Gutina) A., Feldman Yu. Non-phenomenological description of complex dielectric permittivity of metal-containing porous glasses, *J. Non-Cryst. Sol.*, 2010, Vol. 356 No. 11-17, pp. 642-646.
16. Gutina A., Axelrod E., Puzenko A., Rysiakiewicz-Pasek E., Kozlovich N., Feldman Yu. Dielectric relaxation of porous glasses. *J. Non-Cryst. Sol.*, 1998, Vol. 235-237, pp. 302-307.

17. Gutina A., Antropova T., Rysiakiewicz-Pasek E., Virnik K., Feldman Yu. Dielectric relaxation in porous glasses. *Microp. Mesop. Mater.*, 2003, Vol. 58, pp. 237-254.
18. Martin S.W., Angell C.A. Dc and ac conductivity in wide composition range  $\text{Li}_2\text{O}-\text{P}_2\text{O}_5$ . *J. Non-Cryst. Sol.*, 1986, Vol. 83, No. 1, pp. 185-207.
19. Syutkin V.M., Tolkatchev V.A., Dmitryuk A.V., Paramzina S.E., Uvarov N.F. On the mechanism of electrical relaxation in  $\text{Na}^+$ -conductive phosphate glasses. *J. Non-Cryst. Sol.*, 1997, Vol. 220, No. 2, pp. 280-290.
20. Roling B., Happe A., Funke K., Ingram M.D. Carrier concentrations and relaxation spectroscopy: new information from scaling properties of conductivity spectra in ionically conducting glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 1997, Vol. 78, No. 11, pp. 2160-2163.
21. Ivanov-Shitz A.K., Murin I.V. *Ionika tverdogo tela v 2 tt.* Vol. 1. SPb, Izdatelstvo SPbSU, 2000, 616 p.
22. Ingram M.D. Ionic conductivity and glass structure. *Philosophical Magazine*, 1989, Vol. 60, No. 6, pp. 729-740.
23. Hunt A. Transport in ionic conducting glasses: II. Scaling relations and approximate power law behavior. *J. of Phys.: Cond. Matt.*, 1992, Vol. 4, No. 24, pp. 5371-5381.
24. Ahmed S.A., Ali M.H. Electrical and thermal studies of  $\text{NaNO}_2$ . *Phys. Stat. Sol. (b)*. 1996. Vol. 194. Iss. 2, pp. 517-524.

#### THE AUTHORS

**KOROLEVA Ekaterina Yu.**

*St. Petersburg Polytechnic University*  
29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.  
e.yu.koroleva@mail.ioffe.ru

**BURDIN Dmitry A.**

*St. Petersburg Polytechnic University*  
29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.  
espanol2006@yandex.ru

**KUMZEROV Yuri A.**

*St. Petersburg Polytechnic University*  
29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.  
yu.kumzerov@mail.ioffe.ru

**SYSOEVA Anna A.**

*Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Science*  
26, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.  
annasysoeva07@mail.ru

**FILIMONOV Alexei V.**

*St. Petersburg Polytechnic University*  
29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.  
filimonov@rphf.spbstu.ru

УДК 538.913

Д.А. Андроникова<sup>1, 2</sup>, Р.Г. Бурковский<sup>1</sup>,  
С.Б. Вахрушев<sup>1, 2</sup>, А.В. Филимонов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,

<sup>2</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В ЦИРКОНАТЕ СВИНЦА

В данной работе проведено моделирование низкоэнергетического фононного спектра в модельном антисегнетоэлектрике – цирконате свинца – с использованием пятимодовой модели Вакса, учитывающей флексоэлектрическое взаимодействие. Установлено, что цирконат свинца находится в состоянии, близком к неустойчивому.

ЦИРКОНАТ СВИНЦА, ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД, АНТИСЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСТВО, ФЛЕКСОЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ.

### Введение

История исследований цирконата свинца  $\text{PbZrO}_3$  берет свое начало с 1951 года, когда на основе результатов измерения его диэлектрических свойств [1] фазовый переход в цирконате свинца (ЦС) был определен как антисегнетоэлектрический. Свойства модельного антисегнетоэлектрика ЦС продолжают активно исследовать до наших дней. В последнее время, в связи с расширением возможностей применения антисегнетоэлектриков [2], наблюдается рост интереса к материалам подобного рода. Внимание исследователей к ЦС объясняется еще и тем, что он входит важнейшей составляющей в известный своими уникальными сегнетоэлектрическими и пьезоэлектрическими свойствами цирконат-титанат свинца. Однако, несмотря на технологическую важность и продолжительную историю изучения ЦС, механизмы формирования антисегнетоэлектрического состояния в ЦС остаются не до конца изученными.

Фазовый переход в ЦС обычно описывают сложным параметром порядка, который представляет собой суперпозицию нормальных мод, соответствующих разным точкам зоны Бриллюэна  $(R, \Sigma)$  [3]. Перестройку структуры в ЦС, приводящую к антисегнетоэлектрической фазе, можно представить как комбинацию смещений в двух модах решетки. Первая мода отвечает антипараллельным смещениям ионов свинца;

ее можно охарактеризовать волновым вектором  $\mathbf{q}_\Sigma = 2\pi / a_p (1/4, 1/4, 0)$ , где  $a_p$  – постоянная ячейки в параэлектрической фазе.  $R$ -мода отвечает антифазным вращениям кислородных октаэдров и описывается волновым вектором  $\mathbf{q}_R = 2\pi / a_p (1/2, 1/2, 1/2)$ .

Результаты измерений диэлектрических свойств [4] указывают на существование в ЦС сегнетоэлектрической неустойчивости, которая приводит к смягчению оптического фонона в центре зоны Бриллюэна. В работе [5] было показано, что мягкая сегнетоэлектрическая мода в ЦС проявляется в виде центрального пика в фононном спектре, причем интенсивность этого пика резко возрастает при приближении к фазовому переходу, а также в виде фононной оптической ветви, частота которой практически не зависит от температуры. Такая картина может быть описана как результат взаимодействия мягкого оптического фонона с неким некритическим релаксационным процессом.

Сегнетоэлектрическая нестабильность за счет флексоэлектрического межмодового взаимодействия вызывает понижение поперечной акустической ветви. В результате в ЦС наблюдается аномально низкая и практически пологая поперечная акустическая фононная ветвь, распространяющаяся в направлении  $[1\ 1\ 0]$  и имеющая поляризацию в направлении  $[1\ -1\ 0]$  (поляризация

“*in plane*”, т. е. в плоскости распространения фонона). При приближении к температуре фазового перехода частота данной поперечной акустической фононной ветви понижается равномерно во всей зоне Бриллюэна. Вследствие такого межмодового взаимодействия кристалл оказывается в состоянии, очень близком к переходу в несоразмерную фазу. Однако ЦС не испытывает перехода в указанную фазу в силу так называемого процесса «переброса» (*umklapp*), в результате которого возникает модуляция решетки с соразмерным волновым вектором  $\mathbf{q}_2$ .

Существование межмодового взаимодействия в перовскитоподобных сегнетоэлектриках давно является предметом обсуждения. В квантовом параэлектрике  $\text{KTaO}_3$  (КТО) межмодовое взаимодействие приводит к тому, что мягкая оптическая мода вызывает равномерное понижение частоты акустической ветви по всей зоне Бриллюэна. В результате в спектрах, помимо смягчающейся оптической ветви, наблюдается понижение частоты поперечной акустической ветви [6]. В работе [7] было проведено моделирование дисперсионных зависимостей в КТО с учетом взаимодействия двух низкочастотных мод: оптической поперечной (ТО) и акустической поперечной (ТА). Совпадение результатов расчета с экспериментальными данными показало, что понижение акустической ветви этого квантового параэлектрика может быть вызвано взаимодействием со смягчающейся оптической фононной ветвью. Авторами [7] была показана возможность возникновения неустойчивости решетки с ненулевым волновым вектором  $\mathbf{q}_{crit}$ , соответствующим нулевой частоте ТА-моды, прежде чем частота ТО-фонона при  $\mathbf{q} = 0$  станет равной нулю. В таком случае происходит переход в фазу, которая характеризуется наличием синусоидально модулированных смещений с периодом модуляции, определяемым волновым вектором  $\mathbf{q}_{crit}$ . Таким образом, если межмодовое взаимодействие оказывается достаточно большим, то возможно понижение до нуля значения частоты фононной ветви при определенной величине волнового вектора  $\mathbf{q}_{crit}$ , что приводит к образованию несоразмерной фазы.

В работе [8] для феноменологического описания анизотропной низкоэнергетической дисперсии ТА-фононов в КТО была использована пятимодовая модель Вакса [9], которая позволила рассчитать дисперсионные поверхности для кубических кристаллов перовскита. В данной модели учитываются пять самых низкоэнергетичных фононных мод: две поперечные оптические (2 ТО) и три акустические (2 ТА и 1 LA). В результате в широком температурном интервале для кристаллов КТО было получено точное описание низкочастотного спектра, что подтвердило предположение о том, что низкая частота акустической моды обусловлена взаимодействием со смягчающейся оптической модой.

В работе [5] было проведено моделирование формы диффузного рассеяния в ЦС с использованием модели Вакса, которая учитывает межмодовое взаимодействие.

В рамках данной статьи нами предлагается развитие подхода к моделированию дисперсионных зависимостей в ЦС с помощью пятимодовой модели Вакса, а также рассматривается возможность образования неустойчивости в данной системе.

### Модель Вакса

Моделирование низкоэнергетической части спектра в ЦС мы предлагаем осуществить с помощью модели Вакса. В используемом приближении точность описания частоты фонона  $\omega$  определяется параметром  $\omega^2 / \Omega_{op}$ , где  $\Omega_{op}$  — частота типичной высокоэнергетичной моды, например продольной оптической [9].

Пятимодовый гамильтониан для трех акустических фононных ветвей со смещениями  $x_1, x_2, x_3$  и двух оптических фононных ветвей со смещениями  $u_1, u_2$  имеет следующий вид:

$$H^{(5)} = \frac{1}{2} \sum_q [\dot{\mathbf{u}}_{-q} \dot{\mathbf{u}}_q + \mathbf{u}_{-q} \hat{A}(q) \mathbf{u}_q + \dot{\mathbf{x}}_{-q} \dot{\mathbf{x}}_q + \lambda \mathbf{x}_{-q} \mathbf{x}_q + \mathbf{x}_{-q} \hat{S}(q) \mathbf{x}_q + 2\mathbf{u}_{-q} \hat{V}(q) \mathbf{x}_q]. \quad (1)$$

Отметим, что наличие температурной зависимости предполагается лишь у мягкой оптической ветви, квадрат частоты которой обозначен как  $\lambda$ . Тензор  $\hat{A}(\mathbf{q})$  описывает

дисперсию акустической фононной ветви при отсутствии взаимодействия,  $\widehat{S}(\mathbf{q})$  — дисперсию оптической фононной ветви, а тензор  $\widehat{V}(\mathbf{q})$  соответствует вкладу акусто-оптического взаимодействия. Данные тензоры могут быть разложены в окрестности малых значений  $q$  с учетом кубической и зеркальной симметрий:

$$\begin{aligned} \widehat{A}(\mathbf{q}) &= q^2(A_a g^a + A_l g^l + A_t g^t); \\ \widehat{S}(\mathbf{q}) &= q^2(S_a g^a + S_l g^l); \\ \widehat{V}(\mathbf{q}) &= q^2(V_a g^a + V_l g^l). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь тензоры  $g$  зависят только от направления  $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$ :

$$\begin{aligned} g_{\alpha\beta}^t &= \delta_{\alpha\beta} - n_\alpha n_\beta; \\ g_{\alpha\beta}^l &= n_\alpha n_\beta; \\ g_{\alpha\beta}^a &= \gamma_{\alpha\beta\gamma\delta} n_\gamma n_\delta, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\delta_{\alpha\beta}$  — символ Кронекера;  $\gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}$  — тензорный инвариант с учетом кубической симметрии, который равен единице, когда все его индексы совпадают, и нулю во всех остальных случаях.

В результате тензоры  $\widehat{A}(\mathbf{q})$ ,  $\widehat{S}(\mathbf{q})$  и  $\widehat{V}(\mathbf{q})$  оказываются состоящими из поперечной ( $g^t$ ), продольной ( $g^l$ ) и анизотропной ( $g^a$ ) частей. Коэффициенты  $S_l$  и  $V_l$  отсутствуют, так как в модель входят только поперечные оптические моды. Величины  $A_t$ ,  $S_t$ ,  $V_t$  являются константами, причем  $A_t$  можно выразить через упругие модули:

$$\begin{aligned} A_t &= \frac{1}{\rho} c_{44}; \\ A_l &= \frac{1}{\rho} (c_{12} + 2c_{44}); \\ A_a &= \frac{1}{\rho} (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}), \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\rho$  — плотность.

Данная модель была использована для расчета дисперсии в ЦС. Согласно модели, частоты мод должны быть квадратными корнями из собственных чисел следующей матрицы:

$$H^{(5)}(\mathbf{q}) = H_{is}(|q|, \lambda, S_t, A_t, V_t, A_t) + H_{anis}(\mathbf{q}, S_a, A_a, V_a). \quad (5)$$

Изотропная часть матрицы (5) имеет вид

$$H_{is} =$$

$$= \begin{pmatrix} \lambda + S_t q^2 & 0 & V_t q^2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda + S_t q^2 & 0 & V_t q^2 & 0 \\ V_t q^2 & 0 & A_t q^2 & 0 & 0 \\ 0 & V_t q^2 & 0 & A_t q^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_t q^2 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Анизотропная часть этой матрицы имеет вид

$$H_{anis} = q^2 \times$$

$$\begin{pmatrix} S_a h_{11} & S_a h_{12} & V_a h_{11} & V_a h_{12} & V_a h_{13} \\ S_a h_{12} & S_a h_{22} & V_a h_{12} & V_a h_{22} & V_a h_{23} \\ V_a h_{11} & V_a h_{12} & A_a h_{11} & A_a h_{12} & A_a h_{13} \\ V_a h_{12} & V_a h_{22} & A_a h_{12} & A_a h_{22} & A_a h_{23} \\ V_a h_{23} & V_a h_{23} & A_a h_{33} & A_a h_{23} & A_a h_{33} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} h_{11} &= \frac{2n_2^2 n_3^2}{n_1^2}, h_{12} = \frac{n_1 n_2 n_3}{n_1^2} (n_3^2 - n_2^2), \\ h_{22} &= 2n_1^2 (n_1^2 - \frac{n_2^2 n_3^2}{n_1^2}), h_{13} = \frac{n_2 n_3}{n_1} (n_2^2 - n_3^2), \\ h_{23} &= \frac{n_1}{n_1} (n_1^2 n_1^2 - n_2^4 - n_3^4), h_{33} = n_1^4 + n_2^4 + n_3^4. \end{aligned} \quad (8)$$

Следовательно, в данной модели имеется восемь параметров:  $A_t$ ,  $A_l$ ,  $A_a$ ,  $S_t$ ,  $S_a$ ,  $V_t$ ,  $V_a$  и  $\lambda$ . Буквой  $\lambda$  обозначен квадрат частоты мягкой оптической моды при  $\mathbf{q} = 0$ . В рамках квазигармонического приближения данный параметр — единственный, который зависит от температуры.

Частота релевантной оптической моды при  $\mathbf{q} = 0$  взята из экспериментальных данных по инфракрасной спектроскопии [10]. Параметры, контролирующие акустическую дисперсию, были рассчитаны на основе значений упругих модулей, взятых из результатов эксперимента по рассеянию Бриллюэна [5]:  $c_{11} = 194$  ГПа,  $c_{12} = 61$  ГПа,  $c_{44} = 71$  ГПа. Плотность цирконата свинца  $\rho = 8$  г/см<sup>3</sup>, постоянная решетки  $a = 0,416$  нм [11]. В результате были получены следующие значения параметров:  $A_t = 2512$  (мэВ)<sup>2</sup>/(г/у)<sup>2</sup>;  $A_l = 879$  (мэВ)<sup>2</sup>/(г/у)<sup>2</sup>;

$$A_a = -111 \text{ (мэВ)}^2 / (\text{rлu})^2.$$

В таком случае остается всего четыре варьируемых параметра. Для упрощения мы ограничили наше рассмотрение случаем изотропного межмодового взаимодействия ( $V_a = 0$ ). Значения остальных трех параметров были получены методом наименьших квадратов:

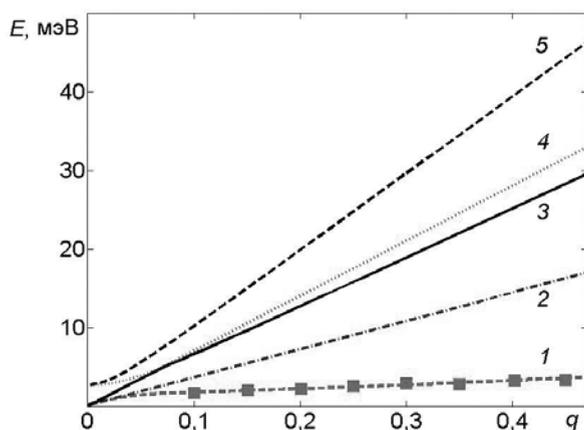


Рис. 1. Результаты моделирования (линии) дисперсионных зависимостей пяти (1 – 5) самых низкоэнергетических мод. Расчеты выполнены с помощью модели Вакса; проведено сравнение с экспериментальными данными (символы). Температура – 780 К. Моды колебаний фононов: TA *in plane* (1) и *out of plane* (2); LA (3); TO *in plane* (4) и *out of plane* (5)

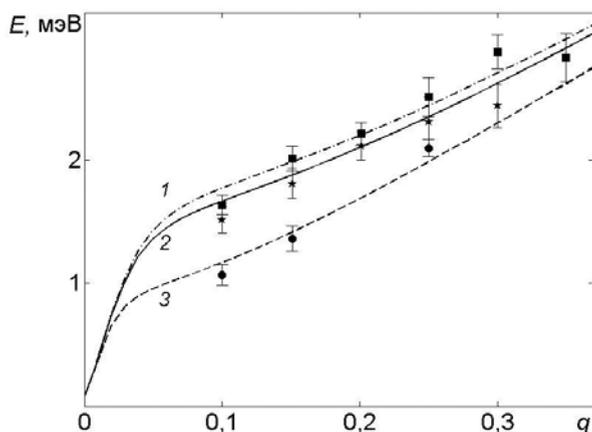


Рис. 2. Температурная эволюция дисперсионной зависимости TA *in plane* фононов, рассчитанная с помощью модели Вакса (линии), проведено сравнение с экспериментальными данными (символы). Температура, К: 780 (1); 680 (2), 550 (3)

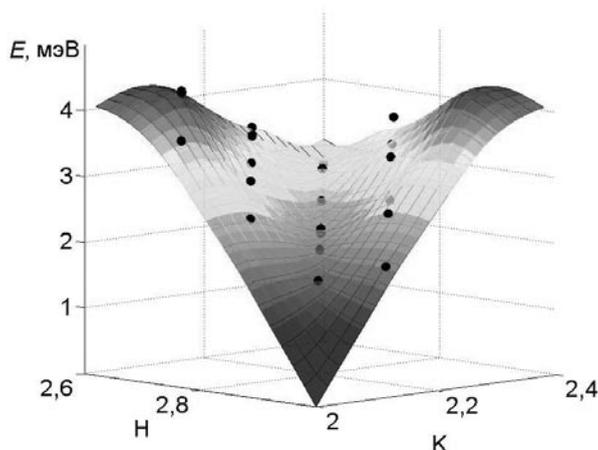


Рис. 3. 3D-представление результатов моделирования дисперсионной поверхности поперечных акустических фононов с поляризацией *in plane* в одной четверти зоны Бриллюэна; расчеты выполнены с помощью модели Вакса; проведено сравнение с экспериментальными данными (символы);  $T = 780 \text{ К}$

$$S_a = -6863 \text{ (мэВ)}^2 / (\text{rлu})^2,$$

$$S_t = 4604 \text{ (мэВ)}^2 / (\text{rлu})^2,$$

$$V_t = 955,4 \text{ (мэВ)}^2 / (\text{rлu})^2.$$

С использованием вышеприведенных параметров было выполнено моделирование дисперсионных зависимостей частот низколежащих мод в направлении  $[1\ 1\ 0]$ . Результаты моделирования для температуры 780 К приведены на рис. 1. На этом же рисунке отмечены экспериментально полученные частоты ТА-фононов *in plane*; сравнение расчетных кривых с экспериментом подтверждает справедливость данной модели для описания anomalously низкой поперечной акустической ветви.

Модель Вакса позволяет также получить температурную зависимость фононной дисперсии. На рис. 2 приведено сравнение вычисленной дисперсии ТА-фононов, имеющих поляризацию *in plane*, с экспериментально полученными величинами. Видно, что частоты ТА-фононов, вычисленные с применением модели Вакса, в параэлектрической фазе понижаются с приближением к температуре фазового перехода аналогично экспериментально полученным частотам.

На рис. 3 приведена дисперсионная поверхность акустических фононов, также

рассчитанная с применением модели Вакса. Видно, что трехмерная дисперсионная зависимость имеет форму долины с провалом вдоль  $\Sigma$ -направления. Таким образом, модельные расчеты воспроизводят анизотропию энергии акустических фононов.

### Исследование системы на неустойчивость

В работе [7] рассмотрена возможность ситуации, в которой частота акустической моды становится равной нулю в определенной точке зоны Бриллюэна  $\mathbf{q}_{crit}$  в результате взаимодействия с оптической модой. С целью анализа подобной ситуации, т. е. насколько наша система близка к состоянию неустойчивости, было проведено варьирование параметров  $S_t$ ,  $S_a$  и  $V_t$ . Напомним, что для моделирования нами были использованы следующие значения параметров:

$$\begin{aligned} S_a &= -6863 \text{ (мэВ)}^2/(\text{rlu})^2, \\ S_t &= 4604 \text{ (мэВ)}^2/(\text{rlu})^2, \\ V_t &= 955,4 \text{ (мэВ)}^2/(\text{rlu})^2. \end{aligned}$$

На рис. 4 приведены дисперсионные зависимости частоты фононной ТА-моды для нескольких значений  $V_t$ . Видно, что уже при  $V_t = 995 \text{ (мэВ)}^2/(\text{rlu})^2$  частота акустической моды становится нулевой и система оказывается неустойчивой. Согласно нашим расчетам, от параметра взаимодействия  $V_t$

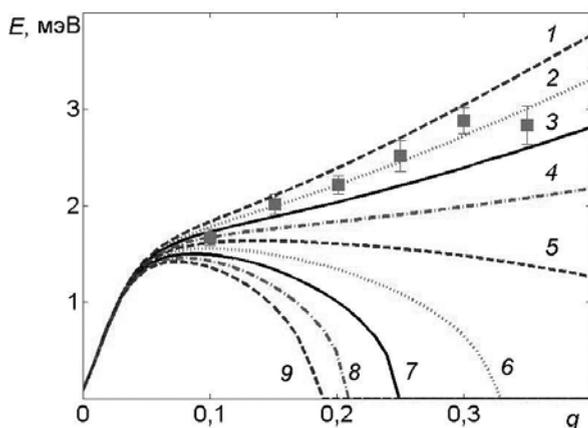


Рис. 4. Расчетные дисперсионные зависимости поперечной акустической моды вдоль  $\Sigma$ -направления (*in plane*) для нескольких значений параметра взаимодействия  $V_t$ : 945 (1), 955,4 (2), 965 (3), 975 (4), 985 (5), 995 (6), 1005 (7), 1015 (8), 1025 (9);  $T = 780 \text{ K}$

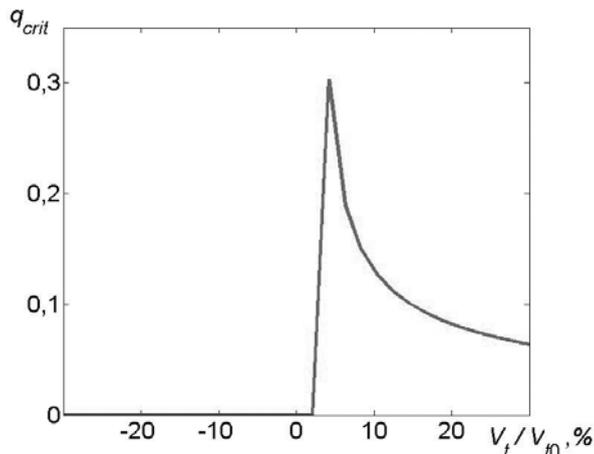


Рис. 5. Расчетная зависимость модуля волнового вектора  $\mathbf{q}_{crit}$  от параметра взаимодействия  $V_t$ , который выражен в процентах относительно величины  $V_{t,0} = 955,4 \text{ (мэВ)}^2/(\text{rlu})^2$

критически зависит только самая низкоэнергетичная, ТА-мода, тогда как частоты остальных мод демонстрируют лишь слабую зависимость от указанного параметра.

В процессе моделирования нами была проанализирована зависимость волнового вектора  $\mathbf{q}_{crit}$  от параметра  $V_t$ . Была исследована устойчивость нашей системы, аналогично рассмотрению, проведенному в работе [7]. Условие устойчивости системы, включающей пять мод, должно задаваться следующими условиями для определителя матрицы  $H$  (5):

$$\begin{aligned} |H| &> 0, \\ \frac{\partial |H|}{\partial q} &= 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Данные условия были использованы в совокупности с матрицами (6), (7) для получения волнового вектора нестабильной моды  $\mathbf{q}_{crit}$ . Результаты проведенного анализа представлены на рис. 5, где приведена зависимость  $\mathbf{q}_{crit}$  от параметра  $V_t$ . Видно, что при совсем небольшом изменении  $V_t$  возникает нестабильность акустической моды в точке  $\Sigma$ , что приведет к возникновению  $\Sigma$ -сверхструктуры.

### Заключение

Проведено моделирование низкочастотной области фононного спектра циркона-



та свинца  $\text{PbZrO}_3$  с использованием модели Вакса. Учет взаимодействия всего пяти низкоэнергетичных мод позволяет получить не только хорошее согласие дисперсионной зависимости для поперечного ТА-фонона с экспериментально наблюдаемой дисперсией, но и позволяет смоделировать температурные изменения частоты ТА-фонона.

Установлено, что рассматриваемая система, включающая в себя пять низколежащих мод, находится в состоянии, близком к неустойчивому. Небольшого изменения хотя бы одного из параметров, задающих взаимодействие между этими модами, оказывается достаточно для возникновения неустойчивости в решетке, которая характеризуется волновым вектором  $\mathbf{q}_{crit}$ . Например, при увеличении параметра акусто-оптического взаимодействия  $V_t$  на 5 %

частота ТА-моды становится равной нулю при значении  $q_{crit} = 0,25$ , что соответствует неустойчивости решетки в  $\Sigma$ -точке. Однако вектор  $\mathbf{q}_{crit}$  может иметь любую величину, в том числе иррациональную; в таком случае система будет близка к переходу в несоразмерную фазу.

Если система настолько чувствительна к небольшому изменению параметров междоимового взаимодействия, то можно ожидать, что она будет чувствительна и к различным внешним воздействиям. В таком случае представляет интерес исследование фазовых переходов в цирконате свинца, к которому приложено внешнее давление.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 14-22-00136) в СПбПУ.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shirane G., Sawaguchi E., Takagi Y. Dielectric properties of lead zirconate. *Phys. Rev.* 1951. Vol. 84, pp. 476-481.
2. Rabe Karin M. Antiferroelectricity in oxides: a reexamination. Functional metal oxides, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co.KGaA. 2013, pp. 221-244.
3. Fujishita H., Hoshino S. A study of structural phase transitions in antiferroelectric  $\text{PbZrO}_3$  by neutron diffraction. *J. Phys. Soc. Jpn.* 1984. Vol. 53. No. 1, pp. 226-234.
4. Roleder K., Maglione M., Fontana M.D. Behaviour of a polar relaxation mode around the phase transition point in the antiferroelectric single crystal. *J. Phys.: Condens. Matt.* 1996. Vol. 8, pp. 669-678.
5. Tagantsev A.K., Vaideeswaran K., Vakhrushev S.B., Filimonov A.V., Burkovsky R.G., Shaganov A.P., Andronikova D.A., Rudskoy A.I., Baron A. Q.R., Uchiyama H., Chernyshov D., Bosak A., Ujma Z., Roleder K., Majchrowski A., Ko J.-H., Setter N. The origin of antiferroelectricity in  $\text{PbZrO}_3$ . *Nat. Commun.* 2013. Vol. 4. P. 2229.
6. Shirane G., Nathans R., Minkiewicz V.J. Temperature dependence of the soft ferroelectric mode in  $\text{KTaO}_3$ . *Phys. Rev.* 1967. Vol. 157, pp. 396-399.
7. Axe J.D., Harada J., Shirane G. Anomalous acoustic dispersion in centrosymmetric crystals with soft optic phonons. *Phys. Rev. B.* 1970. Vol. 1, pp. 1227-1234.
8. Farhi E., Tagantsev A.K., Currat R., Hehlen B., Courtens E., Boatner L.A. Low energy phonon spectrum and its parameterization in pure  $\text{KTaO}_3$  below 80 K. *Eur. Phys. J. B.* 2000. Vol. 15. No. 4, pp. 615-623.
9. Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М.: Наука, 1973. 328 с.
10. Ostapchuk T., Petzelt J., Zelezny V., Kamba S., Bovtun V., Porokhonskiy V., Pashkin A., Kuzel P., Glinchuk M.D., Bykov I.P., Gorshunov B., Dressel M. Polar phonons and central mode in antiferroelectric  $\text{PbZrO}_3$  ceramics. *J. Phys.: Cond. Matt.* 2001. Vol. 13. No. 11, pp. 2677-2689.
11. Whatmore R., Glazer A.M. Structural phase transitions in lead zirconate. *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1979. Vol. 12, pp. 1505-1519.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АНДРОНИКОВА Дарья Александровна — инженер кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, старший лаборант лаборатории физики ферроиков Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

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

**БУРКОВСКИЙ Роман Георгиевич** — кандидат физико-математических наук, инженер кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

roman.burkovskiy@esrf.fr

**ВАХРУШЕВ Сергей Борисович** — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, заведующий лабораторией нейтронных исследований Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

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

s.vakhrushev@mail.ioffe.ru

**ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович** — доктор физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

filimonov@rphf.spbstu.ru

## Andronikova D.A., Burkovsky R.G., Vakhrushev S.B., Filimonov A.V. MODELING OF STRUCTURAL INSTABILITY IN LEAD ZIRCONATE.

Low-energy phonon spectra of lead zirconate being classic antiferroelectric have been simulated using the Vaks model with 5 modes. This model takes into account a flexoelectric coupling between 5 low-energy modes (3 acoustical and 2 optical ones). The Vaks model was shown to allow not only to achieve good agreement of calculated dispersions with experimental data, but to reproduce the temperature behaviour of TA phonon frequencies as well.

As our calculations revealed, the system with 5 low-energy modes was close to structural instability stage. Even a weak change in coupling parameters could result in lattice instability which was characterized by  $\mathbf{q}_{crit}$  wave vector. The  $\mathbf{q}_{crit}$ -vector took any value including irrational one. In latter case the system would be close to go over into an incommensurate phase.

LEAD ZIRCONATE, PHASE TRANSITION, ANTIFERROELECTRICITY, FLEXOELECTRIC COUPLING.

### REFERENCES

1. Shirane G., Sawaguchi E., Takagi Y. Dielectric properties of lead zirconate. *Phys. Rev.*, 1951, Vol. 84, pp. 476-481.
2. Rabe Karin M. *Antiferroelectricity in oxides: a reexamination. Functional metal oxides*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co.KGaA, 2013, pp. 221-244.
3. Fujishita H., Hoshino S. A study of structural phase transitions in antiferroelectric  $\text{PbZrO}_3$  by neutron diffraction. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1984, Vol. 53, No. 1, pp. 226-234.
4. Roleder K., Maglione M., Fontana M.D. Behaviour of a polar relaxation mode around the phase transition point in the antiferroelectric single crystal. *J. Phys.: Condens. Matt.*, 1996, Vol. 8, pp. 669-678.
5. Tagantsev A.K., Vaideeswaran K., Vakhrushev S.B., Filimonov A.V., Burkovsky R.G., Shaganov A.P., Andronikova D.A., Rudskoy A.I., Baron A. Q.R., Uchiyama H., Chernyshov D., Bosak A., Ujma Z., Roleder K., Majchrowski A., Ko J.-H., Setter N. The origin of antiferroelectricity in  $\text{PbZrO}_3$ . *Nat. Commun.*, 2013, Vol. 4, P. 2229.
6. Shirane G., Nathans R., Minkiewicz V.J. Temperature dependence of the soft ferroelectric mode in  $\text{KTaO}_3$ . *Phys. Rev.*, 1967, Vol. 157, pp. 396-399.
7. Axe J.D., Harada J., Shirane G. Anomalous acoustic dispersion in centrosymmetric crystals with soft optic phonons. *Phys. Rev. B*. 1970. Vol. 1, pp. 1227-1234.
8. Farhi E., Tagantsev A.K., Currat R., Hehlen B., Courtens E., Boatner L.A. Low energy phonon spectrum and its parameterization in pure  $\text{KTaO}_3$  below 80 K. *Eur. Phys. J. B.*, 2000, Vol. 15. No. 4, pp. 615-623.
9. Vaks V.G. *Vvedeniye v mikroskopicheskuyu teoriyu segnetoelektrikov*. Moscow, Nauka, 1973. 328 p.
10. Ostapchuk T., Petzelt J., Zelezny V., Kamba S., Bovtun V., Porokhonskiy V., Pashkin A., Kuzel P., Glinchuk M.D., Bykov I.P., Gorshunov B., Dressel M. Polar phonons and central mode in antiferroelectric  $\text{PbZrO}_3$  ceramics. *J. Phys.: Cond. Matt.*, 2001, Vol. 13, No. 11, pp. 2677-2689.
11. Whatmore R., Glazer A.M. Structural phase transitions in lead zirconate. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 1979, Vol. 12, pp. 1505-1519.

#### THE AUTHORS

**ANDRONIKOVA Daria A.**

*St. Petersburg Polytechnic University, Ioffe Physical-Technical Institute of RAS*  
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
andronikova.daria@gmail.com

**BURKOVSKY Roman G.**

*St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
roman.burkovskiy@esrf.fr

**VAKHRUSHEV Sergei B.**

*St. Petersburg Polytechnic University, Ioffe Physical-Technical Institute*  
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
s.vakhrushev@mail.ioffe.ru

**FILIMONOV Alexei V.**

*St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
filimonov@rphf.spbstu.ru

УДК 628.9

А.В. Аладов <sup>1</sup>, В.П. Валухов <sup>2</sup>, А.Л. Закгейм <sup>1</sup>,  
А.Е. Черняков <sup>1</sup>, А.Ф. Цацульников <sup>3</sup>

<sup>1</sup> Научно-технологический центр микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

<sup>3</sup> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

## ДИНАМИЧЕСКИ УПРАВЛЯЕМЫЕ СВЕТОДИОДНЫЕ ИСТОЧНИКИ СВЕТА ДЛЯ НОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОСВЕЩЕНИЯ

Рассмотрены вопросы создания светодиодных источников света на принципе RGB-смешения, допускающих динамическое управление по спектру (цвету) излучения. Приведены результаты разработки конструкции и технологии изготовления энергоэффективных, динамически управляемых светодиодных источников освещения, которые обеспечивают оптимальную световую среду для жизнедеятельности человека.

СВЕТОДИОДЫ, СПЕКТРАЛЬНО-ЦВЕТОВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ, RGB-СМЕШЕНИЕ ЦВЕТОВ, ДИНАМИЧЕСКОЕ УПРАВЛЕНИЕ, ТЕХНОЛОГИЯ ZigBee, КОНФИГУРАЦИЯ СЕТИ.

### Введение

Светодиоды (СД) наилучшим образом удовлетворяют высоким требованиям, предъявляемым к современным источникам света (ИС), благодаря сочетанию целого ряда преимуществ. В первую очередь к ним относится их характеристика энергопотребления: световая отдача серийных приборов составляет около 150 лм/Вт, а лабораторных образцов – 300 лм/Вт [1, 2]; это позволяет, ввиду экономии электроэнергии, рассчитывать на значительное улучшение экологической обстановки. Не менее важна способность СД повышать качественные показатели освещения за счет возможности динамического управления спектрально-цветовыми параметрами (интеллектуальный свет на принципе RGB-смешения). Последнее преимущество особенно актуально в связи со следующими обстоятельствами:

люди проводят большую часть суток, включая дневное время, при искусственном освещении, что обусловлено расширя-

ющимся использованием безоконных производственных помещений;

использование белых СД на основе принципа цветосмешения (RGB) впервые в практике освещения позволяет реализовать динамичное управление спектром (цветом) излучения (так называемый «интеллектуальный» свет) с новыми возможностями влияния на биологические процессы в организме человека (животных, растений). Это обстоятельство позволяет обойти неблагоприятные особенности наиболее распространенных сейчас белых люминофорных СД, которые имеют в спектре испускания сильную голубую полосу с пиковой длиной волны  $\lambda_{peak} \approx 450 - 460$  нм и дефицит излучения в красной области (630 – 750 нм);

появление светодиодных источников света с управляемыми характеристиками совпало по времени с обнаружением неизвестного ранее типа глазных рецепторов, синхронизирующих функционирование организма с состоянием световой среды – ка-

нал биологических часов [3, 4]. Это открывает широкие возможности использовать освещение как безмедикаментозный способ воздействия на психофизиологическое и эмоциональное состояния человека.

Качественные показатели генерируемого света, в первую очередь, характеризуются возможностью реализации широкого диапазона цветовых температур – (2700 – 6500) К, при обеспечении высоких значений индексов цветопередачи [5]. Общий индекс цветопередачи  $R_a$  должен быть не менее 95, а специальные индексы цветопередачи для насыщенных цветов  $R_8 - R_{14}$  должны превышать значение 85. Другим важнейшим качеством освещения является управляемость, т. е. возможность изменения в процессе эксплуатации спектрально-цветовых параметров; это кардинально расширяет функциональные возможности источников света и меняет подходы к решению многих светотехнических задач. Общеизвестно, что наиболее интересные перспективы «интеллектуального» света связаны с медициной, особенно с хирургией, а также с агротехникой, музейным освещением, архитектурно-декоративной подсветкой. Кроме того, обнаружена возможность светового воздействия оказывать положительное влияние на психофизическое и общее физическое здоровье человека, то есть создавать оптимальную варьируемую эргономичную световую среду. К положительным свойствам СД следует также отнести отсутствие опасных ИК- и УФ- компонент излучения, электромагнитную совместимость, длительный ресурс с минимальными эксплуатационными расходами, миниатюрность, конструктивную гибкость, безвредную утилизацию СД, по сравнению с ртутьсодержащими лампами.

### Технологии получения белого света

Вопросы оптимизации при смешении цветов для получения белого света с заданной цветовой температурой и приемлемым компромиссом в соотношении «световая отдача – индекс цветопередачи» применительно к СД исследовались в работах [6, 7]. Во всех вариантах комбинирования цветов оптимальное сочетание не должно исключать

глубокий зеленый диапазон 540 – 560 нм, пока труднодоступный для СД.

Для экспериментальной оценки возможностей синтеза белого света с помощью промышленно выпускаемых мульткристалльных (полихромных) СД, исследовалось несколько вариантов сложения: RGB, RGBA,  $RGBW_c$  и  $RGBW_n$ , где обозначению R (красный цвет) соответствует спектральный диапазон 620 – 640 нм, G (зеленый) – 510 – 530 нм, B (синий) – 450 – 470 нм, A (желтый) – 590 – 595 нм,  $W_c$  и  $W_n$  – люминофорные СД холодного-белого ( $T_c \approx 6500$  К) и нейтрально-белого ( $T_c \approx 4000$  К) света. Анализ всех индексов передачи показывает, что трехцветная (RGB) версия на практике мало приемлема для получения полноценного белого света. Вполне удовлетворительные результаты обеспечивают четырехцветные версии RGBA и  $RGBW$ .

На основе имеющихся к настоящему времени теоретических и экспериментальных результатов можно сделать заключение: чтобы получить белый свет с высоким значением общего индекса цветопередачи  $R_a > 95$  при типичной полуширине спектров полупроводниковых излучателей  $\Delta\lambda_{0,5} \approx 15 - 40$  нм, необходимо сложить излучение четырех-пяти полупроводниковых излучателей с пиковыми длинами волн  $\lambda_{peak}$ , которые относительно равномерно распределены в видимом диапазоне. Дальнейшее, более плотное, заполнение спектра излучения абсолютно черного тела за счет увеличения числа СД мало влияет на значение  $R_a$ , но ведет к заметным потерям световой отдачи и усложнению системы. В то же время, даже небольшое отклонение пиковой длины волны  $\lambda_{peak}$  отдельных СД от оптимальных значений может приводить к резкому падению отдельных индексов цветопередачи, особенно  $R_8 - R_{14}$ , относящихся к насыщенным цветам. Использование для цветосмешения люминофорных СД с более широким спектром,  $\Delta\lambda_{0,5} \approx 70 - 100$  нм, естественно, облегчает проблему.

Экспериментальные исследования в совокупности с моделированием при широком охвате исходных спектров по  $\lambda_{peak}$  и  $\Delta\lambda_{0,5}$  показывают, что для синтеза высококачественного белого света в широком диа-

пазоне  $T_c = 2\ 500 - 10\ 000$  К оптимальным является набор из шести спектральных полос полупроводниковых СД. При этом для каждой конкретной цветовой температуры  $T_c$  достаточно сложение четырех полос. Выбор шестицветного светодиодного модуля обусловлен стремлением повысить его универсальность за счет перекрытия широкого диапазона  $T_c$  и акцентирования некоторых цветов для специальных условий освещения (микроскопия, помещения для хирургии и музеев) [8].

**Технические характеристики энергоэффективных, динамически управляемых светодиодных источников освещения**

Энергоэффективный, динамически управляемый светодиодный источник освещения (ЭДУСИО) должен обеспечивать оптимальную световую среду для жизнедеятельности человека в жилых и производственных помещениях. Создание такой среды требует решения следующих задач:

имитацию внутри помещений, лишенных окон, естественного, отвечающего биологическим циклам, освещения с плавным изменением цветовой температуры в течение дня, особенно при дефиците естественного света в зимний период;

обеспечение специальных условий освещения для повышения работоспособности и концентрации внимания персонала, работающего при больших психофизических нагрузках (авиадиспетчеры, операторы центров управления, экипажи автономных объектов, например подводных лодок, космических кораблей и др.);

та же задача для релаксации и снятия нервного напряжения у перечисленного выше персонала, а также людей, испытывавших стрессовые нагрузки (военные, служащие МЧС и др.);

обеспечение музейного освещения с целью наилучшего воспроизведения всей цветовой палитры живописи и создания комфортной световой среды для восприятия предметов искусства;

ЭДУСИО обеспечивают излучение белого света со спектрально-цветовыми и яркостными характеристиками, которые до-

пускают изменение во времени по заданной программе. Управление параметрами излучения можно осуществлять дистанционно по радиоканалу от пульта дистанционного управления (ПДУ) или персонального компьютера (ПК). При этом обеспечиваются три режима работы.

1. «Выключено»; в этом случае сетевое напряжение 220 В отключено.

2. Дежурный режим (спящий); при этом питание 220 В включено, но свет выключен;

3. Рабочий режим; это работа, когда выполняются заданные требования к цветовым (калориметрическим) и световым (фотометрическим) характеристикам.

Преобразование постоянного напряжения от источника напряжения в ток светодиодов производится драйверами с регулированием светового потока широтно-импульсной модуляцией (ШИМ) по программе микроконтроллера. Диапазон регулирования скважности ШИМ – от 0 до 100 %, с шагом 0,1 %. Микроконтроллер обеспечивает прием команд управления от ПДУ или ПК, управление световыми характеристиками, а также контроль температуры платы светодиодов (не более 50 °С).

Мощность потребления ЭДУСИО от источника питания не превышает 40 Вт в рабочем режиме. Это позволяет не предусматривать включения в схему корректора коэффициента мощности. В дежурном режиме мощность рассеяния не превышает 0,5 Вт.

Пульт дистанционного управления ЭДУСИО обеспечивает целый ряд функций; это хранение во внутренней памяти режимов работы светодиодного источника, выбор программы и времени работы пользователем с помощью кнопок ПДУ, управление работой ЭДУСИО, синхронизацию работы нескольких ЭДУСИО, привязку режима работы к реальному времени (времени суток), управление этим ЭДУСИО (плавное изменение спектра излучения в течение суток с возможностью последующего повторения цикла) по радиоканалу на расстоянии до 35 м.

Разветвленная сеть ЭДУСИО относится к устройствам локальных радиосетей мало-

го радиуса действия, которые используют для замены физических кабелей в локальных сетях передачи данных в пределах здания (помещения).

Беспроводные самоорганизующиеся сети (*ad hoc* сети, беспроводные динамические сети) – это децентрализованные сети без проводов, не имеющие постоянной структуры; их характерное отличие от аналогичных сетей состоит в том, что задача управления потоками данных не выполняется через точки доступа.

### Технологии беспроводных сетей

Перечислим наиболее часто используемые технологии при построении беспроводных саморегулирующихся сетей:

Wi-Fi (IEEE 802.11);

Bluetooth (IEEE 802.15.1);

ZigBee (IEEE 802.15.4).

В окончательном исполнении беспроводное устройство, изготовленное по альтернативной технологии, должно основываться на применении трансивера (приемопередатчика), к которому предъявляются следующие требования:

устойчивая надежная двухсторонняя связь;

дальность работы на одном кристалле – от 10 м и более;

низкая цена;

низкое энергопотребление.

**Wi-Fi.** Это технология высокоскоростной беспроводной персональной сети торговой марки Wi-Fi Alliance. На частоте 2,4 ГГц, где она должна функционировать, работает множество устройств, что ухудшает ее электромагнитную совместимость с другими системами; вследствие этого высоки служебные «накладные расходы». Кроме того, серьезным недостатком является требование регистрации всех сетей Wi-Fi, работающих в России и Белоруссии вне помещений (либо требуется регистрация Wi-Fi-оператора).

**Bluetooth.** Эта производственная спецификация беспроводных персональных сетей на частоте 2,4 ГГц широко распространена на практике, однако по интегральному сочетанию стоимости, функциональных воз-

можностей и габаритных размеров имеются применения, где данная технология крайне невыгодна.

**ZigBee.** Это спецификация сетевых протоколов верхнего уровня (уровня приложения API и сетевого уровня NWK), использующих серверы нижних уровней, а именно управления доступом к среде MAC и физического уровня PHY регламентированным стандартом IEEE 802.15.4. (часть 15.4.: Wireless Medium Access Control (MAC) and Physical Layer (PHY) Specification for Low-Rate Wireless Personal Area Networks (WPANs) – беспроводные среды управления доступом (MAC) и спецификации физического слоя (уровня) (PHY) для низкоскоростных беспроводных персональных сетей) [9, 10]. Спецификация ZigBee ориентирована на приложения, требующие гарантированной безопасной передачи данных при относительно небольших скоростях и возможности длительной работы сетевых устройств от автономных источников питания. Технология ZigBee позволяет при малом энергопотреблении поддерживать не только простые топологии сети («точка-точка», «дерево» и «звезда»), но и самоорганизующуюся и самовосстанавливающуюся ячеистую (mesh) топологию с ретрансляцией и маршрутизацией сообщений. Ценовая эффективность технологии ZigBee объясняется не только организационными мероприятиями альянса компаний ZigBee, но главным образом ее конкурентоспособностью благодаря использованию в основе технологии стандарта IEEE 802.15.4., которая обеспечивает оптимальные технические характеристики серверов нижних уровней MAC и PHY.

PHY-слой обеспечивает следующие функции:

активацию и деактивацию радиотрансивера;

детектирование энергии (ED) в текущем канале;

индикацию качества связи (LQI) для получения пакетов;

оценку занятости канала CCA (Clear Channel Assessment) для механизма доступа (CSMA-CA);

выбор частоты канала;

прием и передачу данных.

MAC-уровень руководит всем доступом к физическому радиоканалу и выполняет следующие задачи:

- генерацию сети маяков, если устройство является координатором;
- синхронизацию сети маяков;
- поддержку PAN соединений и разъединений;
- поддержку безопасности устройства;
- использование алгоритма CSMA-CA для доступа к каналу с исключением столкновений;
- поддержку и управление GTS механизмом гарантированного временного домена;
- обеспечение надежной связи между двумя точками MAC-объектов.

Стандарт ZigBee и IEEE 802.15.4 предписывает беспроводным устройствам иметь рабочий цикл Duty cycle не более 1 % от всего времени работы, что позволяет продлить время автономной работы датчика от нескольких месяцев до нескольких лет.

Достоинством стандарта ZigBee является возможность беспроводного изменения основных параметров новых устройств, вводимых в уже готовую сеть. Механизм удаленного управления позволяет значительно расширить энергосберегающие функции, в том числе за счет возможности динамически изменять конфигурации параметров сети.

Приборы стандарта IEEE 802.15.4 работают с малой передаваемой мощностью,

так как достижение значения передаваемой мощности более чем в 10 дБм в низкостоимостных системах на кристалле будет экономически невыгодным. Согласно европейским нормативам (ETS EN 800328), передача с мощностью свыше 10 дБм затруднена без дополнительной фильтрации из-за излучений вне полосы передатчика. Устройства IEEE 802.15.4 PHY спецификации, как правило, имеют уровень передаваемой мощности в пределах от -3 до 0 дБм, что позволяет минимизировать интерференцию.

Для полосы частот 2400,0 – 2483,5 МГц стандарт IEEE 802.15.4 использует технологию расширения спектра DSSS (Direct Sequence Spread Spectrum) с модуляцией O-QPSK, что позволяет получить существенный выигрыш по коэффициенту полезного действия усилителя мощности радиопередатчика (энергетическая выгода модуляции). Модуляция O-QPSK позволяет достичь низких значений отношений сигнал/шум (SNR) и сигнал/интерференция (SIR). Типовое выполнение низкостоимостного детектора при вероятности ошибки PER в 1 % требует значения SNR всего лишь от 5 до 6 дБ.

Устройства ZigBee обладают одним из самых маломощных передатчиков в сочетании с самым чувствительным из всех конкурентоспособных приемников. Такая комбинация дает очевидный положитель-

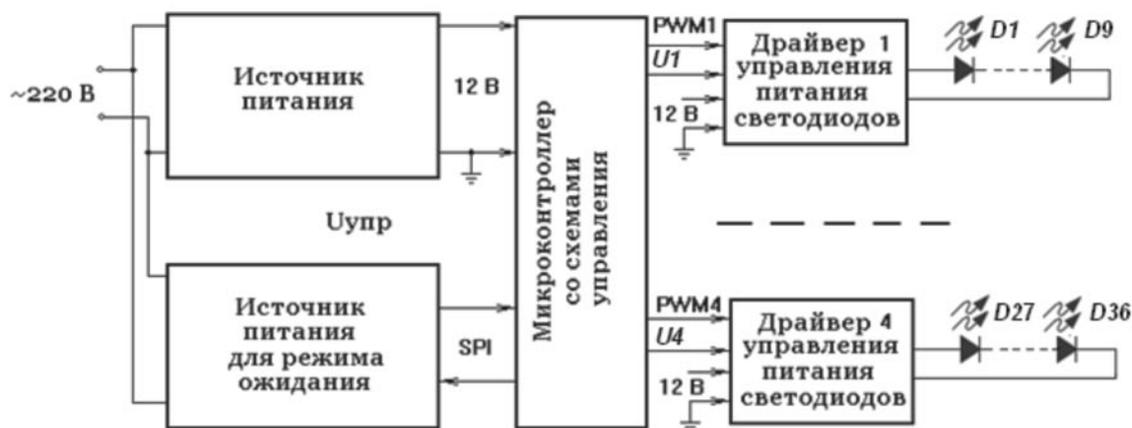


Рис. 1. Структурная схема ЭДУСИО:

PWM1 – PWM4 – широтно-импульсные модуляторы; D1 – D36 – светодиоды

ный эффект – значительно меньшую дозу облучения людей, находящихся в зоне работы сети. Это особенно актуально для ЭДУСИО, если учитывать основное назначение устройства – обеспечение оптимальной световой среды для жизнедеятельности персонала там, где необходимо его присутствие. В этом случае технология ZigBee наилучшим образом будет отвечать условиям безопасности и экологичности окружающей среды из всего набора беспроводных стандартов.

За основной вариант технологии построения ЭДУСИО выбрана технология ZigBee с практической реализацией стандарта IEEE 802.15.4, использующего серверы нижних уровней (MAC и PHY). Поэтому при разработке структурной схемы ЭДУСИО для электронных блоков управления использовались микроконтроллеры, которые поддерживают выбранный стандарт.

Разработанная нами структурная схема представлена на рис. 1. В ждущем режиме к сети подключен только источник питания в режиме ожидания. Периодически он выходит в активный режим и прослушивает радиоэфир для получения команды изменения режима. При этом потребление энергии должно составлять менее 0,5 Вт. Это обусловлено тем, что при возможном массовом применении ламп ЭДУСИО актуальна проблема резкого снижения их энергопотребления в режиме standby (рекомендации Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии Российской Федерации и Международной электротехнической комиссии IEC по потреблению аппаратуры в режиме ожидания, ГОСТ Р МЭК 62301-2011, IEC 62801-2005).

Проблема решалась разработкой блока питания для радиопередатчика с микроконтроллером, который в режиме приема может потреблять (60 – 80) мВт, а в режиме standby – (1 – 5) мкВт. При переводе микроконтроллера с радиопередатчиком в режим standby между сеансами связи, основным потребляющим звеном является преобразователь AC/DC, не требующий EMC-фильтра. Для этой цели был использован драйвер семейства Link Zero-AX LNK 574 на 3,3 В, представляющий собой

быстродействующий интегрированный Off-Line Switcher, который автоматически вводит режим нулевой входной мощности при отключении нагрузки.

Получив команду на включение ЭДУСИО, он включает основной источник питания и по интерфейсу SPI передает команду управляющему микроконтроллеру, который через драйверы светодиодов устанавливает режим свечения четырех линеек из девяти последовательно включенных светодиодов. Команда на включение ЭДУСИО в активный режим поступает с ПДУ по радиоканалу ПДУ-ЭДУСИО. Для ПДУ блок питания standby AC-DC LNK 574 будет основным. Блок питания ЭДУСИО разделен на два блока питания по 20 Вт (всего 40 Вт). Это обусловлено конструктивными особенностями корпуса ЭДУСИО, что позволяет значительно сэкономить объем, занимаемый основным блоком питания.

Ключевым элементом источника является полихромный светодиодный модуль. Современная СД-промышленность (зарубежная) предлагает широкую номенклатуру трех-четырёхцветных эффективных и мощных СД в качестве элементной базы для полихромных источников. Среди лучших следует отметить Cree Inc. (XLamp XM-L Color, XLamp MC-E Color), LedEngin (LZ4-00MA10, LZ4-04MDCA), Luminus (СВМ-380); они применялись нами в предыдущих разработках [11]. К их главным достоинствам следует отнести максимальные на сегодняшний день энергетические характеристики. Что же касается ограничений, то это их неполная цветовая гамма. Это либо RGBA-, либо RGBW-излучатели, где R, G, B, A – монохромные красные (630 нм), зеленые (520 нм), синие (460 нм) и желтые (590 нм) СД, а W – люминофорные СД холодного ( $T_c \sim 6500$  К) или нейтрального ( $T_c \sim 4000$  К) белого света.

Для преодоления указанного ограничения и создания эффективных излучателей на «дефицитные» длины волн, в ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН совместно с НТЦ микроэлектроники РАН активно ведутся исследования по совершенствованию ростовых технологий излучающих гетероструктур в системе AlInGaN. Были выращены гете-

роструктуры типа «двойной синий – синезеленый» (460 – 490 нм) или «синий + глубокий зеленый» (460 – 560 нм) и другие, т. е. варианты СД, необходимые для достижения высоких индексов цветопередачи, но отсутствующие на рынке [12]. Опытные образцы таких излучающих кристаллов используются в нашем шестицветном модуле. Всего в источнике задействовано девять последовательно включенных шестицветных модуля, что требует обеспечение регулирования напряжения на линейках драйверами в диапазоне от 16 до 34 В.

Для управления СД выбран импульсный повышающий драйвер MAX16834, причем изменение светового потока производится применением ШИМ с током до 1000 мА. Для обеспечения заданных спектральных характеристик предусмотрена возможность изменения амплитуды тока СД в диапазоне от 50 до 1000 мА. Амплитудное изменение тока СД необходимо для изменения спектральных составляющих интегрированного кристалла. Драйвер MAX16834 имеет широкий диапазон PWM и аналогового регулирования. Частота регулирования PWMDIM равна 187,5 Гц и устанавливается программируемым микроконтроллером.

В ПДУ и ЭДУСИО для организации линии связи и управления характеристиками светильника используется модуль ATZV-S1-256-3-0-C ZigBit, 2,4 ГГц, IEEE802.15.4/

ZigBee OEM фирмы Atmel с микропроцессором ATMEGA256RFR2 и AVR 8-Bit микроконтроллером. Радиотрансивер обеспечивает скорость передачи данных от 250 кбит/с до 2,0 Мбит/с, число каналов – 16, с шагом в 5 МГц. Чувствительность приемника при вероятности ошибок PER = 1% составляет 97 дБм, выходная мощность передатчика регулируется от +3,79 до –16,26 дБм. Потребление энергии в различных режимах составляет: 9,6 мА в RX-; 16,4 мА в TX-; 0,6 мкА в standby [13].

В каждой сети должен быть только один координатор сети, выполняющий функции ее создания и организации обмена хотя бы с одним оконечным устройством. Оптимальной конфигурацией сети ЭДУСИО является «звезда» (рис. 2).

Координатором 1 сети является компьютер или ПДУ, а оконечными устройствами 2 – ЭДУСИО.

В сети ЭДУСИО возможны три варианта компоновки:

*Вариант 1* включает компьютер в качестве координатора сети и ПДУ в качестве оконечного устройства. Данная сеть полезна для настройки, тестирования и загрузки в ПДУ программ управления ЭДУСИО.

*Вариант 2* выполняется с компьютером в качестве координатора сети (вместо ПДУ) и светодиодных источников ЭДУСИО в качестве оконечных устройств. Такая сеть предназначена для настройки, тестирования ЭДУСИО, а также управления освещением, когда не требуется длительного (круглосуточного) цикла. Преимуществом этого варианта является простота изменения режимов работы ЭДУСИО; к его недостаткам следует отнести повышенное энергопотребление, сложность создания режима standby, сложность автоматической перезагрузки компьютера в аварийных ситуациях (плюс повышенное время перезагрузки операционной системы и программы).

*Вариант 3* является основным при эксплуатации и имеет ПДУ в качестве координатора сети, в которой ЭДУСИО являются оконечными устройствами. Данный вариант предназначен для управления освещением с коротким и длительным (кругло-

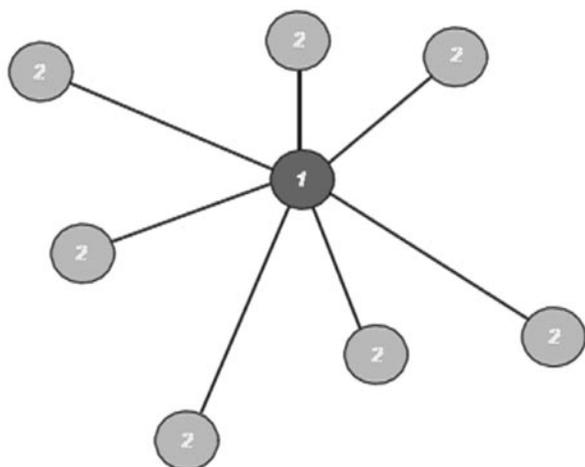


Рис. 2. Оптимальная конфигурация сети ЭДУСИО – «звезда»:

1 – координатор сети, 2 – оконечные устройства

суточным) циклом. Недостатком варианта 3 следует считать более сложный ввод программы управления освещением. К преимуществам относятся возможность работы в круглосуточном режиме, минимальное потребление энергии всей системой в ждущем режиме (когда выключено освещение), предельная быстрота восстановления освещения в аварийных ситуациях.

### Заключение

В статье приведены результаты работ по комплексной проработке и оптимизации

разветвленной беспроводной сети энергоэффективных динамически управляемых светодиодных источников освещения (ЭДУСИО) на основе новых технологий освещения и элементной светодиодной и микроэлектронной базы. Показано, что наибольшими преимуществами обладает вариант технологии построения ЭДУСИО — ZigBee с практической реализацией стандарта IEEE 802.15.4, использующего серверы нижних уровней (MAC и PHY).

Исследования выполнены в рамках проекта Минобрнауки (Контракт №02.G2531.0014).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cree: First to Break 300 Lumens-Per-Watt Barrier. Режим доступа: <http://cree.com/News-and-Events/Cree-News/PresReleases/2014/March/300LPW-LED-barrier>
2. Cree's MK-R LED Offers up to 200 Lumen-Per-Watt. LED professional Review, 2013. 35. 6. Режим доступа: [http://www.led-professional.com/downloads/LpR35\\_034254.pdf](http://www.led-professional.com/downloads/LpR35_034254.pdf)
3. **Berson D.M., Dunn F.A., Takao M.** Phototransduction by retinal ganglion cells that set the circadian clock. *Science*. 2002. Vol. 295, pp. 1070-1073.
4. **Brainard G., Hanifi J., Greeson J., Byrne B., Glickman G., Gerner E., Rollag M.** Action spectrum for melatonin regulation in humans: Evidence for a novel circadian. Photoreceptor. *Journal of Neuroscience*. 2001. Vol. 21. No. 16, pp. 6405-6412.
5. **Закгейм А.Л.** Светодиодные системы освещения: энергоэффективность, зрительное восприятие, безопасность для здоровья человека // Светотехника. 2012. Вып. 6. С. 12–20.
6. **Zukauskas A., Vaicekaskas R., Ivanauskas F., Gaska R., Shur M.S.** Optimization of white polychromatic semiconductor lamps. *Appl. Phys. Lett.* 2002. Vol. 80, pp. 234-236.
7. **Chhajed S. Xi Y., Li Y.-L., Gessmann Th., Schubert E.F.** Influence of junction temperature on chromaticity and color-rendering properties of trichromatic white-light sources based on light-emitting diodes. *J. Appl. Phys.* 2005. Vol. 97, pp. 054506-1 - 054506-8.
8. **Аладов А.В., Аладов В.Н., Валюхов В.П., Закгейм А.Л., Цацульников А.Ф.** Светозащита и новые технологии освещения // Архитектура и строительные науки. 2014. Вып. 1, 2 (18, 19). С. 2–5.
9. 4.1.8.7 Беспроводные сети ZigBee и IEEE 802.15.4. Yu. Semenov (ИТЕР-МИПТ). Режим доступа: <http://book.itep.ru/4/41/zigbee.htm>
10. ZigBee Specification. Document 053474r20. Режим доступа: [http://www.zigbee.org/en/members\\_area/documents/ZigBeeSpecifications/1.ZigBee%20Specification/docs-05-3474-20-0csg-zigbee-specification.pdf](http://www.zigbee.org/en/members_area/documents/ZigBeeSpecifications/1.ZigBee%20Specification/docs-05-3474-20-0csg-zigbee-specification.pdf)
11. **Аладов А.В., Васильева Е.Д., Закгейм А.Л., Иткинсон Г.В., Лундин В.В., Мизеров М.Н., Устинов В.М., Цацульников А.Ф.** О современных мощных светодиодах и их светотехническом применении // Светотехника. 2010. Вып. 3. С. 8–16.
12. **Цацульников А.Ф., Лундин В.В., Сахаров А.В., Заварин Е.Е., Усов С.О., Николаев А.Е., Крыжановская Н.В., Силицын М.А., Сизов В.С., Закгейм А.Л., Мизеров М.Н.** Монолитный белый светодиод с активной областью на основе квантовых ям InGaN, разделенных короткопериодными InGaN/GaN-сверхрешетками // Физика и техника полупроводников. 2010. Т. 44. Вып. 6. С. 837–840.
13. Atmel ZigBit 2.4.GHz Single chip wireless module ATZB-S1-256-3-0C [Datasheet]. Режим доступа: [http://www.atmel.com/images/atmel-42191-wireless-zigbit-atzb-s1-256-3-0-c\\_datasheet.pdf](http://www.atmel.com/images/atmel-42191-wireless-zigbit-atzb-s1-256-3-0-c_datasheet.pdf)

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**АЛАДОВ Андрей Вальменович** — старший научный сотрудник Научно-технологического центра микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН.  
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26  
aaladov@mail.ioffe.ru

**ВАЛЮХОВ Владимир Петрович** – доктор технических наук, профессор кафедры радиофизики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

**ЗАКГЕЙМ Александр Львович** – кандидат технических наук, заместитель директора по научной работе Научно-технологического центра микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН.

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

**ЧЕРНЯКОВ Антон Евгеньевич** – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Научно-технологического центра микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26  
chernyakov@mail.ioffe.ru

**ЦАЦУЛЬНИКОВ Андрей Федорович** – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26  
andrew@beam.ioffe.ru

---

*Aladov A.V., Valyukhov V.P., Zakgeim A.L., Chernyakov A.E., Tsatsulnikov A.F.*  
TYPE LED DYNAMICALLY CONTROLLED LIGHT SOURCES FOR NOVEL LIGHTING TECHNOLOGY.

The article deals with the creation of the LED light sources on the principle of RGB mixing. The design of the high-power (up to ~ 3000 lm) dynamically controlled semiconductor light source based on the matrix of multicolor emitting crystals has been developed. This lighting instrument comprises an emitting module with a control processor, power drivers, and a controlling part with appropriate software and radio-communication channel for information exchange with an emitting module. An analysis in every detail was made, and a network configuration was worked out on the basis of the ZigBee technology for various network coordinators. A circuit for blocking-out the power LED drivers was set up for heavy current (1.5 A). The polychromatic LED matrix including a monolithic white crystal was designed. As a whole the product developed is a finished system of dynamic lighting that maintains the optimal light environment for human life.

LEDs, SPECTRAL-COLOUR CHARACTERISTICS, RGB COLOUR MIXING, DYNAMIC CONTROL, ZIGBEE TECHNOLOGY, NETWORK CONFIGURATION.

#### REFERENCES

1. Cree: First to Break 300 Lumens-Per-Watt Barrier. Available at: <http://cree.com/News-and-Events/Cree-News/PresReleases/2014/March/300LPW-LED-barrier>
2. Cree's MK-R LED Offers up to 200 Lumen-Per-Watt. LED professional Review, 2013, 35, 6. [http://www.led-professional.com/downloads/LpR35\\_034254.pdf](http://www.led-professional.com/downloads/LpR35_034254.pdf)
3. **Berson D.M., Dunn F.A., Takao M.** Phototransduction by Retinal Ganglion Cells That Set the Circadian Clock. *Science*, 2002, Vol. 295, pp. 1070-1073.
4. **Brainard G., Hanifi J., Greeson J., Byrne B., Glickman G., Gerner E., Rollag M.** Action Spectrum for Melatonin Regulation in Humans: Evidence for a Novel Circadian. Photoreceptor. *Journal of Neuroscience*, 2001, Vol. 21, No. 16, pp. 6405-6412.
5. **Zakgeym A.L.** Svetodiodnye sistemy osveshcheniya: energoeffektivnost' zritel'noe vospriyatie, bezopasnost' dlya zdorov'ya cheloveka. *Svetotekhnika*, 2012, Iss. 6, pp. 12-20. (rus)
6. **Zukauskas A., Vaicekauskas R., Ivanauskas F., Gaska R., Shur M.S.** Optimization of white polychromatic semiconductor lamps. *Appl. Phys. Lett.*, 2002, Vol. 80, pp. 234-236.
7. **Chhajed S. Xi Y., Li Y.-L., Gessmann Th., Schubert E.F.** Influence of junction temperature on chromaticity and color-rendering properties of trichromatic white-light sources based on light-emitting diodes. *J. Appl. Phys.*, 2005, Vol. 97, pp. 054506-1 - 054506-8.
8. **Aladov A.V., Aladov V.N., Valyukhov V.P., Zakgeim A.L., Tsatsul'nikov A.F.** Svetoekologiya i novye tekhnologii osveshcheniya. *Arkhitektura I*

*stroitel'nye nauki*, 2014. Iss. 1, 2 (18, 19), pp. 2-5.

9. 4.1.8.7 Besprovodnye seti ZigBee i IEEE 802.15.4 (<http://book.itep.ru/4/41/zigbee.htm>)

10. ZigBee Specification. Document 053474r20. ([http://www.zigbee.org/en/members\\_area/documents/ZigBeeSpecifications/1.ZigBee%20Specification/docs-05-3474-20-0csg-zigbee-specification.pdf](http://www.zigbee.org/en/members_area/documents/ZigBeeSpecifications/1.ZigBee%20Specification/docs-05-3474-20-0csg-zigbee-specification.pdf))

11. Aladov A.V., Vasil'eva E.D., Zakgejm A.L., Itkinson G.V., Lundin V.V., Mizerov M.N., Ustinov V.M., Tsatsul'nikov A.F. O sovremennykh moshchnykh svetodiodakh i ikh svetotekhnicheskome primeneni. *Svetotekhnika*, 2010, Iss. 3, pp. 8-16. (rus)

12. Tsatsul'nikov A.F., Lundin V.V., Sakharov A.V., Zavarin E.E., Usov S.O., Nikolaev A.E., Kryzhanovskaya N.V., Sinitsyn M.A., Sizov V.S., Zakgejm A.L., Mizerov M.N. Monolitnyj belyj svetodiod s aktivnoj oblast'yu na osnove kvantovykh yam InGaN, razdelennykh korotkoperiodnymi InGaN/GaN-sverkhreshetkami. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov*, 2010, Vol. 44, Iss. 6, pp. 837-840. (rus)

13. Atmel ZigBit 2.4.GHz Single chip wireless module ATZB-S1-256-3-0C [Datasheet]. ([http://www.atmel.com/images/atmel-42191-wireless-zig-bit-atzb-s1-256-3-0-c\\_datasheet.pdf](http://www.atmel.com/images/atmel-42191-wireless-zig-bit-atzb-s1-256-3-0-c_datasheet.pdf))

#### THE AUTHORS

**ALADOV Andrei V.**

*Submicron Heterostructures for Microelectronics Research and Engineering Center of the RAS.*

26 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia

aaladov@mail.ioffe.ru

**VALYUKHOV Vladimir P.**

*St. Petersburg Polytechnic University*

29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

Valyukhov@yandex.ru

**ZAKGEIM Alexander L.**

*Submicron Heterostructures for Microelectronics Research and Engineering Center of the RAS*

26 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia

zakgeim@mail.ioffe.ru

**CHERNYAKOV Anton E.**

*Submicron Heterostructures for Microelectronics Research and Engineering Center of the RAS*

26 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia

chernyakov@mail.ioffe.ru

**TSATSUL'NIKOV Andrei F.**

*Ioffe Physical-Technical Institute*

26 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia

andrew@beam.ioffe.ru

УДК 539.1

*В.В. Кораблев, В.В. Дубов*

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

## **ВЛИЯНИЕ ЕСТЕСТВЕННЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ НА ПРИПОВЕРХНОСТНОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ**

Рассмотрено рассеяние электронов малых и промежуточных энергий в приповерхностной области полупроводникового кристалла с учетом естественных неоднородностей потенциала вблизи поверхности. Проведены оценки влияния таких неоднородностей на угловые зависимости и энергетические спектры различных групп электронов, выходящих из кристалла. Ориентационные и резонансные зависимости оказываются наиболее чувствительными к неоднородностям поверхностного потенциала. Эксперименты с поляризованными электронами повышают чувствительность метода. Показано, что предложенную методику можно использовать для получения информации, связанной как с процессами приповерхностного рассеяния, так и с характеристиками кристалла.

ПОВЕРХНОСТНОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ, ЕСТЕСТВЕННЫЕ НЕОДНОРОДНОСТИ ПОТЕНЦИАЛА, ПРИПОВЕРХНОСТНАЯ ОБЛАСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКА.

### **Введение**

Процессы излучения частиц поверхностью твердого тела, а также их рассеяния как поверхностью, так и в приповерхностной области лежат в основе современной микро- и наноэлектроники. Без детального рассмотрения таких процессов невозможны ни теоретические фундаментальные исследования взаимодействия частиц с кристаллами, ни создание современных микроэлектронных приборов и устройств. В то же время такие процессы взаимодействия в общем виде не поддаются аналитическому описанию, а численные расчеты — детальному анализу, вследствие того, что потенциал взаимодействия частицы с приповерхностной областью твердого тела имеет очень сложную структуру. Поэтому обычно при описании такого рода взаимодействий используют различные приближения. Иногда в общем процессе рассеяния есть возможность выделить одно элементарное взаимодействие и описать его, а в реги-

стрируемых экспериментальных зависимостях отделить вклад этого элементарного процесса; иногда возможно общий процесс с определенной точностью представлять в виде совокупности элементарных. Геометрия рассматриваемых явлений такова, что приповерхностный потенциал, имеющий сложную пространственную структуру как в нормальном, так и в тангенциальном (по отношению к поверхности твердого тела) направлениях, аппроксимируется однородным потенциалом во втором из указанных направлений. Довольно часто в расчетных и теоретических работах поверхности считают двумерными упорядоченными структурами, а атомы, расположенные вблизи поверхностей, аппроксимируют атомными плоскостями, параллельными поверхностям.

В силу вышесказанного, несомненно актуальным является вопрос о точности этих приближений, особенно в тех случаях, когда неоднородности хода потенци-

альных зависимостей вблизи поверхностей неустранимы.

### Естественные неоднородности приповерхностного потенциала

Причины, по которым формируются неоднородности потенциала по всем направлениям, многочисленны и разнообразны. К наиболее значимым из них можно отнести, например, непосредственные дефекты приповерхностных слоев атомов; объемные незранированные заряды атомов примесей в обедненных приповерхностных слоях; частицы, адсорбированные поверхностью твердого тела, и т. п. Такие неоднородности могут иметь как индивидуальный, так и систематический характер, в частности изменение решеточных параметров твердых тел вблизи их поверхностей. Проявляться неоднородности будут также по-разному: на энергетических спектрах и на угловых зависимостях частиц или излучений различных групп, взаимодействующих с твердым телом.

Пространственная зависимость потенциала непосредственно вблизи поверхности твердого тела определяет результаты взаимодействия с поверхностью и приповерхностной областью в первую очередь для электронов так называемых малых и промежуточных энергий (от 10 до 1000 эВ). Электроны именно этих энергий и будут рассматриваться в представленной работе. Неоднородность приповерхностного потенциала принято анализировать с помощью функции  $dS/(SdU)$ , зависящей от величины потенциала  $U$ , которая определяет часть поверхности твердого тела  $dS$ ; на поверхности  $dS$  потенциал изменяется от  $U$  до  $U + dU$ . Тем самым мы определяем, какая доля поверхности имеет потенциал, значение которого совпадает с таковым, рассчитанным в используемой модели приповерхностной области. В случае, когда потенциал твердого тела не имеет неоднородностей (в том числе и естественных), зависимость искомой функции  $dS/(SdU)$  от потенциала имеет вид дельта-функции. Наличие на поверхности твердого тела неоднородностей как в тангенциальных по отношению к границе раздела направлениях, так и в нормаль-

ном к поверхности, как показывает анализ, приводит к уширению функции  $dS/(SdU)$ . Величина уширения определяется флуктуацией поверхностного потенциала и служит количественной характеристикой, которая описывает общий вклад в вероятности процессов рассеяния от неоднородностей приповерхностного потенциала твердого тела.

Ранее в работах авторов [1, 2] было показано, что эффекты, связанные с проявлением естественных неоднородностей потенциальной энергии взаимодействия вблизи поверхности кристаллических твердых тел, выражены более четко на зависимостях рассеяния поляризованных электронов. Для различных групп поляризованных электронов как первичного пучка, так и рассеянного, или в случае вторичных электронов основной интерес при изучении рассеяния поляризованных частиц представляют энергетические зависимости интенсивностей  $I$  электронов, рассеянных твердотельной мишенью. Особо чувствительной к процессам рассеяния в приповерхностной области оказывается величина асимметрии рассеяния  $A$  [3]:

$$A = \frac{1}{P_0} \frac{I^+ - I^-}{I^+ + I^-}, \quad (1)$$

которая в случае описания рассеяния первичного пучка определяется начальной поляризацией  $P_0$  исходного пучка поляризованных частиц, направленной вдоль нормали к плоскости рассеяния, а также интенсивностями  $I^+$  и  $I^-$  пучков рассеянных электронов с различной поляризацией.

Влияние естественных неоднородностей на ориентационные эффекты рассеяния электронов малых и промежуточных энергий, так же как и в случае энергетических зависимостей, ярко проявляется при регистрации асимметрии рассеяния поляризованных частиц. Однако в этом случае, т. е. при регистрации угловых зависимостей, для оценок величины функции  $dS/(SdU)$  обычно оказывается достаточно изучения влияния рассеяния на естественных неоднородностях на величины интенсивностей электронов.

Существование различного рода неоднородностей приповерхностного потенциала, о

которых шла речь выше, подтверждают проведенные ранее прямые экспериментальные измерения [4, 5]. Физическая природа неоднородностей, как отмечалось, может быть различной. Для оценок влияния неоднородностей можно вообще абстрагироваться от их физической природы и моделировать их областями твердого тела с различными значениями работы выхода [6].

Особая ситуация возникает в связи с наличием области пространственного заряда вблизи поверхности полупроводникового твердого тела [7]. Эта область характеризуется значительной неоднородностью; она формируется дискретными зарядами примеси, которые являются источниками неоднородного потенциала в приповерхностной области.

Как было показано авторами ранее [7], в случае полупроводниковых кристаллов эффекты, связанные с влиянием естественных неоднородностей на процессы рассеяния электронов в приповерхностной области твердого тела, оказываются более выраженными. Особенно четко это проявляется при наличии области пространственного заряда вблизи поверхности. В представленной работе авторы предлагают и реализуют методику использования различных групп электронов, возникающих при облучении полупроводникового кристалла, в качестве инструментов для независимой оценки как самих характеристик естественных неоднородностей на процессы приповерхностного рассеяния частиц в случае малых и промежуточных энергий, так и влияния этих естественных неоднородностей на рассеяние электронов. Это позволяет получать более точную информацию об особенностях характеристик рассеяния частиц в приповерхностной области полупроводниковых твердых тел, в первую очередь о погрешностях, связанных с естественными неоднородностями.

#### Влияние естественных неоднородностей приповерхностного потенциала на рассеяние различных групп электронов

Потенциал в приповерхностной области полупроводникового твердого тела может рассчитываться с применением различного

рода приближений и моделей как аналитически, так и численно [8, 9]. Нам необходимо учитывать естественные неоднородности такого потенциала для различных процессов вблизи поверхности, имеющих место при ее облучении электронами малых и промежуточных энергий. В случае компьютерного расчета потенциальная энергия взаимодействия электрона с поверхностью твердого тела может быть записана в виде решения уравнения Пуассона:

$$U(\mathbf{r}) = \sum \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|} + \int_S \frac{e \sigma(\bar{\rho}')}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dS', \quad (2)$$

где плотность заряда, помимо координат  $\mathbf{r}_a$  точечных зарядов, в общем случае содержит поверхностную плотность заряда  $\sigma(\bar{\rho})$ , для которой можно записать:

$$\sigma(\rho) = e D \times \left[ \varepsilon + T \ln \frac{1 + \exp\{U(\bar{\rho}) / T\}}{1 + \exp\{(U(\bar{\rho}) + \varepsilon) / T\}} \right], \quad (3)$$

где  $D$  — плотность электронных поверхностных состояний.

Методика и детали расчетов представлены в работах [6, 7].

Численный расчет распределений неоднородностей поверхностного потенциала кристаллов, в том числе полупроводниковых, позволяет сделать однозначный вывод о том, что в среднем величина этих неоднородностей может иметь порядок, соизмеримый с изменениями потенциала в приповерхностной области твердого тела; в

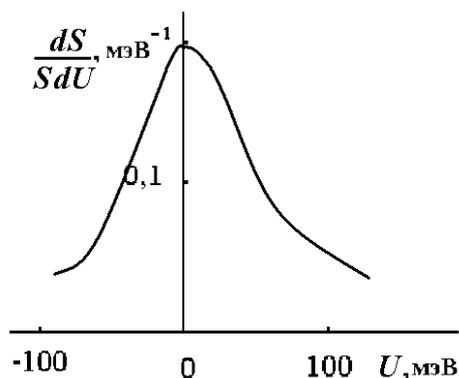


Рис. 1. Рассчитанная энергетическая зависимость функции  $dS/(SdU)$ ; степень легирования полупроводникового кристалла —  $10^{17} \text{ см}^{-3}$

отдельных же небольших областях вблизи поверхности твердого тела амплитуда потенциала и величина электрического поля могут даже значительно превосходить свои усредненные значения [7]. При этом относительная доля площади поверхности, где существенны отклонения поверхностного потенциала от значений, рассчитанных без учета наличия естественных неоднородностей поверхности, для отдельных полупроводниковых кристаллов может достигать 30 % от общей площади поверхности твердого тела.

Такие оценки ставят вопрос о необходимости анализировать влияние естественных неоднородностей приповерхностного потенциала твердого тела на эффекты, связанные с рассеянием внешних частиц вблизи полупроводниковой кристаллической поверхности. Сформулированная нами задача анализа влияния естественных неоднородностей на процессы приповерхностного рассеяния требует, в первую очередь, выделить случаи, когда такое влияние наиболее существенно. Оценки, проведенные на основании результатов работы [5], позволяют нам рекомендовать в качестве объекта исследований примесные полупроводниковые кристаллы. Простейшие оценки в любых моделях показывают, что для данных кристаллов значения функции  $dS/(SdU)$  больше в несколько раз (а то и на порядок), чем для полупроводниковых кристаллов другого типа. Значения полуширины функции  $dS/(SdU)$  достигают величин 150 мэВ для обычных стандартных параметров полупроводникового кристалла со степенью легирования порядка  $10^{17} \text{ см}^{-3}$ . В качестве примера на рис. 1 графически представлен результат расчета зависимости функции  $dS/(SdU)$  от величины  $U$ .

Как отмечалось ранее, наиболее отчетливо естественные неоднородности приповерхностного потенциала должны проявляться в ориентационных зависимостях рассеяния частиц и излучений твердыми телами. В свою очередь ориентационные эффекты взаимодействия электронов с веществом оказываются существенными для диагностики поверхности и приповерхностной области твердых тел. Как один из

вариантов использования методики, связанной с влиянием на рассеяние естественных приповерхностных неоднородностей, мы рассмотрим влияние таких неоднородностей потенциала на упругое некогерентное отражение электронов рассматриваемых энергий от твердых тел. При этом, как было сказано ранее, в качестве инструмента исследования можно использовать неполяризованные электроны.

Как известно, коэффициент  $R$  упругого отражения электронов от упорядоченных кристаллических твердых тел немонотонно зависит от угла падения электронов на поверхность твердого тела. Существование такой зависимости при упругом рассеянии электронов во всю заднюю полусферу телесных углов обусловлено в основном дифракционным рассеянием первичных электронов в кристаллах. В области промежуточных энергий процессы рассеяния внешних частиц на атомных плоскостях происходят в приповерхностной области кристаллов. Поэтому при наличии в приповерхностной области естественных неоднородностей можно ожидать их влияния на ориентационные эффекты отражения электронов промежуточных энергий. Объектом исследования в описываемых опытах по регистрации энергетических и угловых зависимостей коэффициента  $R$  интегрального отражения служит величина глубины модуляции  $\Delta_R$  угловых зависимостей  $R(\theta)$ . Величина  $\Delta_R$  определялась с помощью выражения

$$\Delta_R = (R_{\max} - R_{\min})/R_{\max},$$

где  $R_{\max}$ ,  $R_{\min}$  — значения коэффициента  $R$  в максимуме и соседнем минимуме угловой зависимости этого коэффициента.

Поведение энергетической зависимости величины  $\Delta_R$  от энергии первичной внешней частицы  $E$  представляет существенный интерес для физики взаимодействия электронов с поверхностью. Эта зависимость носит немонотонный характер в области промежуточных энергий частиц и является характеристикой ориентационных эффектов в упругом рассеянии. На рис. 2 приведены рассчитанные угловые зависимости коэффициента  $R$  для кристалла кремния

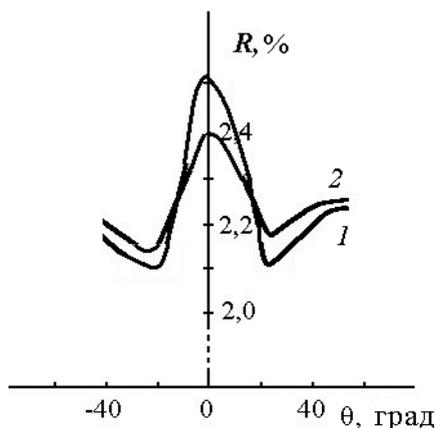


Рис. 2. Угловые зависимости коэффициента  $R$  интегрального отражения для кристалла кремния;  $E = 400$  эВ.

Расчеты выполнены без учета неоднородностей в приповерхностной области кристалла (кривая 1) и путем усреднения зависимости 1 по естественным неоднородностям приповерхностного потенциала (кривая 2)

при значениях параметров, принятых нами, и энергии первичного электрона, равной 400 эВ. На основании этих угловых зависимостей вычисляется энергетическая зависимость  $\Delta_R$ .

Кривая 1 на рис. 2 — это результат расчета с использованием параметров, соответствующих экспериментальной угловой зависимости коэффициента упругого отражения, а кривая 2 — результат усреднения зависимости 1 по естественным неоднородностям приповерхностного потенциала на основании развиваемого нами подхода. Видно, что в результате учета естественных неоднородностей приповерхностного потенциала происходит уменьшение величины глубины модуляции  $\Delta_R$ . Это позволяет объяснить имевшееся ранее противоречие между завышенными значениями величины глубины модуляции, получаемыми при расчетах, и экспериментально регистрируемыми величинами  $\Delta_R$ . Кроме того, следует вывод о важности учета влияния естественных неоднородностей на процессы приповерхностного упругого рассеяния.

Аналогично можно рассчитать влияние естественных неоднородностей приповерхностного потенциала на угловые зависимости и энергетические спектры других

групп электронов: рассеянных упруго или неупруго, а также генерируемых вторичных. Проведенный анализ показывает, что вследствие наличия естественных неоднородностей поверхностного потенциала существенно модифицируются угловые спектры Оже-эмиссии. Однако это происходит при вылете электронов из кристаллов под большими углами к их поверхности. В то же время следует отметить, что это влияние не слишком велико по абсолютным значениям — (10 – 20) %. Аналогичное влияние при вылете электронов под средними и малыми углами к поверхности приводит лишь к совсем незначительному сглаживанию ориентационных кривых. Это связано с тем, что основной вклад в формирование исследуемых зависимостей дает не область непосредственной поверхности, а приповерхностная область, расположенная в объеме. Как показали расчеты, во всех случаях рассеяния Оже-электронов влияние естественных неоднородностей сказывается менее существенно на формах спектров, чем при рассмотрении упругого отражения или при описании рассеяния поляризованных электронов.

Для поляризованных электронов рассчитывалась величина асимметрии  $A$  по формуле (1). Ее энергетическая зависимость имеет обычный вид. Учет влияния естественных неоднородностей приповерхностного потенциала на рассеяние поляризованных электронов приводит к заметному сглаживанию немонотонных зависимостей коэффициента  $A$  и даже при определенных соотношениях параметров — к незначительному сдвигу экстремумов энергетической зависимости асимметрии  $A$ .

### Выводы

Проведенный анализ показал, что естественные неоднородности поверхностного потенциала могут существенно влиять на угловые зависимости интенсивностей всех групп электронов, а также излучений, выходящих из твердого тела при облучении его электронами промежуточных энергий. При этом некоторые угловые зависимости или энергетические спектры могут заметно меняться не только количественно



(сглаживаясь), но и изменять, хотя и незначительно, свои качественные характеристики. Например, могут существенно модифицироваться ориентационные зависимости упругого отражения, резонансные спектры, характеристики рассеяния поляризованных электронов. Особо следует отметить, что существует возможность использовать наблюдения влияния естествен-

ных неоднородностей приповерхностного потенциала на рассеяние различных групп электронов на одном образце. Учет этого влияния при обработке экспериментов позволяет извлекать из наблюдаемых зависимостей дополнительную информацию, связанную как с процессами приповерхностного рассеяния, так и с характеристиками твердого тела.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Дубов В.В., Кораблев В.В.** Резонансное рассеяние электронов поверхностью полупроводника с естественными неоднородностями // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 1(165). С. 101–107.
2. **Дубов В.В., Кораблев В.В.** Рассеяние Оже-электронов на поверхности с естественными неоднородностями // Поверхность. 2002. № 4. С. 27–31.
3. **Kessler J.** Polarized electrons. Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, Springer-Verlag, 1985. 299 p.
4. **Palm H., Arbes M., Schulz M.** Fluctuation of the Au-Si Schottky barrier height. *Phys. Rev. Lett.* 1993. Vol. 71. No. 14, pp. 2224–2229.
5. **Бондаренко В.Б., Кузьмин М.В., Кораблев В.В.** Анализ естественных неоднородностей потенциала у поверхности примесного полупроводника // ФТП. 2001. Т. 35. № 8. С. 964–968.
6. **Дубов В.В.** Взаимодействие электронов промежуточных энергий с приповерхностной областью твердых тел. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2002. 157 с.
7. **Бондаренко В.Б., Кораблев В.В., Равич Ю.И.** Естественно неупорядоченный потенциал на поверхности сильно легированного полупроводника // ФТП. 2004. Т. 38. № 3. С. 331–334.
8. **Korablev V.V., Dubov V.V.** The effect of the surface and bulk electrons on the surface potential formation. *Proceedings of SPIE.* 2002. Vol. 4627. No. 2, pp. 34–37.
9. **Дубов В.В., Кораблев В.В.** Рассеяние медленных электронов поверхностью полупроводникового кристалла. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 1999. 42 с.
10. **Матисов Б.Г., Дубов В.В.** Рассеяние электронов на поверхности полупроводника. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2002. 40 с.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ДУБОВ Виктор Викторович** — доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
vicvicdub@mail.ru

**КОРАБЛЕВ Вадим Васильевич** — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

---

#### *Korablev V.V., Dubov V.V.* THE INFLUENCE OF NATURAL IRREGULARITIES ON SURFACE ELECTRON SCATTERING.

Theoretical estimations of the influence of potential natural irregularities near semiconductor surface on the angular and energy dependences of different groups of electrons emitted by crystal have been made. The electrons of low and intermediate energies scattered from a crystal were analyzed.

Orientalional and resonance dependences were found to be the most sensitive to irregularity of the surface potential. The sensitivity of experimental methods of studying the effects observed can be significantly improved by using spin-polarized electrons. The proposed method can be effectively applied both to the investigation of electron scattering by semiconductor surface and to getting information on the crystal

properties. Recommendations how to take account of the influence of surface potential natural irregularities on electron scattering in the experimental data processing are given.

SURFACE SCATTERING OF ELECTRONS, NATURAL IRREGULARITY OF POTENTIAL, SURFACE REGION OF SEMICONDUCTORS.

#### REFERENCES

1. **Dubov V.V., Korablev V.V.** Rezonansnoe rasseyanie elektronov poverkhnost'yu poluprovodnika s estestvennymi neodnorodnostyami. *St. Petersburg Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2013, No. 1(165), pp. 101-107.
2. **Dubov V.V., Korablev V.V.** Rasseyanie Ozhelektronov na poverkhnosti s estestvennymi neodnorodnostyami. *Poverkhnost'*, 2002, No. 4, pp. 27-31.
3. **Kessler J.** *Polarized electrons*. Berlin, Heidelberg, N.Y., Tokio, Springer-Verlag, 1985, 299 p.
4. **Palm H., Arbes M., Schulz M.** Fluctuation of the Au-Si Schottky barrier height. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, Vol. 71, No. 14, pp. 2224-2229.
5. **Bondarenko V.B., Kuz'min M.V., Korablev V.V.** Analiz estestvennykh neodnorodnostej potentsiala u poverkhnosti primesnogo poluprovodnika. *FTP*, 2001, Vol. 35, No. 8, pp. 964-968.
6. **Dubov V.V.** *Vzaimodejstvie elektronov promezhutochnykh energij s pripoverkhnostnoj oblast'yu tverdykh tel*. St. Petersburg, Izd. SPbGTU, 2002, 157 p.
7. **Bondarenko V.B., Korablev V.V., Ravich Yu.I.** Estestvenno neuporyadochennyj potentsial na poverkhnosti sil'no legirovannogo poluprovodnika. *FTP*, 2004, Vol. 38, No. 3, pp. 331-334.
8. **Korablev V.V., Dubov V.V.** The effect of the surface and bulk electrons on the surface potential formation. *Proceedings of SPIE*, 2002, Vol. 4627, No. 2, pp. 34-37.
9. **Dubov V.V., Korablev V.V.** *Rasseyanie medlennykh elektronov poverkhnost'yu poluprovodnikovogo kristalla*. St. Petersburg, Izd. SPbGTU, 1999, 42 p.
10. **Matisov B.G., Dubov V.V.** *Rasseyanie elektronov na poverkhnosti poluprovodnika*. St. Petersburg, Izd. SPbGTU, 2002, 40 p.

#### THE AUTHORS

##### **DUBOV Viktor V.**

*St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
vicvicdub@mail.ru

##### **KORABLEV Vadim V.**

*St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia



УДК 539.12:537.63:537.868

*G.F. Kopytov, A.A. Martynov, N.S. Akintsov*

Kuban State University, Russia

## THE MOTION OF A CHARGED PARTICLE IN THE FIELD OF AN ELECTROMAGNETIC WAVE AND IN THE CONSTANT MAGNETIC FIELD

We have done an analysis of the results on the motion of a charged particle in an external field of plane and arbitrarily polarized electromagnetic waves of high intensity in the presence of an external uniform static magnetic field. A point of interest was a solution of the equation of the motion of a charged particle in the field of the electromagnetic wave and a uniform constant magnetic field. We investigated the interaction of high intensity laser pulses with solid targets in relation to the practical development of multi-frequency lasers and the technology development of laser modulation. The problem in question is topical because of the wide practical application of high-temperature plasma forming on the surface of the target, and the search for new modes of laser-plasma interaction. The formulae for the average kinetic energy of a relativistic particle, depending on the initial data, for the amplitude of the electromagnetic wave and for the wave intensity and its polarization parameter were obtained. The dependence of the average kinetic energy on the intensity of the electromagnetic wave in the uniform constant magnetic field was derived.

PLANE ELECTROMAGNETIC WAVE, AVERAGE KINETIC ENERGY, CHARGED PARTICLE, ULTRASHORT LASER PULSE, STATIC MAGNETIC FIELD.

### I. Introduction

A current problem of practical and theoretical interest is that of a charged particle accelerated by ultra-short laser pulses of high-intensity plasma [1 – 5]. An effective method for obtaining high-energy particles is targeting the front surface of a thin foil target with high-power laser pulses. The interaction of charged particles with ultra-short femtosecond laser pulses with intensities of emission up to  $10^{22}$  W/cm<sup>2</sup> is one of the main areas of laser physics at the moment [6 – 8].

In this paper we consider the dynamics of a charged particle in an intensive electromagnetic field of elliptical polarization. The article [9] discussed the consistent derivation of the average kinetic energy of a particle. That was averaged over a period of motion in the field of the monochromatic electromagnetic wave for linear and circular polarized waves. A more general formula for the average kinetic energy of an elliptical polarized wave was found in [10]. The generalization of the results of articles [9, 10] in the presence of a uniform external

field is of great practical interest; since this case corresponds to the phenomenon of cyclotron auto-resonance [11, 12] on the basis of which such systems operate as a free-electron laser and an undulator [13].

The problem of the motion of a charged particle in the field of a plane monochromatic electromagnetic wave was formulated and solved for linear and circular polarization of the wave [14], but the interest in this topic has appeared presently in connection with the development of high-power lasers.

The aim of this work is to analyze the motion of a particle in the external field of arbitrarily polarized electromagnetic waves of high intensity and in the uniform constant magnetic field and to derive the average kinetic energy of a particle over the oscillation period of the field.

### II. Problem Statement

The equation of motion of a particle of mass  $m$  and charge  $q$  placed in an external field of a plane monochromatic wave and in a uniform constant magnetic field  $\mathbf{H}_0$  has the form (see, for example [14], paragraph 17)

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q\mathbf{E} + \frac{q}{c}[\mathbf{v} \times \mathbf{H}_\Sigma]. \quad (1)$$

In Eq. (1)  $\mathbf{H}_\Sigma = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}$  is a superposition of the constant uniform magnetic field  $\mathbf{H}_0$  and the magnetic field  $\mathbf{H}$  of the plane monochromatic electromagnetic wave.

The particle momentum  $\mathbf{p}$  and velocity  $\mathbf{v}$  are related by equality ([14], paragraph 9)

$$\mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \quad (2)$$

The change in the particle energy

$$\varepsilon = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \quad (3)$$

is determined by the equation

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = q\mathbf{E}\mathbf{v}. \quad (4)$$

It follows from (2) and (3) that the energy  $\varepsilon$ , momentum  $\mathbf{p}$ , and velocity  $\mathbf{v}$  of the particle are related by equations

$$\mathbf{p} = \frac{\varepsilon\mathbf{v}}{c^2}, \quad \mathbf{v} = \frac{c^2\mathbf{p}}{\varepsilon}. \quad (5)$$

We assume a uniform constant magnetic field  $\mathbf{H}_0 = \mathbf{k}H_0$  ( $\mathbf{k}$  – basis vector) and the plane wave propagates along the axis  $z$ . In the case of Fig. 1, the vector components of electric and magnetic fields of the plane monochromatic electromagnetic wave are given by:

$$\begin{cases} E_x = H_y = b_x \exp(-i\Phi); \\ E_y = -H_x = fb_y \exp(-i\Phi); \\ E_z = H_z = 0, \end{cases} \quad (6)$$

where

$$\Phi = \omega\xi + \psi + \varphi; \quad \xi = t - z/c;$$

$\omega$  is the carrier frequency of the wave;  $\psi$  is a wave polarization parameter;  $\varphi$  is an angle of inclination of the axes of the ellipse  $Ox$  to the axis of the coordinate system; the  $x$  and  $y$  axes coincide with the  $b_x$  and  $b_y$  axes of the polarization ellipse of the wave and  $b_x \geq b_y \geq 0$ ;  $f = \pm 1$  is a polarization parameter (the upper and lower signs in the expression for  $E_y$  correspond to the right and left polarization [15]).

### III. Solution of the Equation of the Charge Motion

The solution of Eqs. (1) and (4) with  $\mathbf{E}$  and  $\mathbf{H}$  from (6) has the form:

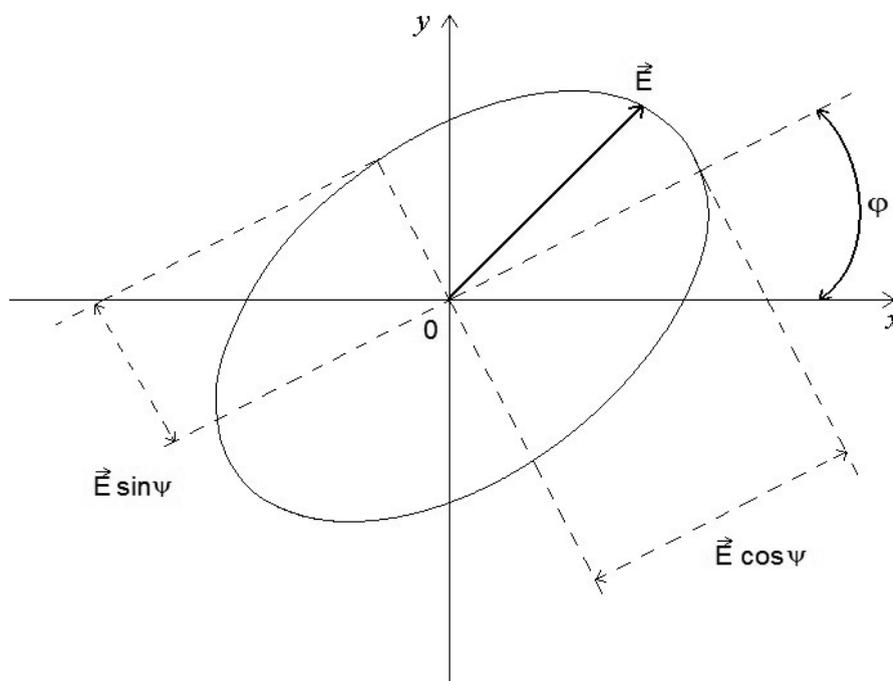


Fig. 1. The ellipse of polarization (see the text)

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{qb_x}{\omega} \sin \Phi + \frac{q}{c} H_0 y + \chi_x; \\ p_y &= \frac{fq b_y}{\omega} \sin \Phi - \frac{q}{c} H_0 x + \chi_y. \end{aligned} \quad (7)$$

The equations in (7) show the differentiation with respect to  $\xi$ :

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{qb_x c}{\omega \gamma} \sin \Phi + \omega_c y + \frac{c}{\gamma} \chi_x; \\ \dot{y} &= \frac{fq b_y c}{\omega \gamma} \sin \Phi - \omega_c x + \frac{c}{\gamma} \chi_y, \end{aligned} \quad (8)$$

where  $\omega_c = qH_0 / \gamma$  is the cyclotron frequency.

Through the constants  $\chi_x$ ,  $\chi_y$ , and  $\gamma$  determined by the initial phase of the wave

$$\Phi_0 = -kz_0 + \varphi + \psi$$

and the initial velocity of the particle  $\mathbf{v}_0 = 0$ ; of (3) and (7) we find

$$\begin{aligned} \chi_x &= \frac{mv_{x0}}{\sqrt{1 - \frac{v_0^2}{c^2}}} - \frac{qb_x}{\omega} \sin \Phi_0 - \frac{q}{c} H_0 y_0; \\ \chi_y &= \frac{mv_{y0}}{\sqrt{1 - \frac{v_0^2}{c^2}}} - \frac{fq b_y}{\omega} \sin \Phi_0 + \frac{q}{c} H_0 x_0; \\ \gamma &= \frac{mc \left(1 - \frac{v_{z0}}{c}\right)}{\sqrt{1 - \frac{v_0^2}{c^2}}}. \end{aligned} \quad (9)$$

By transforming the system of differential Eqs. (8), we obtain

$$\begin{aligned} \ddot{x} + \omega_c^2 x &= \frac{qcb_x}{\gamma} \cos \Phi + \\ &+ \frac{fq \omega_c b_y}{\gamma k} \sin \Phi + \frac{\omega_c c}{\gamma} \chi_y; \\ \ddot{y} + \omega_c^2 y &= \frac{fqcb_y}{\gamma} \cos \Phi - \\ &- \frac{q\omega_c b_x}{\gamma k} \sin \Phi - \frac{\omega_c c}{\gamma} \chi_x. \end{aligned} \quad (10)$$

The solution of the differential equations of the second order (10) is determined in the form of a sum of solutions of the homogeneous equation and the particular solution of the

inhomogeneous equation with the initial conditions. We obtain the following solutions for the  $x$  and  $y$  coordinates:

$$\begin{aligned} x &= \left( \frac{qb_x \omega}{\gamma k (\omega^2 - \omega_c^2)} - \frac{\omega \chi_y}{\omega_c \gamma k} \right) \cos \Phi_c + \\ &+ \frac{fq b_y \omega}{\gamma k (\omega^2 - \omega_c^2)} \sin \Phi_c + \frac{\omega \chi_y}{\omega_c \gamma k} - \\ &- \frac{qb_x \omega}{\gamma k (\omega^2 - \omega_c^2)} \cos \Phi - \frac{fq b_y \omega_c}{\gamma k (\omega^2 - \omega_c^2)} \sin \Phi; \\ y &= \left( \frac{\omega \chi_x}{\omega_c \gamma k} + \frac{fq b_y \omega}{\gamma k (\omega^2 - \omega_c^2)} \right) \cos \Phi_c - \\ &- \frac{qb_x \omega}{\gamma k (\omega^2 - \omega_c^2)} \sin \Phi_c - \frac{\omega \chi_x}{\omega_c \gamma k} - \\ &- \frac{fq b_y \omega}{\gamma k (\omega^2 - \omega_c^2)} \cos \Phi + \frac{qb_x \omega_c}{\gamma k (\omega^2 - \omega_c^2)} \sin \Phi, \end{aligned} \quad (11)$$

where  $k = \omega / c$ ;  $\Phi_c = \omega_c t$ .

Using (7) and (11), we obtain expressions for the  $p_x$  and  $p_y$  components of the momentum of the particle:

$$\begin{aligned} p_x &= A \sin \Phi + B \cos \Phi_c + \\ &+ C \sin \Phi_c + D \cos \Phi; \\ p_y &= E \sin \Phi + F \cos \Phi_c + \\ &+ G \sin \Phi_c + I \cos \Phi. \end{aligned} \quad (12)$$

Therefore,

$$\begin{aligned} A &= \frac{qb_x}{\omega} \left( \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_c^2} \right); B = \chi_x + \frac{fq b_y \omega_c}{\omega^2 - \omega_c^2}; \\ C &= -\frac{qb_x \omega_c}{\omega^2 - \omega_c^2}; D = -\frac{fq b_y \omega_c}{\omega^2 - \omega_c^2}; \\ E &= \frac{fq b_y}{\omega} \left( \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_c^2} \right); F = \chi_y - \frac{qb_x \omega_c}{\omega^2 - \omega_c^2}; \\ G &= -\frac{fq b_y \omega_c}{\omega^2 - \omega_c^2}; I = \frac{qb_x \omega_c}{\omega^2 - \omega_c^2}. \end{aligned} \quad (13)$$

From the formulae (3) and (4) we find the  $p_z$  component of the momentum of the particle:

$$p_z = \gamma g; \quad (14)$$

consequently,

$$\begin{aligned} g &= h - \frac{q^2 (b_x^2 + b_y^2)}{4\gamma^2 (\omega^2 - \omega_c^2)} \cos(2\Phi) + \\ &+ \frac{1}{\gamma^2} (AB + EF) \sin \Phi \cos \Phi_c + \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{\gamma^2} (AC + EG) \sin \Phi \sin \Phi_c + \\
 & + \frac{1}{4\gamma^2} (B^2 + F^2 - (C^2 + G^2)) \cos 2\Phi_c + \\
 & + \frac{1}{2\gamma^2} (BC + FG) \sin(2\Phi_c) + \\
 & + \frac{1}{\gamma^2} (FI + BD) \cos \Phi_c \cos \Phi; \\
 h = \frac{1}{2} & \left[ \frac{m^2 c^2}{\gamma^2} - 1 + \frac{1}{2\gamma^2} (A^2 + B^2 + C^2 + \right. \\
 & \left. + D^2 + E^2 + F^2 + G^2 + I^2) \right]. \quad (16)
 \end{aligned}$$

From (3) and (4) we find the expression for the energy of the particle:

$$\varepsilon = c\gamma(1 + g). \quad (17)$$

From (5), (12) and (14) we obtain a parametric representation of the particle velocity in the parameter  $\xi$ :

$$\begin{aligned}
 v_x = \frac{dx}{dt} & = \frac{c}{(1 + g)\gamma} (A \sin \Phi + B \cos \Phi_c + \\
 & + C \sin \Phi_c + D \cos \Phi), \\
 v_y = \frac{dy}{dt} & = \frac{c}{(1 + g)\gamma} (E \sin \Phi + F \cos \Phi_c + \\
 & + G \sin \Phi_c + I \cos \Phi), \\
 v_z = \frac{dz}{dt} & = \frac{cg}{1 + g}.
 \end{aligned} \quad (18)$$

From (11) and (18) we determine that the motion of a particle in the external field of the plane monochromatic electromagnetic wave in a constant uniform magnetic field is the imposition of movement with the constant velocity  $v$  and vibrational motion with the frequency  $\tilde{\omega} = 2\pi / \tilde{T}$  different from the frequency of the field  $\omega$  and the cyclotron frequency  $\omega_c$ . Then integrating (14), we obtain the equation of motion along the axis  $z$ :

$$z(t) = \tilde{z} + \tilde{v}_z t + \theta(t) + \eta(t), \quad (19)$$

where  $\tilde{z}$  is constant, and

$$\theta(t + \tilde{T}) = \theta(t), \quad \eta(t + \tilde{T}_c) = \eta(t) \quad (20)$$

are periodic functions.

In formula (18)

$$\tilde{v}_z = \frac{ch}{1 + h}. \quad (21)$$

It follows from (19) that  $g(\xi)$  from (15) is a periodic function defined by the periods  $\tilde{T}$  and  $\tilde{T}_c$ . The period  $\tilde{T}$  of oscillation of the particle in the field of a plane monochromatic wave and the period  $\tilde{T}_c$  of cyclotron oscillations are determined from the formulae

$$\Phi(t + \tilde{T}) = \Phi(t) + 2\pi, \quad \Phi_c(t + \tilde{T}_c) = \Phi_c(t) + 2\pi;$$

from which, taking into account (6), (19) and (20), it follows that

$$\tilde{T} = \frac{2\pi}{\omega} \left( \frac{1}{1 - \tilde{v}_z / c} \right) = \frac{2\pi}{\omega} (1 + h); \quad \tilde{T}_c = \frac{2\pi}{\omega_c}. \quad (22)$$

Thus, the motion of a particle is a superposition of two kinds of periodic motion; they are  $\tilde{T}$  and  $\tilde{T}_c$ .

#### IV. The Motion of a Particle Averaged over an Oscillation Period

In this section we will perform the averaging of the momentum  $\mathbf{p}$  and the energy  $\varepsilon$  of the particles of the period of its oscillations (22) with (12), (14) and (17) in the field of an electromagnetic wave and the constant magnetic field.

Consider a new variable of the integration  $\xi' = \xi(t')$ , then

$$\begin{aligned}
 \Phi' & = \Phi(t'); \\
 dt' & = \frac{d\Phi'}{\omega} \frac{1}{1 - v_z(t) / c} = \frac{1 + g}{\omega} d\Phi'; \\
 \Phi'_c & = \Phi_c(t'); dt' = \frac{d\Phi'_c}{\omega_c}.
 \end{aligned} \quad (23)$$

Since the motion of a particle is a superposition of two kinds of periodic motion with frequencies  $\omega$  and  $\omega_c$ , averaging will be carried out according to the formula

$$\bar{f}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\Phi(t)}^{\Phi(t+\tilde{T})} \frac{1}{\tilde{T}} \int_{\Phi_c(t)}^{\Phi_c(t+\tilde{T}_c)} f(t') \frac{1 + g}{\omega} d\Phi' d\Phi'_c, \quad (24)$$

where  $f(t')$  is an arbitrary function taking into account (6), (19) and (22).

Averaging the components (18) of the particle velocity, we obtain:

$$\bar{v}_x = 0; \quad \bar{v}_y = 0; \quad \bar{v}_z = \frac{ch}{1 + h}. \quad (25)$$

As might be expected, the speed of the particle  $\bar{v}_z$  in (25) corresponds  $\tilde{v}_z$  with (21).

It follows from (25) that the average transverse momentum component of the particle is zero. From the average value of the longitudinal component of the particle momentum, we obtain the expression:

$$\begin{aligned} \bar{p}_z = & \frac{\gamma}{1+h} \left( h + h^2 + \frac{q^4(b_x^2 + b_y^2)^2}{32\gamma^4(\omega^2 - \omega_c^2)^2} + \right. \\ & + \frac{q^2}{4\gamma^4} \left( \frac{\omega}{\omega^2 - \omega_c^2} \right)^2 (b_x\chi_x + fb_y\chi_y)^2 + \\ & + \frac{q^4(b_x^2 + b_y^2)^2\omega_c^2\omega^2}{4\gamma^4(\omega^2 - \omega_c^2)^4} + \frac{1}{2} \left( \frac{\chi_x^2 + \chi_y^2}{4\gamma^2} - \right. \\ & \left. - \frac{q\omega_c}{2\gamma^2(\omega^2 - \omega_c^2)} (b_x\chi_y - fb_y\chi_x) \right)^2 + \quad (26) \\ & + \frac{q^2\omega_c^2}{8\gamma^4(\omega^2 - \omega_c^2)^2} (b_x\chi_x + fb_y\chi_y)^2 + \\ & + \frac{1}{4} \left( \frac{q\omega_c}{\gamma^2(\omega^2 - \omega_c^2)} (b_x\chi_y - fb_y\chi_x) - \right. \\ & \left. - \frac{q^2(b_x^2 + b_y^2)\omega_c^2}{\gamma^2(\omega^2 - \omega_c^2)^2} \right)^2 \Bigg). \end{aligned}$$

The average energy  $\bar{\varepsilon}$  of the particles is determined by the formula:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} = & \frac{c\gamma}{1+h} \left( (1+h)^2 + \frac{q^4(b_x^2 + b_y^2)^2}{32\gamma^4(\omega^2 - \omega_c^2)^2} + \right. \\ & + \frac{q^2}{4\gamma^4} \left( \frac{\omega}{\omega^2 - \omega_c^2} \right)^2 (b_x\chi_x + fb_y\chi_y)^2 + \\ & + \frac{q^4(b_x^2 + b_y^2)^2\omega_c^2\omega^2}{4\gamma^4(\omega^2 - \omega_c^2)^4} + \frac{1}{2} \left( \frac{\chi_x^2 + \chi_y^2}{4\gamma^2} - \right. \\ & \left. - \frac{q\omega_c}{2\gamma^2(\omega^2 - \omega_c^2)} (b_x\chi_y - fb_y\chi_x) \right)^2 + \quad (27) \\ & + \frac{q^2\omega_c^2}{8\gamma^4(\omega^2 - \omega_c^2)^2} (b_x\chi_x + fb_y\chi_y)^2 + \\ & + \frac{1}{4} \left( \frac{q\omega_c}{\gamma^2(\omega^2 - \omega_c^2)} (b_x\chi_y - fb_y\chi_x) - \right. \\ & \left. - \frac{q^2(b_x^2 + b_y^2)\omega_c^2}{\gamma^2(\omega^2 - \omega_c^2)^2} \right)^2 \Bigg). \end{aligned}$$

It is obvious that (27) depends on the intensity of the wave from the polarization of the initial phase and the initial velocity.

### V. The Case of an Arbitrary Polarization for a Particle Being Initially at Rest

Consider the case when the particle is initially at rest ( $\mathbf{v}_0 = 0$ ). Formulae (9) and (12) express  $\chi_x$ ,  $\chi_y$ ,  $\gamma$ , and, taking into account that

$$\Phi(0) = \Phi_0 = -kz_0 + \varphi + \psi, \quad \Phi_c(0) = \Phi_{c0} = 0,$$

we obtain

$$\begin{aligned} \chi_x = & -\frac{qb_x}{\omega} \left( \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_c^2} \right) \sin \Phi_0 - \\ & - \frac{fq b_y \omega_c}{\omega^2 - \omega_c^2} (1 - \cos \Phi_0); \quad (28) \\ \chi_y = & -\frac{fq b_y}{\omega} \left( \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_c^2} \right) \sin \Phi_0 + \\ & + \frac{qb_x \omega_c}{\omega^2 - \omega_c^2} (1 - \cos \Phi_0). \end{aligned}$$

For a wave with an arbitrary polarization [16]

$$b_x^2 \pm b_y^2 = \rho^2 b^2, \quad (29)$$

where  $\rho$  is the ellipticity parameter ( $\rho = \pm 1$  corresponds to the linear polarization and  $\rho = \pm 1/\sqrt{2}$  does to the circular one).

In other cases, the value  $\rho$  corresponds to an elliptical polarization ( $0 \leq |\rho| \leq 1$ ), in which:

$$\begin{aligned} \chi_x^2 + \chi_y^2 = & \frac{q^2\rho^2 b^2}{\omega^2} \left( \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_c^2} \right)^2 \sin^2 \Phi_0 + \\ & + \frac{q^2\rho^2 b^2 \omega_c^2}{(\omega^2 - \omega_c^2)^2} (1 - \cos \Phi_0)^2; \quad (30) \end{aligned}$$

$$(b_x\chi_x + fb_y\chi_y)^2 = \quad (31)$$

$$= \frac{q^2\rho^4 b^4}{\omega^2} \left( \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_c^2} \right)^2 \sin^2 \Phi_0;$$

$$b_x\chi_y - fb_y\chi_x = \frac{q\rho^2 b^2 \omega_c}{\omega^2 - \omega_c^2} (1 - \cos \Phi_0). \quad (32)$$

From (15) we obtain the value of  $h$  at the initial time:

$$h = \frac{1}{2} \left[ \frac{q^2 \rho^2 b^2}{2m^2 c^2 (\omega^2 - \omega_c^2)} \sin^2 \Phi_0 + \frac{q^2 \rho^2 b^2 (\omega^2 + 3\omega_c^2)}{2m^2 c^2 (\omega^2 - \omega_c^2)^2} \right] \times \left( 2S + 2N + \frac{\mu(N^2 + T + S^2)}{4Q^2 + \mu N + \mu S} \right), \quad (33)$$

Let

$$\omega_c = n\omega, \quad (34)$$

where  $n$  is a frequency ratio between  $\omega_c$  and  $\omega$ , and besides  $n \in [0; 1)$ , then

$$h = \frac{\mu}{4} \left[ \frac{1}{(1 - n^2)} \sin^2 \Phi_0 + \frac{(1 + 3n^2)}{(1 - n^2)^2} \right]; \quad (35)$$

and, according to (16),

$$\mu = \frac{q^2 \rho^2 b^2}{m^2 c^2 \omega^2} = \frac{2q^2}{\pi m^2 c^5} I \lambda^2, \quad (36)$$

where  $I = c\rho^2 b^2 / 4\pi$  is the intensity of the elliptically polarized electromagnetic wave, and  $\lambda = 2\pi c / \omega$  is the wavelength.

By substituting (28) – (36) in (27), we obtain the average energy of a particle at rest in the initial wave of arbitrary polarization:

$$\bar{\varepsilon} - mc^2 = \frac{mc^2 \mu}{8Q^2} \times \quad (37)$$

where

$$S = (1 - n^2) \sin^2 \Phi_0; T = 4(2 + n^2 - 2n^4) \sin^2 \Phi_0;$$

$$N = 1 + 3n^2; Q = 1 - n^2.$$

As can be seen from (37), the average energy of a particle depends on the intensity of the wave polarization parameter  $\psi$ , on the angle of inclination  $\varphi$  of the ellipse to the axis  $Ox$  of the coordinate system, on the initial phase, on the frequency ratio of the parameter  $n$ .

The energy  $\langle \bar{\varepsilon} \rangle$  of the charged particle, being further averaged over the initial phase  $\Phi_0$ , in the plane monochromatic arbitrarily polarized wave is given by

$$\langle \bar{\varepsilon} \rangle - mc^2 = \frac{mc^2 \mu}{4(n^2 - 1)^2} \times \left( \frac{\sqrt{2}J^3}{4\mu K} + \frac{\mu(1 - n^2)^2}{2\sqrt{2}JK} - \frac{\sqrt{2}(2n^4 - n^2 - 2)J}{(n^2 - 1)K} + \frac{19n^4 - 6n^2 - 21}{4(n^2 - 1)} - \frac{2(n^2 - 1)^2}{\mu} \right), \quad (38)$$

where

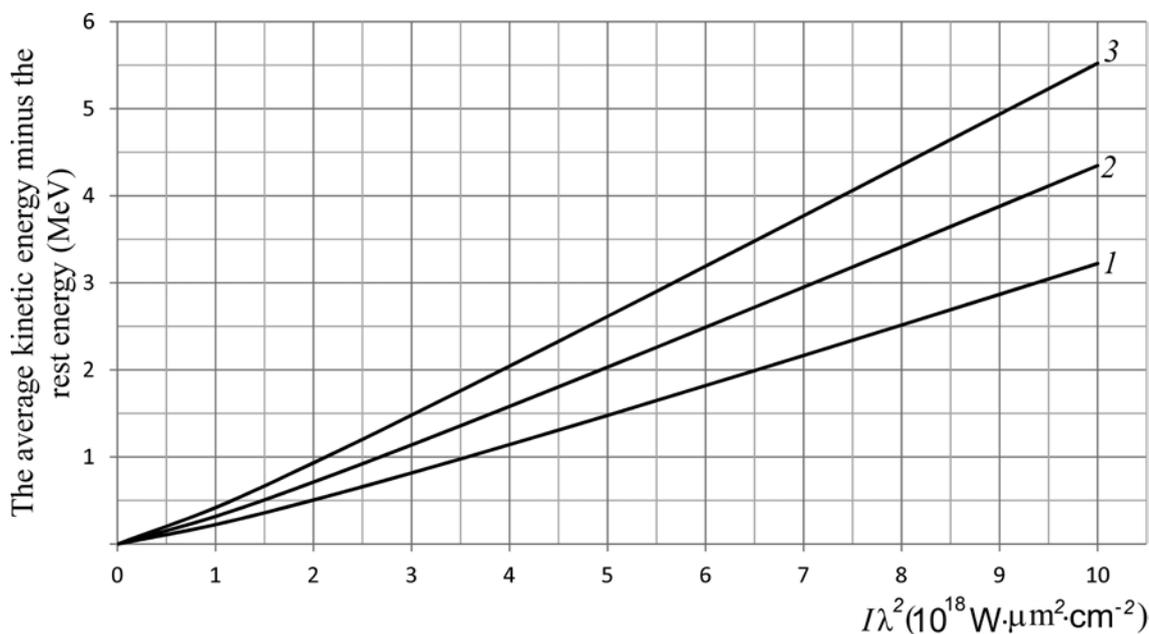


Fig. 2. The dependence of the average kinetic energy of the electron on the intensity of the plane monochromatic electromagnetic waves with elliptical polarization for  $\rho = \sqrt{0.9}$ , with different values for  $n$ : 0 (1), 0.2 (2), 0.4 (3)

$$J = \sqrt{3\mu n^2 + \mu + 4(n^2 - 1)^2};$$

$$K = \sqrt{\mu(n^2 + 1) + 2(n^2 - 1)^2}.$$

Fig. 2 shows the dependence of the average kinetic energy of electrons on the intensity of the monochromatic plane electromagnetic waves with elliptical polarization [10] for  $\rho = \sqrt{0.9}$ ,  $n = 0$ ,  $n = 0.2$  and  $n = 0.4$ . In the absence of the constant magnetic field, for the cases of linear and circular polarization of (38) we obtain the formula for the average energy of a particle characteristics for the case of linear [9, 10] and circular [10] polarizations.

By substituting the values of the parameters

$$n = 0; \quad \omega\xi_0 = \pi/2, \quad 3\pi/2; \quad \varphi = \pi/2,$$

$$3\pi/2; \quad \psi = \pi/2, \quad 3\pi/2; \quad \rho = \pm 1/\sqrt{2}$$

in (38), we obtain the kinetic energy of the particles for the circular polarization [9].

As can be seen from Fig. 2, the particle energy increases with increasing the values of

$$I\lambda^2 = 10 \times 10^{18} W \cdot \mu\text{m}^2\text{cm}^{-2}$$

and of the parameter  $n$ . For elliptical polarization with  $\rho = \sqrt{0.9}$ ; and with  $n = 0.2$  the energy increases by 1.5 MeV and with  $n = 0.4$  it does by 2.2 MeV.

## VI. Conclusions

This article offers the exact solution of the equations of a charged particle motion in the external field for elliptically polarized electromagnetic waves and the uniform constant magnetic field. It indicates the dependence of the electron velocity on the intensity of the monochromatic plane wave in a uniform constant magnetic field for the cases of elliptical polarization which are, therefore, the cases of different initial conditions of the charged particle motion and wave polarization.

The values of the momentum and energy of the particle, averaged over the period of vibration, were calculated. It was shown that motion of the particle is the superposition of motion at a constant velocity and vibrational motion with the frequency of the electromagnetic field and the cyclotron frequency different from the field frequency. In the absence of a constant uniform field, all the formulae go to the appropriate formulae given in [10]. The solutions obtained are presented in the explicit dependence on the initial data, the amplitude of the electromagnetic wave, the wave intensity and its polarization parameter that allows everyone to apply the solutions in practice. The results of our investigation will be useful for the interpretation of experiments with plasma placed in a homogeneous constant magnetic field.

## REFERENCES

1. d'Humieres E., Lefebvre E., Gremillet L., Malka V. Proton Acceleration in High-Intensity Laser Interaction with Thin Foils. *Phys. Plasmas*, 2005, No. 12, pp. 9902-9908.
2. Mora P. Thin-Foil Expansion into a Vacuum. *Phys. Rev. E*, 2005, No. 72, pp. 056401-056406.
3. Oishi Y., Nayuki T., Fujii T. Measurement of Source Profile of Proton Beams Generated by Ultraintense Laser Pulses Using a Thomson Mass Spectrometer. *Phys. Plasmas*, 2005, No. 12, pp. 073102-073107.
4. Pukhov A., Gordienko S., Kiselev S. The Bubble Regime of Laser-Plasma Acceleration: Monoenergetic Electrons and Scalability. *Rep. Prog. Phys.*, 2004, No. 46, pp. 179-186.
5. Sentoku Y., Cowan T.E., Kemp A., Ruhl H. High Energy Proton Acceleration in Interaction of Short Pulse with Dense Plasma Target. *Phys. Plasmas*, 2003, No. 10, pp. 2009-2014.
6. Umstadter D.J. Relativistic Laser-Plasma Interactions. *Phys. D: Appl. Phys.*, 2003, No. 36, pp. 152-159.
7. Wilks S.C., Kruer W.L., Tabak M., Langdon A.B. Absorption of Ultra-Intense Laser Pulses. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, No. 69, pp. 1383-1386.
8. Wilks S.C., Landon A.B., Cowan T.E. Energetic Proton Generation in Ultra-Intense Laser-Solid Interactions. *Phys. Plasmas*, 2001, No. 8, pp. 542-549.
9. Andreev S.N., Makarov V.P., Rukhadze A.A. On the Motion of a Charged particle in a Plane Monochromatic Electromagnetic Wave. *Quantum Electronics*, 2009, Vol. 39, No. 1, pp. 68-72. (rus)
10. Kopytov G.F., Martynov A.A., Akintsov N.S. A Charged Particle Moves in the Field of the Plane Elliptically Polarized Electromagnetic Wave. *Fundamental research: Physical and mathematical sciences*, 2014, No. 9 (5), pp. 1013-1018. (rus)
11. Milant'ev V.P. Cyclotron Autoresonance

and Its Applications. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, 1997, Vol. 167, No. 1, pp. 3-16. (rus)

12. **Milant'ev V.P.** Cyclotron Autoresonance – 50 Years since Discovery. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, 2013, Vol. 183, No. 8, pp. 875-884. (rus)

13. **Bessonov E.G.** Undulator Radiation, Free Electron Lasers. *Proceedings of the Institute of Physics of the P.N. Lebedev*, 1993, Vol. 214, pp. 3-101.

14. **Landau L.D., Lifshits E.M.** The Classical Theory of Fields. Moscow, Nauka, 2004. 536 p. (rus)

15. **Newton R.** Scattering Theory of Waves and Particles. Moscow, Mir, 1967. 607 p. (rus)

16. **Azzam R.M., Bashara N.M.** Ellipsometry and Polarized Light. Moscow, Mir, 1981. 583 p. (rus)

#### THE AUTHORS

**KOPYTOV Gennady F.**

*Kuban State University*

149 Stavropolskaya St., Krasnodar, 350040, Russia.  
g137@mail.ru

**MARTYNOV Alexander A.**

*Kuban State University*

149 Stavropolskaya St., Krasnodar, 350040, Russia.  
martynov159@yandex.ru

**AKINTSOV Nikolay S.**

*Kuban State University*

149 Stavropolskaya St., Krasnodar, 350040, Russia.  
akintsov777@mail.ru

### Копытов Г.Ф., Мартынов А.А., Акинцов Н.С. ДВИЖЕНИЕ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В ПОЛЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ И В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ.

Решение уравнения движения заряженной частицы в поле электромагнитной волны и постоянном однородном магнитном поле представляет интерес для исследования взаимодействия лазерных импульсов большой интенсивности с твердыми мишенями, в связи с практической разработкой многочастотных лазеров и развитием техники модуляции лазерного излучения. Актуальность проблемы обусловлена широким практическим применением высокотемпературной плазмы, образующейся на поверхности мишени и поисками новых режимов взаимодействия лазер – плазма. Проведен анализ задачи о движении заряженной частицы во внешнем поле плоской, произвольно поляризованной электромагнитной волны большой интенсивности при наличии внешнего однородного постоянного магнитного поля. Получены формулы для средней кинетической энергии релятивистской частицы в зависимости от начальных данных, амплитуды электромагнитной волны, интенсивности волны и ее параметра поляризации. Исследованы различные случаи начальных условий движения заряженной частицы и поляризации волны. Получена зависимость средней кинетической энергии от интенсивности электромагнитной волны в постоянном магнитном поле.

ПЛОСКАЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНАЯ ВОЛНА, СРЕДНЯЯ КИНЕТИЧЕСКАЯ ЭНЕРГИЯ, УЛЬТРАКОРОТКИЙ ЛАЗЕРНЫЙ ИМПУЛЬС, ЗАРЯЖЕННАЯ ЧАСТИЦА, ПОСТОЯННОЕ МАГНИТНОЕ ПОЛЕ.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **d'Humieres E., Lefebvre E., Gremillet L., Malka V.** Proton acceleration in high-intensity laser interaction with thin foils // *Phys. Plasmas*, 2005. No. 12, pp. 9902-9908.

2. **Mora P.** Thin-foil expansion into a vacuum // *Phys. Rev. E*, 2005. No. 72, pp. 056401-056406.

3. **Oishi Y., Nayuki T., Fujii T.** Measurement of source profile of proton beams gener-

ated by ultraintense laser pulses using a Thomson mass spectrometer // *Phys. Plasmas*. 2005. No. 12, pp. 073102-073107.

4. **Pukhov A., Gordienko S., Kiselev S.** The bubble regime of laser-plasma acceleration: monoenergetic electrons and scalability // *Rep. Prog. Phys.* 2004. No. 46, pp. 179-186.

5. **Sentoku Y., Cowan T.E., Kemp A., Ruhl**



Н. High energy proton acceleration in interaction of short pulse with dense plasma target // Phys. Plasmas. 2003. No. 10, pp. 2009–2014.

6. Umstadter D.J. Relativistic laser – plasma interactions // Phys. D: Appl. Phys. 2003. No. 36, pp. 152–159.

7. Wilks S. C., Kruer W.L., Tabak M., Langdon A.B. Absorption of ultra-intense laser pulses // Phys. Rev. Lett. 1992. No. 69, pp. 1383–1386.

8. Wilks S.C., Landon A.B., Cowan T.E. Energetic proton generation in ultra-intense laser-solid interactions // Phys. Plasmas. 2001. No. 8, pp. 542–549.

9. Андреев С.Н., Макаров В.П., Рухадзе А.А. О движении заряженной частицы в плоской монохроматической электромагнитной волне // Квантовая электроника. 2009. Т. 39. № 1. С. 68–72.

10. Копытов Г.Ф., Мартынов А.А., Акинцов Н.С. Движение заряженной частицы в поле плоской эллиптически поляризованной электро-

магнитной волны // Фундаментальные исследования: Физико-математические науки. 2014. № 9. Ч. 5. С. 1013–1018.

11. Милантьев В.П. Явление циклотронного авторезонанса и его применения // Успехи физических наук. 1997. Т. 167. № 1. С. 3–16.

12. Милантьев В.П. Циклотронный авторезонанс (к 50-летию открытия явления) // Успехи физических наук. 2013. Т. 183. № 8. С. 875–884.

13. Бессонов Е.Г. Ондюляторное излучение, лазеры на свободных электронах // Труды физического института им. П.Н. Лебедева. 1993. Вып. 214. С. 3–101.

14. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля: 8-е изд., стереотипное. М.: Физматлит, 2012. 536 с.

15. Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. М.: Мир. 1969. 607 с.

16. Аззам Р., Башара Н. Эллипсометрия и поляризованный свет. М.: Мир. 1981. 583 с.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**КОПЫТОВ Геннадий Филиппович** – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой радиофизики и нанотехнологий Кубанского государственного университета.

350040, Россия, г. Краснодар, Ставропольская ул., 149  
g137@mail.ru

**МАРТЫНОВ Александр Алексеевич** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики и компьютерных технологий Кубанского государственного университета.

350040, Россия, г. Краснодар, Ставропольская ул., 149  
martynov159@yandex.ru

**АКИНЦОВ Николай Сергеевич** – аспирант кафедры радиофизики и нанотехнологий Кубанского государственного университета.

350040, Россия, г. Краснодар, Ставропольская ул., 149  
akintsov777@mail.ru

УДК 533.9.08.541.182.2/3

*В.Е. Привалов, С.В. Половченко, П.В. Чартий*

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

## **ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ЗОНДИРОВАНИЕ ПРОМЫШЛЕННЫХ АЭРОДИСПЕРСНЫХ ПОТОКОВ**

В данной статье отражены результаты исследования зависимости оптических параметров аэродисперсных потоков, созданных на специальном пылевом стенде, от среднего диаметра частиц пыли. Установка представляет собой замкнутый контур с импульсной инжекцией аэрозольного материала и реализует возможности лазерного зондирования аэродисперсного потока одновременно на нескольких длинах волн методом спектральной прозрачности и интегрального светорассеяния. Установлено, что по измеренному методами лазерного зондирования (основаны на теории рассеяния Ми) среднему объемно-поверхностному диаметру функции распределения частиц по размерам на выходе в атмосферу можно восстанавливать саму функцию распределения частиц по размерам.

ПОТОК, АЭРОЗОЛЬ, АЭРОДИСПЕРСНЫЙ ПОТОК, ЛАЗЕР, РАЗМЕР ЧАСТИЦ, СРЕДНИЙ ОБЪЕМНО-ПОВЕРХНОСТНЫЙ ДИАМЕТР ЧАСТИЦ, ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ.

### **Введение**

Различные аэрозоли часто встречаются в повседневной жизни, а также присутствуют во многих технологических процессах. Измерение концентрации и распределения промышленных аэрозольных частиц по размерам как в технологических газовых потоках, так и в атмосферном воздухе является по-прежнему актуальной задачей. Дополнения к санитарно-гигиеническим требованиям (приняты в 2010 году), которые предъявляются к содержанию в атмосфере мелкодисперсных взвешенных частиц [1], поставили перед исследователями новую задачу, связанную с необходимостью оценки концентраций  $PM_{2,5}$  и  $PM_{10}$ . Последние подразумевают фракции частиц с аэродинамическими диаметрами менее 2,5 и 10 мкм, соответственно.

Промышленные аэродисперсные потоки характеризуются значительными концентрациями и полидисперсностью. При этом функция распределения частиц по размерам и концентрация, как правило, несут в

себе информацию о состоянии технологического процесса. Для контроля указанных параметров аэрозолей требуются приборы и измерительные комплексы, отвечающие основным требованиям, характерным для диагностических приборов: достоверность, оперативность представляемых показателей, компактность и возможность компьютерной обработки необходимого объема данных в режиме реального времени.

На сегодняшний день наибольшее распространение получили оптические методы анализа аэрозолей. Такой выбор связан с определенными преимуществами данных методов перед прочими:

неразрушающим воздействием оптического излучения на структуру аэрозоля;

хорошо разработанной теорией распространения и взаимодействия электромагнитного излучения с различными средами;

существованием большого количества промышленно выпускаемых разнообразных типов источников излучения, оптических систем и их компонентов;



большим выбором прикладных программных продуктов и математических методов расчета, относящихся к оптическим измерениям.

При выборе методики регистрации излучения, рассеянного аэрозолями, необходима априорная информация о его связи с заданными характеристиками аэрозоля (средний размер, концентрация и др.) для выбранного приемника излучения.

Таким образом, цель настоящей работы – создание управляемого аэродисперсного потока и анализ параметров аэрозоля в потоке, нахождение связи этих параметров с регистрируемым рассеянием. На этой основе ставилась задача выбора оптимального метода контроля базовых параметров. За отправную точку разработки метода были приняты аэродисперсные потоки на цементном производстве.

### Методы исследования

Наиболее перспективными из всего многообразия методов и систем, которые используются для измерения массовых концентраций и распределения частиц по размерам, являются интегральные методы лазерного зондирования. Такие методы применяются, в частности, и при исследовании аэродисперсных потоков реальных технологических процессов цементного производства, и при условиях рассеяния воздушных потоков в атмосфере.

Особое место среди указанных применяемых методов лазерного зондирования занимают методы модифицированной спектральной прозрачности (ММСП) и интегрального светорассеяния (полной индикатрисы, МИСР).

Что касается дифференциальных оптических методов, то они не нашли практического применения для измерения концентрации твердых частиц в реальном потоке полидисперсного цементного аэрозоля, так как последний характеризуется широким диапазоном концентраций (от 10 до 100 г/м<sup>3</sup>); при этом размеры частиц находятся в пределах от 0,1 до 100 мкм [2, 3].

Поскольку измерение параметров аэрозольных частиц целесообразно проводить непосредственно в газоходе, лидарные ме-

тоды измерения практически не используются из-за ограниченных размеров газоходов и паразитного рассеяния назад от стенки газохода. Метод малых углов [3, 4] также оказывается неприменимым, в связи с тем, что реальное производство цемента сопровождается низкой шумоизоляцией и повышенной вибрацией технологического оборудования.

Измерение широкого спектра размеров частиц, как уже отмечалось, представляет собой технически сложную задачу. Она выполняется, как правило, только в лабораторных условиях, на дорогостоящем аналитическом оборудовании, но не в реальных временных рамках и реальном аэродисперсном потоке. Известны методы лазерного зондирования аэродисперсных потоков, которые позволяют измерять средние размеры аэрозольных частиц. В частности, при помощи метода спектральной прозрачности можно определять распределение спектра частиц по размерам; при этом в технологическом процессе измеряют средние спектры частиц и используют инварианты спектров их размеров. Например, в работе [5] показано, что модифицированный метод спектральной прозрачности позволяет измерять средние размеры частиц в потоке в реальном времени на двух и более длинах волн. Значения длин волн лазерного излучения выбираются таким образом, чтобы отношение средних значений фактора рассеяния для этих длин волн (оно равно отношению соответствующих значений оптической толщины) было монотонной функцией среднего объемно-поверхностного диаметра  $\delta_{32}$ . Тогда мы можем найти среднее значение объемно-поверхностного диаметра, рассчитывая оптическую толщину по результатам измерения степени ослабления лазерного излучения в аэрозольном потоке.

В основе модифицированного метода спектральной прозрачности (ММСП) [5, 6] лежит решение обратной задачи для интегрального уравнения

$$\tau_\lambda = \frac{\pi C_n l}{4} \int_0^\infty \delta^2 Q(\delta, \lambda, m) f(\delta) d\delta, \quad (1)$$

где  $\tau_\lambda$  – спектральная оптическая толщина,  $C_n$  – счетная концентрация частиц,  $\lambda$  –

длина волны зондирующего излучения,  $Q$  – фактор эффективности ослабления для одиночных частиц,  $l$  – оптическая длина зондирования,  $\delta$  – диаметр частиц,  $m$  – комплексный показатель преломления материала частиц.

Усредненный фактор эффективности ослабления определяется выражением

$$\bar{Q}(\delta, \lambda, m) = \frac{\int_0^{\infty} Q(\delta, \lambda, m) \delta^2 f(\delta) d\delta}{\int_0^{\infty} \delta^2 f(\delta) d\delta}. \quad (2)$$

Заменив счетную концентрацию  $C_n$  на массовую  $C_m$ , которая следует выражению

$$C_m = C_n \frac{\pi \rho_p}{6} \int_0^{\infty} \delta^3 f(\delta) d\delta, \quad (3)$$

получим формулу для оптической толщины:

$$\tau_{\lambda} = \frac{1,5 C_m l \bar{Q}(\delta, \lambda, m)}{\rho_p \delta_{32}}, \quad (4)$$

где  $\rho_p$  – плотность материала частиц, а

$$\delta_{32} = \frac{\int_0^{\infty} \delta^3 f(\delta) d\delta}{\int_0^{\infty} \delta^2 f(\delta) d\delta}$$

– средний объемно-поверхностный диаметр частиц.

По экспериментально измеренным  $\tau_{\lambda_i}$  и рассчитанным значениям  $\delta_{32}$  массовая концентрация в измерительном объеме определяется по формуле

$$C_m = \frac{\tau_{\lambda_i} \rho_p \delta_{32}}{1,5 l \bar{Q}(\delta_{32}, \lambda, m)}. \quad (5)$$

Физическая модель метода основана на взаимодействии монохроматического излучения с полидисперсной средой, которая описывается теорией Ми, и на сохранении инвариантности усредненного фактора эффективности ослабления относительно вида функции распределения частиц по размерам [5].

Определение дисперсного состава аэрозоля методом спектральной прозрачно-

сти сводится к измерению спектральной оптической толщины дисперсной среды на нескольких длинах волн и к последующему расчету усредненных факторов эффективности ослабления для этих длин волн. Величина отношения экспериментально измеренных оптических толщин на двух длинах волн равна соответствующему отношению усредненных факторов эффективности ослабления, и представляет собой функцию среднего размера частиц [5]:

$$\frac{\tau_{\lambda_i}}{\tau_{\lambda_j}} = \frac{\bar{Q}(\delta_{32}, \lambda_i, m)}{\bar{Q}(\delta_{32}, \lambda_j, m)} = F_{ij}(\delta_{32}). \quad (6)$$

Диапазон значений средних размеров частиц, достигаемый такими измерениями, зависит от выбора длин волн зондирующего излучения.

Для данного метода характерна достаточно простая аппаратная реализация, и он позволяет диагностировать потоки большой оптической плотности. Для осуществления конкретной схемы модифицированного метода спектральной прозрачности была создана установка на базе специального пылевого стенда [7]. Она позволяет проводить измерения степени ослабления лазерного излучения на трех длинах волн и затем находить две функциональные зависимости: ослабления лазерного излучения от концентрации частиц, а также среднего объемно-поверхностного диаметра  $\delta_{32}$  от функции распределения частиц по размерам. Нахождение двух указанных зависимостей основано на моделировании концентрации частиц аэрозоля и функции распределения этих частиц по размерам.

#### Схема экспериментальной установки

Оптическая схема измерителя ММСП (рис. 1) состоит из источников лазерного излучения  $I$  на трех длинах волн: 405, 532, 650 нм; фотоприемников излучения  $II$ , установленных на противоположной от источников лазерного излучения стороне газохода  $7$ ; опорного фотоприемника  $5$ , в который через систему светоделительных стекол  $4$  и зеркал  $3$  попадает излучение, не прошедшее через измерительный объем; а также блока формирования, регистрации и обработки

сигнала. В этот блок входят измерительный и опорный синхронные детекторы, усилитель мощности и генератор импульсов. Синхронное детектирование измерительных сигналов позволяет существенно повысить чувствительность фотоприемного устройства [8]. Внутри газохода 7 установлен фотоприемник 9 на специальном поворотном механизме для регистрации рассеянного излучения методом интегрального светорас-

сеяния (МИСР) под заданным углом  $\theta$  [4]. В настоящей работе метод МИСР использовался для регистрации момента окончания проветривания пылевого стенда, так как имеет большую (по сравнению с ММСП) чувствительность в диапазоне малых концентраций. Сигнал фотоприемника МИСР становится равным нулю только тогда, когда концентрация аэрозольных частиц в стенде приближается к нулю.

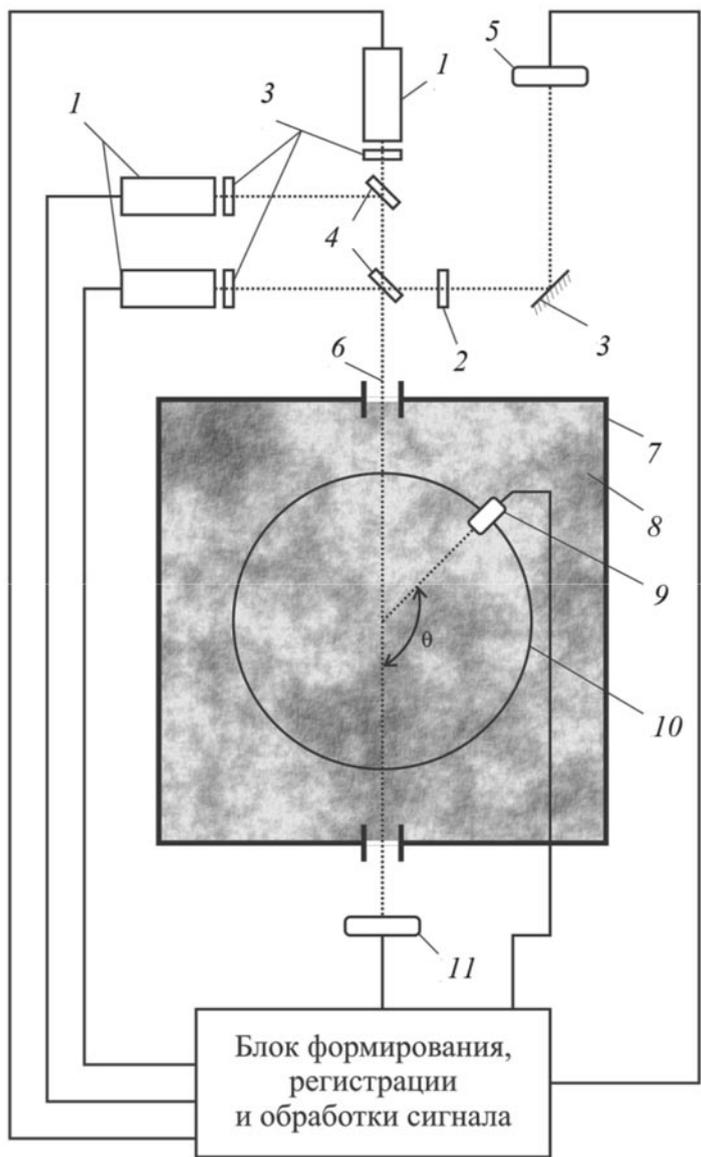


Рис. 1. Оптическая схема измерителя ММСП:  
 1 – источник лазерного излучения; 2 – светофильтры; 3 – зеркала; 4 – светоделительные стекла;  
 5 – опорный фотоприемник; 6 – лазерный пучок; 7 – газоход; 8 – аэродисперсный поток;  
 9 – фотоприемник МИСР; 10 – поворотный механизм МИСР; 11 – фотоприемник МСП

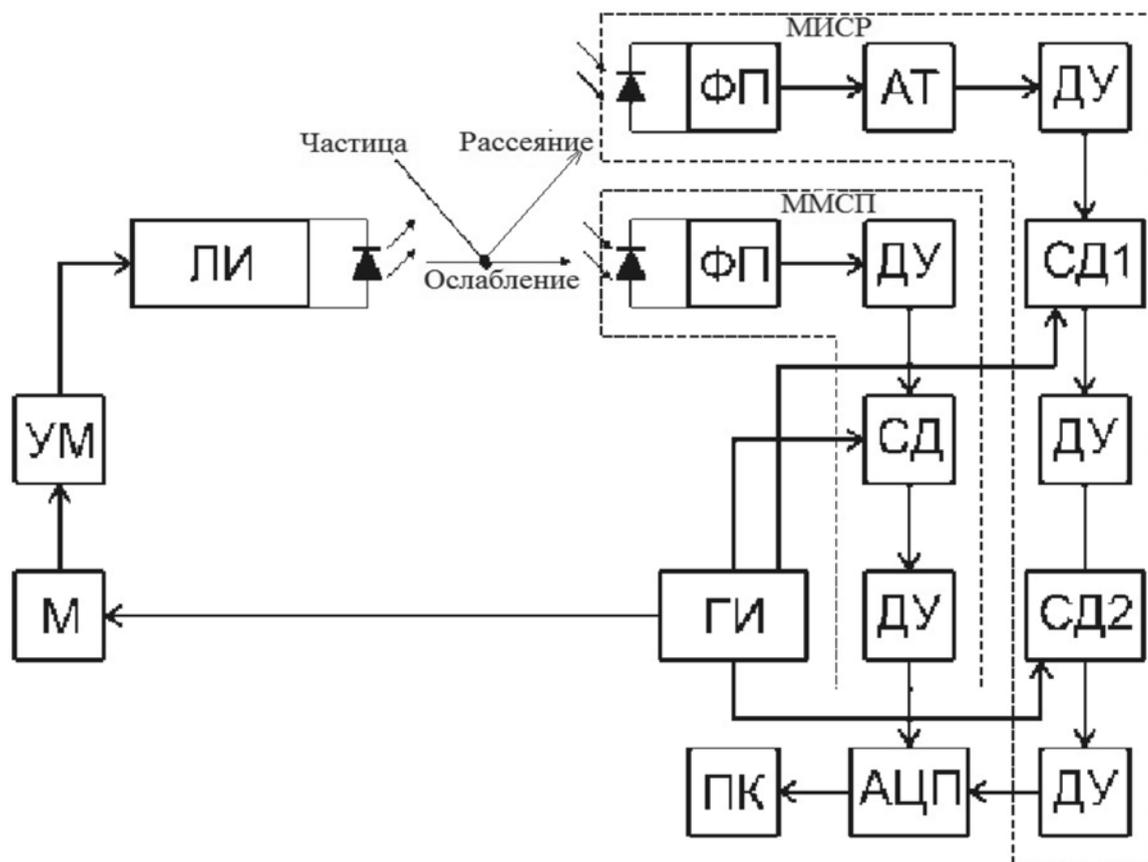


Рис. 2. Структурная схема блока генерации и обработки сигнала измерителя ММСП (лабораторной установки):

ЛИ – источник лазерного излучения; УМ – усилитель мощности; М – модулятор; ФП – фотоприемники; ДУ – дифференциальные усилители; СД – синхронные детекторы; АЦП – аналогово-цифровой преобразователь; ПК – персональный компьютер; АТ – аттенюатор; ГИ – генератор импульсов

Структурная схема блока генерации и обработки сигнала измерителя ММСП (лабораторной установки) представлена на рис. 2.

Измеритель ММСП работает следующим образом. Лазеры ЛИ генерируют излучение на трех длинах волн (405, 532, 650 нм) с частотой 5 кГц, заданной генератором импульсов (ГИ). Лазерные лучи проходят через светоделительные стекла; при этом часть излучения, отразившись от зеркала, попадает на опорный фотоприемник. Для выделения нужных длин волн на пути луча установлены держатели для светофильтров. Излучение, прошедшее через светоделительные пластины, попадает через металлическую трубку, установленную в

отверстии смотрового окна, и, пройдя через газоход, ослабляется аэрозольным потоком. Ослабленное излучение регистрируется фотоприемником (ФП). Сигналы с фотоприемника, пройдя через дифференциальный усилитель (ДУ) и синхронный детектор (СД), снова усиливаются дифференциальным усилителем (ДУ). Сигнал со второго дифференциального усилителя подается на АЦП, который подключен к персональному компьютеру (ПК). Фотоприемник МИСР путем вращения маховика изменяет угол, под которым принимает рассеянное излучение. При этом указатель перемещается, поднимая или опуская противовес, соединенный с указателем при помощи троса, перекинутого через поворотное колесо (оно



находится в газоходе).

Во всех экспериментах фотоприемник МИСР находился в области малых углов, и его сигнал являлся индикатором чистоты стенда во время проветривания.

В смотровых окнах с двух сторон газохода на пути луча проделаны отверстия, в которые вставлены металлические трубки с подсоединенными к ним резиновыми трубками; последние, в свою очередь, присоединены к воздушовке. Это сделано для того, чтобы не допустить выдувание аэрозоля за пределы стенда.

Сигналы измерителя ММСП поступают на блок обработки сигналов, подключенный к аналогово-цифровому преобразователю, который передает их далее на ПК. Блок обработки сигналов задействован на девять каналов АЦП.

#### Предварительные оценки для проведения экспериментов

При знании *a priori* диапазона возможных средних размеров частиц, длины волн зондирующего излучения должны находиться вблизи следующих значений:

$$\lambda^{\min} = \pi \delta_{32}^{\min} \left( \frac{|m|^2 - 1}{|m|^2 + 3} \right),$$
$$\lambda^{\max} = \pi \delta_{32}^{\max} \left( \frac{|m|^2 - 1}{|m|^2 + 3} \right),$$
(7)

где  $m$  – показатель преломления вещества аэрозольного материала.

Комплексный показатель преломления цемента был рассчитан по методике [9] на основании его химического состава и известных значений комплексных показателей преломления входящих в него компонентов [10].

Химические составы цемента достаточно сложны и могут очень сильно различаться в зависимости от применяемого сырья и способа производства клинкера. Основные составляющие цемента – это известь  $\text{CaO}$ , кремнезем  $\text{SiO}_2$ , оксид алюминия  $\text{Al}_2\text{O}_3$  и гематит  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  [11]. Величина комплексного показателя преломления цементного порошка рассчитывалась как ли-

нейная комбинация спектров комплексных показателей преломления компонентов с учетом их массовых составляющих. В результате получен средний показатель преломления

$$m = 1,690 - 0,013i.$$

В силу возможного варьирования процентного содержания составляющих цемента, комплексный показатель преломления цемента может несколько изменяться. Поскольку для аэрозоля с размерами менее 5 мкм этот фактор практически не влияет на значение коэффициента ослабления лазерного излучения, было ясно, что фиксированное значение комплексного показателя преломления в виде найденного среднего значения не должно приводить к увеличению погрешности измерений и расчетов.

Исследование трансформации 120 функций распределения частиц по размерам реального цементного потока показало, что после прохождения последней ступени очистки распределение частиц по размерам характеризуется средним объемно-поверхностным диаметром, лежащим в диапазоне от 0,37 до 0,51 мкм. Используя формулу (1), мы определили, что длины волн лазерного излучения должны находиться вблизи границ промежутка 0,375 – 0,513 мкм. Для исследования были выбраны три полупроводниковых лазера с длинами волн 405, 532 и 650 нм.

#### Регрессионные зависимости для восстановления функции распределения частиц по размерам

В результате численного моделирования трансформации функций распределения частиц по размерам в потоке были получены функции распределения частиц на выходе в атмосферу. Для каждой полученной функции распределения выполнены расчеты величин среднего арифметического, среднего квадратичного, среднего массового и среднего объемно-поверхностного диаметра. Между средним объемно-поверхностным диаметром, который измеряется лазерными методами, и остальными средними значениями диаметров установлены регрессион-

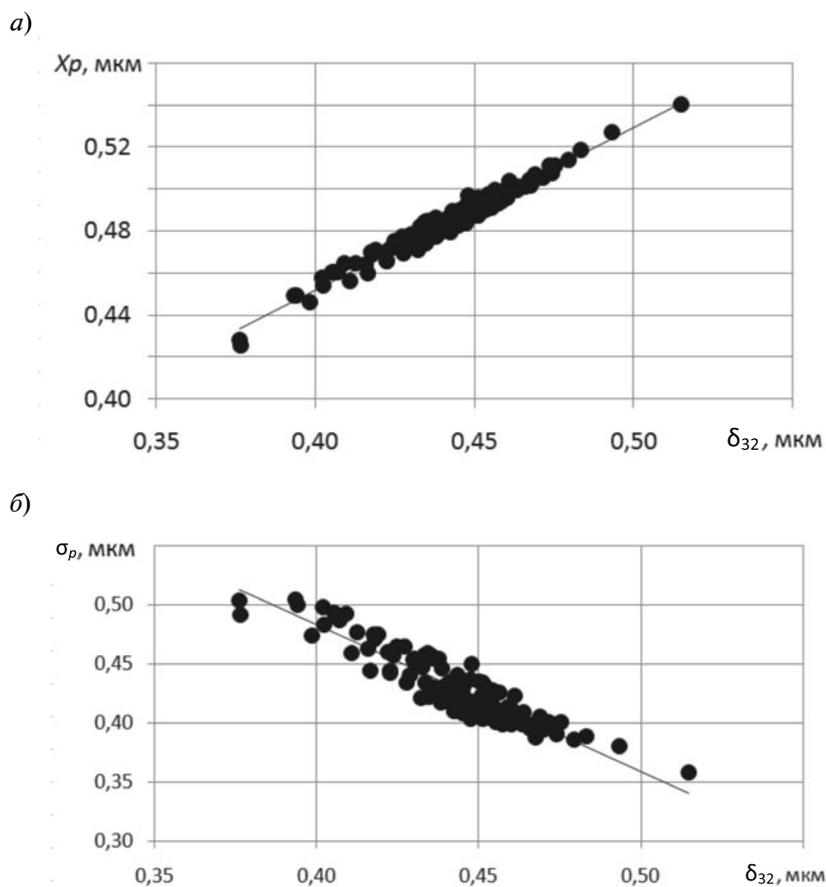


Рис. 3. Зависимости среднего геометрического диаметра  $x_p$  (a) и стандартного геометрического отклонения  $\sigma_p$  (б) от среднего объемно-поверхностного диаметра  $\delta_{32}$

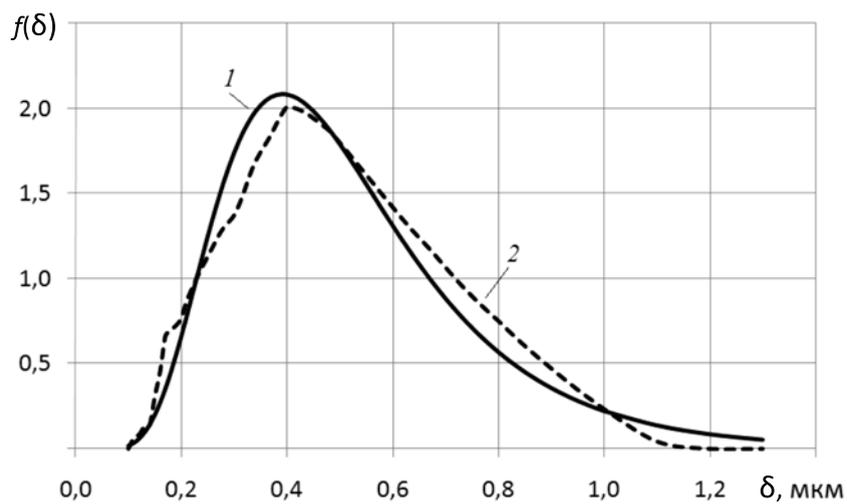


Рис. 4. Пример восстановленной функции распределения частиц по размерам (кривая 1); сравнение с исходными данными (кривая 2)



ные зависимости с коэффициентом детерминации не менее 0,85.

Аппроксимируя полученные функции распределения частиц логарифмически-нормальным законом, мы определили его параметры. Коэффициенты детерминации такой аппроксимации составили не менее 0,87. Между параметрами этих законов и средним объемно-поверхностным диаметром выявлена функциональная зависимость (рис. 3). Полученные линейные зависимости подчиняются уравнениям

$$x_p = 0,7723 \delta_{32} + 0,1430 \text{ (рис. 3, а);}$$

$$\sigma_p = -1,2409 \delta_{32} + 0,9793 \text{ (рис. 3, б);}$$

коэффициенты детерминации составили:

$$R_1^2 = 0,9678 \text{ (рис. 3, а);}$$

$$R_2^2 = 0,8566 \text{ (рис. 3, б).}$$

С помощью этих регрессионных зависимостей нами были восстановлены функции распределения для всех 120 образцов. Значение коэффициента детерминации между восстановленными и исходными данными

составило не менее 0,74. Пример одного из восстановлений приведен на рис. 4.

### Заключение

Таким образом, в результате создания экспериментальной установки, проведенных измерений рассеянного лазерного излучения методом интегрального светорассеяния, на примере анализа параметров аэрозоля аэродисперсного потока цементного производства, установлено следующее.

Измерение методами лазерного зондирования (основаны на теории рассеяния Ми) среднего объемно-поверхностного диаметра функции распределения частиц по размерам на выходе в атмосферу позволяет восстанавливать саму функцию распределения частиц по размерам.

Восстановление указанной функции распределения дает возможность адекватно оценивать распространение аэрозольных частиц в атмосферном воздухе и контролировать их предельно допустимые концентрации в режиме реального времени.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дополнения № 8 к ГН 2.1.6.1338-03 «Предельно допустимые концентрации (ПДК) загрязняющих веществ в атмосферном воздухе населенных мест». М.: Издание Роспотребнадзора РФ, 2010. 2 с.
2. Привалов В.Е., Чартий П.В., Шеманин В.Г. Анализ методов диагностики воздушных потоков полидисперсных аэрозольных частиц // Вестник СПб О РАИН. 2008. Вып. 5. С. 102–138.
3. Чартий П.В., Чартий Р.П., Шеманин В.Г. Контроль дисперсности минеральных веществ в реальном времени при их механической активации // Труды СПбГТУ. «Радиофизика, электроника, информационные технологии». 2008. № 507. С. 298–309.
4. Привалов В.Е., Рыбалко А.В., Чартий П.В., Шеманин В.Г. О влиянии шума и вибрации цементного оборудования на работу лазерного измерителя концентрации частиц // Журнал технической физики. 2007. Т. 77. Вып. 3. С. 62–65.
5. Архипов В.А., Ахмадеев И.Р., Бондарчук С.С., Ворожцов Б.И., Павленко А.А., Потапов М.Г. Модифицированный метод спектральной прозрачности измерения дисперсности аэрозолей // Оптика атмосферы и океана. 2007. Т. 20. № 1. С. 48–52.
6. Архипов В.А. Лазерные методы диагностики гетерогенных потоков: Учебное пособие. Томск: Изд-во Томского ун-та, 1987. 140 с.
7. Чукардин В.Е., Чартий П.В. Стенд для моделирования промышленного пылегазового потока // Безопасность жизнедеятельности. 2003. № 9. С. 50–52.
8. Privalov V.E., Charty P.V., Shemanin V.G. Optical properties of the polydisperse aerosols in air flows at their pulse generation studies // Proceedings of SPIE. 2004. Vol. 5447, pp. 251-259.
9. Ивлев Л.С., Андреев С.Д. Оптические свойства атмосферных аэрозолей. Л.: Изд-во Ленинградского ун-та, 1986. 360 с.
10. Золотарев В.М., Морозов В.Н., Смирнова Е.В. Оптические постоянные природных и технических сред. Справочник. Л.: Химия, 1984. 216 с.
11. Физико-химические и механические свойства аэрозолей и пыли, выделяемых основным оборудованием цементных заводов (справочные материалы). Под общ. ред. Г.И. Водлазского. Новороссийск: Издание НИПИ-ОТСТРОМ, 1976. 112 с.

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ПРИВАЛОВ Вадим Евгеньевич** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
vaevpriv@yandex.ru

**ПОЛОВЧЕНКО Светлана Васильевна** – аспирантка кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
Polosveta@mail.ru

**ЧАРТИЙ Павел Валикович** – докторант кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
pvc-60@yandex.ru

### *Privalov V.E., Polovchenko S.V., Chartiy P.V.* AN EXPERIMENTAL STUDY OF INDUSTRIAL AIR DISPERSE FLOWS.

This paper studies the dependence of optical parameters on the aerosol particle average diameter. The air disperse flows were generated using a special duster set-up. This set-up operates in a closed gas circuit with pulse aerosol material injection and makes it possible to sense the air disperse flows by simultaneous laser emission with different wavelengths through both the spectral transparency and integrated light scattering methods. The authors put forward a procedure of the inverse problem solution for the industrial aerosol flows dumped into the atmosphere obviating the application of integral equations by solving the direct problem system by jointly using the two laser sensing methods mentioned above. It was found that the aerosol particles size distribution function could be reconstructed according to the average volume surface diameter being measured in the aerosol flow at the output into the atmosphere. Those measurements could be taken by laser sensing methods based on the Mie scattering theory. The procedure described can serve as a basis for engineering instruments of industrial flows monitoring in real-time processing.

FLOW, AEROSOL, AIR DISPERSE FLOW, LASER, PARTICLES SIZE. AVERAGE VOLUME SURFACE DIAMETER, PARTICLES SIZE DISTRIBUTION FUNCTION, MIE SCATTERING THEORY.

### REFERENCES

1. *Dopolneniya №8 k GN 2.1.6.1338-03 «Predel'no dopustimye kontsentratsii (PDK) zagryaznyayushchikh veshchestv v atmosfernom vozdukh naseleennykh mest»*. Rospotrebnadzor RF. Moscow, 2010, 2 p. (rus)
2. **Privalov V.E., Chartiy P.V., Shemanin V.G.** Analiz metodov diagnostiki vozdushnykh potokov polidispersnykh aerazol'nykh chastits. *Vestnik SPbO RAIN*. 2008. Iss. 5, pp. 102-138. (rus)
3. **Chartiy P.V., Chartiy R.P., Shemanin V.G.** Kontrol' dispersnosti mineral'nykh veshchestv v real'nom vremeni pri ikh mekhanicheskoy aktivatsii. *Trudy SPbGTU «Radiofizika, elektronika, informatsionnye tekhnologii»*, 2008, № 507, pp. 298-309. (rus)
4. **Privalov V.E., Rybalko A.V., Chartiy P.V., Shemanin V.G.** O vliyanii shuma i vibratsii tsementnogo oborudovaniya na rabotu lazernogo izmeritelya kontsentratsii chastits. *Zhurnal tekhnicheskoy fiziki*, 2007, Vol. 77, Iss. 3, pp. 62-65. (rus)
5. **Arkhipov V.A., Akhmadeev I.R., Bondarchuk S.S., Vorozhtsov B.I., Pavlenko A.A., Potapov M.G.** Modifitsirovannyj metod spektral'noj prozrachnosti izmereniya dispersnosti aerazolej. *Optika atmosfery i okeana*, 2007, Vol. 20, No. 1, pp. 48-52. (rus)
6. **Arkhipov V.A.** *Lazernye metody diagnostiki geterogennykh potokov: Uchebnoe posobie*. Tomsk: Izd-vo Tomskogo Universiteta, 1987. 140 p. (rus)
7. **Chukardin V.E., Chartiy P.V.** Stend dlya modelirovaniya promyshlennogo pylegazovogo potoka. *Bezopasnost' zhiznedeyatel'nosti* 2003, No. 9, pp. 50-52. (rus)
8. **Privalov V.E., Chartiy P.V., Shemanin V.G.** Optical properties of the polydisperse aerosols in air flows at their pulse generation studies. *Proceedings of SPIE*, 2004. Vol. 5447, pp. 251-259.
9. **Ivlev L.S., Andreev S.D.** *Opticheskie svoystva atmosferynykh aerazolej*. Leningrad, Izd-vo Leningradskogo Universiteta, 1986. 360 p. (rus)
10. **Zolotarev V.M., Morozov V.N., Smirnova E.V.**



*Opticheskie postoyannye prirodnykh i tekhnicheskikh sred. Spravochnik.* Leningrad, Khimiya, 1984, 216 p. (rus)

11. *Fiziko-khimicheskie i mekhanicheskie svoystva*

*aerozolej i pyli vydelyaemykh osnovnym oborudovaniem tsementnykh zavodov (spravochnye materialy).*

Pod obshchej redaktsiej G.I. Vodolazskogo. NIPIOTSTROM. Novorossijsk, 1976, 112 p. (rus)

#### THE AUTHORS

**PRIVALOV Vadim E.**

*St. Petersburg Polytechnic University*

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

vaevpriv@yandex.ru

**POLOVCHENKO Svetlana V.**

*St. Petersburg Polytechnic University*

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

Polosveta@mail.ru

**CHARTIY Pavel V.**

*St. Petersburg Polytechnic University*

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

pvc-60@yandex.ru

УДК 544.77.022.823

*И.П. Добровольская<sup>1,2</sup>, Е.Н. Дресвянина<sup>1,2</sup>, А.Н. Юденко<sup>1,2</sup>,  
П.В. Попрядухин<sup>1,2</sup>, Е.М. Иванькова<sup>1,2</sup>, В.Е. Юдин<sup>1,2</sup>*<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный политехнический университет<sup>2</sup> Институт высокомолекулярных соединений РАН

## **СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ОДНОМЕРНЫХ МАТРИЦ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА И НАНОФИБРИЛЛ ХИТИНА ДЛЯ КЛЕТОЧНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

Волокна из хитозана и композиционные волокна на его основе, полученные коагуляционным методом, характеризуются ориентированной структурой как частиц наполнителя, так и макромолекул полимера. Методами электронной сканирующей микроскопии и рентгеноструктурного анализа показано, что нанофибриллы хитина имеют поперечный размер 20 нм и продольный 600 – 800 нм, в поперечном направлении нанофибрилла хитина состоит из двух кристаллитов размерами 11 – 12 нм. Введение нанофибрилл хитина в количестве 0,1 – 0,3 мас. % приводит к повышению прочности и модуля упругости композиционных волокон. Мезенхимные стволовые клетки хорошо закрепляются и распластаются на поверхности хитозановых волокон. Поверхностная фибриллизация волокон способствует изменению формы стволовых клеток. Полученные композиционные волокна из хитозана могут быть использованы в качестве одномерных матриц для клеточных технологий и тканевой инженерии.

ХИТОЗАН, НАНОФИБРИЛЛЫ ХИТИНА, КЛЕТОЧНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ, КОМПОЗИЦИОННОЕ ВОЛОКНО, ОРИЕНТИРОВАННАЯ СТРУКТУРА, МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА, АДГЕЗИЯ МЕЗЕНХИМНЫХ СТВОЛОВЫХ КЛЕТОК.

### **Введение**

Одной из актуальных задач современного материаловедения является разработка материалов для медицины и биологии, в частности биорезорбируемых полимерных матриц для клеточных технологий и трансплантологии. Такие материалы должны обладать биосовместимостью, биорезорбцией, отсутствием цитотоксичности как самих полимеров, так и продуктов их разложения. Для резорбируемых матриц используют полигликолиды, полилактиды, полилактоны, полисахариды и другие природные и синтетические полимеры. Каждый из них обладает как преимуществами, так и недостатками. В частности, при синтезе и переработке полигидроксиалканоатов использу-

ются дихлорметан и гексан, следы которых в готовых матрицах могут препятствовать культивации клеток [1, 2].

В последнее время в качестве матриц используют пленки, волокна и пористые блочные материалы на основе природного биорезорбируемого полисахарида – хитина [3 – 8]. При переработке этого полимера используется органический растворитель – ДМАА, содержащий хлорид лития, ионы которого трудно выводятся из полимера, что снижает биосовместимость материала и повышает его цитотоксичность.

К наиболее перспективным полимерам, которые обладают комплексом необходимых свойств, а именно отсутствием цитотоксичности, биodeградируемостью,



экологичностью переработки, удовлетворительными прочностными и деформационными характеристиками, относится хитозан [3, 4, 7, 9, 10]. Однако ввиду высокой гидрофильности, свойства материалов из этого полимера нестабильны: во влажном состоянии происходит снижение их прочностных и упругих характеристик. Для повышения прочности волокон в хитозановую матрицу вводили гидросиликатные нанотрубки [12]. Исследование структуры и свойств композиционных волокон показало, что введение нанотрубок хризотила в количестве 1 – 3 масс. % повышает прочность и модуль упругости волокон, способствует формированию ориентированной структуры. Однако наночастицы хризотила не подвержены разложению под действием активных биологических сред, они могут сохраняться в живом организме в течение длительного времени.

Поэтому актуальной задачей разработки резорбируемых одномерных матриц для клеточных технологий является получение композиционных волокон, характеризующихся биорезорбцией как матрицы, так и наполнителя. Введение в хитозановую матрицу наночастиц хитина позволит получить резорбируемые композиционные волокна с повышенными прочностными и упругими характеристиками.

### Материалы и оборудование

Для получения композиционных волокон использовали хитозан (Fluka Chemie, BioChemika line) с  $MW = 255$  кДа, степенью деацетилирования 80 %, зольностью 0,5%, а также наночастицы хитина (Mavi Sud s.r.l, Италия).

Диспергирование наночастиц хитина в воде проводили ультразвуковой обработкой в течение 30 мин. Для получения смеси раствора хитозана с наночастицами хитина, в водную дисперсию, содержащую наночастицы хитина, добавляли хитозан в количестве, необходимом для получения 4 масс. % раствора, а хитина – 0,05 – 20 масс. %, по отношению к хитозану. Подготовленную дисперсию с  $pH = 4 - 5$  перемешивали в течение 30 мин до набухания и частичного растворения хитозана. После этого в смесь

вводили раствор уксусной кислоты (при постоянном перемешивании), доводя концентрацию кислоты в растворителе до 2 %. Смесь раствора хитозана с наночастицами хитина перемешивали 90 мин, после чего фильтровали, а затем обезвоздушивали в течение 24 ч при давлении 0,1 атм.

Волокна формировали коагуляционным методом на лабораторной установке ИВС РАН. Осадителем являлась смесь 10%-го раствора NaOH и  $C_2H_5OH$  в соотношении 1 : 1. Формование моноволокон проводили через фильеру диаметром 0,6 мм; при этом скорость течения раствора из фильеры составляла 0,1 мм/с, время осаждения – 150 с; степень фильерной вытяжки  $\lambda$  варьировалась от –40 до 100 %. Волокно промывали в дистиллированной воде, затем сушили при температуре 50 °С.

Реологические исследования проводились на реометре Physica MCR 301 (Anton Paar) при 20 °С по методу «цилиндр в цилиндре», в режиме сдвигового течения при скоростях сдвига 1 – 4000  $s^{-1}$ . Для измерений в кювету помещали 5 мл раствора; зависимости вязкости от скорости сдвига измеряли в режиме увеличения частоты вращения цилиндров.

Для исследования надмолекулярной структуры композиционных волокон использовали методы сканирующей электронной микроскопии и рентгеновской дифракции. Измерения проводили на микроскопе Supra-55 VP (Carl Zeiss) и на рентгеновском дифрактометре Bruker D2 Phaser. Диспергирование частиц хитина выполняли на ультразвуковом диспергаторе УЗВ-1.3 (Россия) при частоте 40 кГц. Измерения механических свойств проводили на установке УМИВ (Россия); база испытания составляла 15 мм, скорость нагружения – 1 мм/мин. Перед испытаниями волокна выдерживались при относительной влажности 66 % не менее 24 ч.

### Результаты и их обсуждение

Важная задача при получении композиционных материалов на основе полимерной матрицы и наполнителей из наночастиц различной формы состоит в равномерном распределении частиц по объему компози-

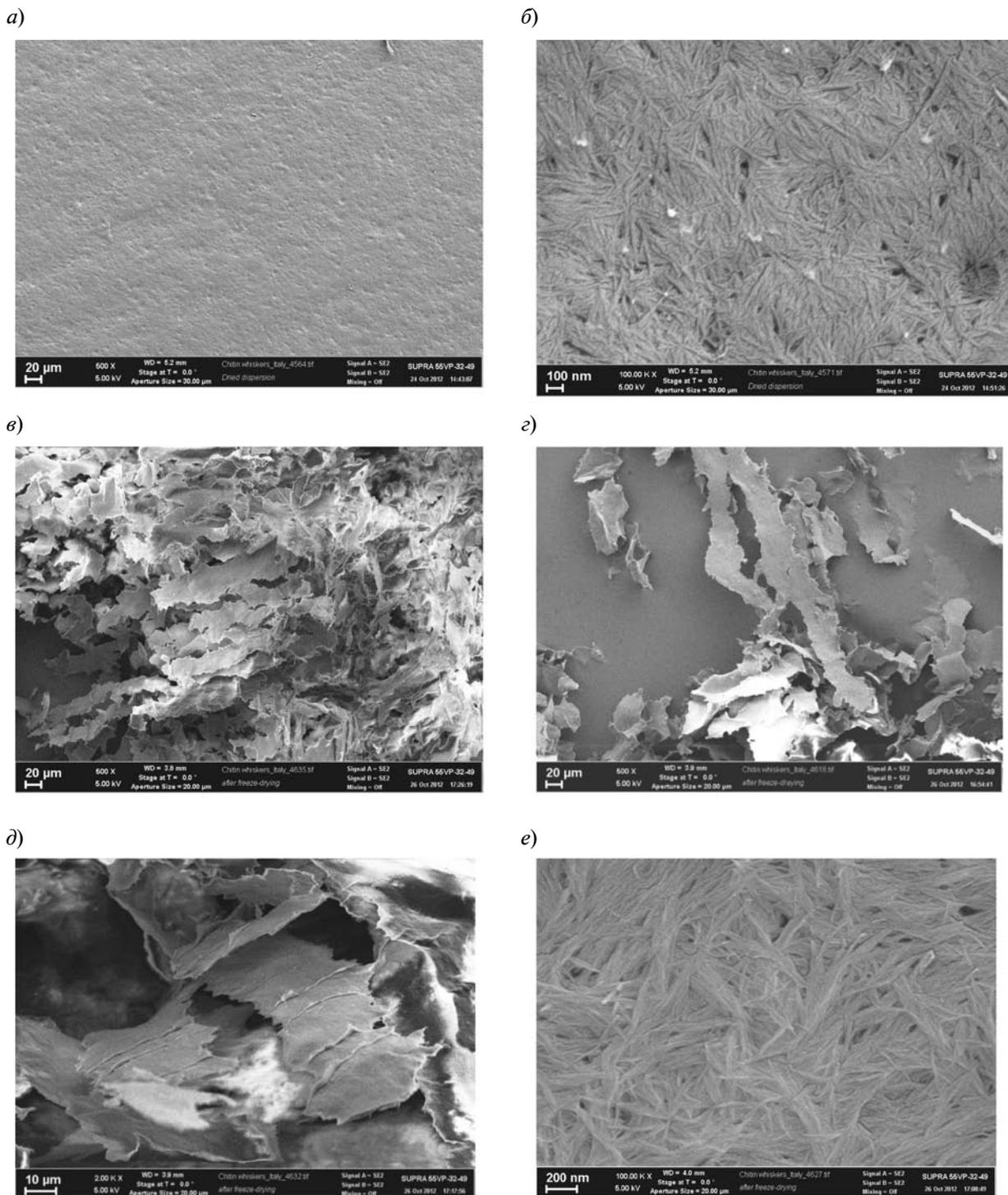


Рис. 1. Электронные микрофотографии пленки из нановолокон хитина (а, б) и порошка, полученного лиофилизацией водной дисперсии (в – е). Изображения имеют разный масштаб; для наглядности представлены в одинаковом масштабе микрофотографии изолированной микрочастицы (е) и множества микрочастиц (в)

та. Степень диспергирования наночастиц зависит от характера взаимодействия полимера и наполнителя, что в свою очередь определяется особенностями их химического строения, а также надмолекулярной структурой. Поэтому особое внимание в работе уделено исследованию структуры наночастиц хитина.

**Структура наночастиц хитина.** Хитин – азотсодержащий полисахарид, содержит боковую группу –NH–CO–CH<sub>3</sub> [14]. Для его кристаллической структуры характерен полиморфизм – существование двух кристаллических модификаций, в которых макромолекулы расположены антипараллельно ( $\alpha$ -хитин) или параллельно ( $\beta$ -хитин). В одном живом организме могут существовать обе модификации, выполняющие различные функции.

Исследование структуры наночастиц хитина проводили на двух видах образцов: пленках и порошках. Пленки получали сушкой при 20 °С водной дисперсии, содержащей 31,9 мг/мл наночастиц хитина. Микрофотографии поверхности пленки из хитина, толщиной 100 мкм приведены на рис. 1, а, б. Для этой пленки характерно наличие гладкой ровной поверхности; при

большем увеличении отчетливо видны протяженные частицы – наночастицы, имеющие поперечный размер 15 – 20 нм.

Второй способ получения частиц хитина заключался в лиофилизации исходной суспензии хитина; в результате получали порошок из микрочастиц (рис. 1, в – е), состоящих из наночастиц хитина. Видно, что микрочастицы имеют ленточное строение с поперечным размером около 30 мкм и толщиной 0,1 мкм (рис. 1, д). Они состоят из наночастиц шириной 20 нм и длиной 600 – 800 нм, что совпадает с данными, полученными для пленочных образцов (рис. 1, е). Отметим, что частицы хитина имеют склонность к образованию плоских слоев элементов структуры как на микро-, так и нано- уровнях.

Строение наночастиц хитина исследовалось с помощью метода рентгеновской дифракции. Рентгенограмма порошка хитина приведена на рис. 2. Интенсивные дифракционные максимумы свидетельствуют о наличии кристаллической структуры  $\alpha$ -хитина. Параметры кристаллической ячейки:  $a = 0,473$  нм,  $b = 1,899$  нм,  $c = 1,025$  нм; они совпадают с данными работы [13]. Отметим, что поперечный раз-

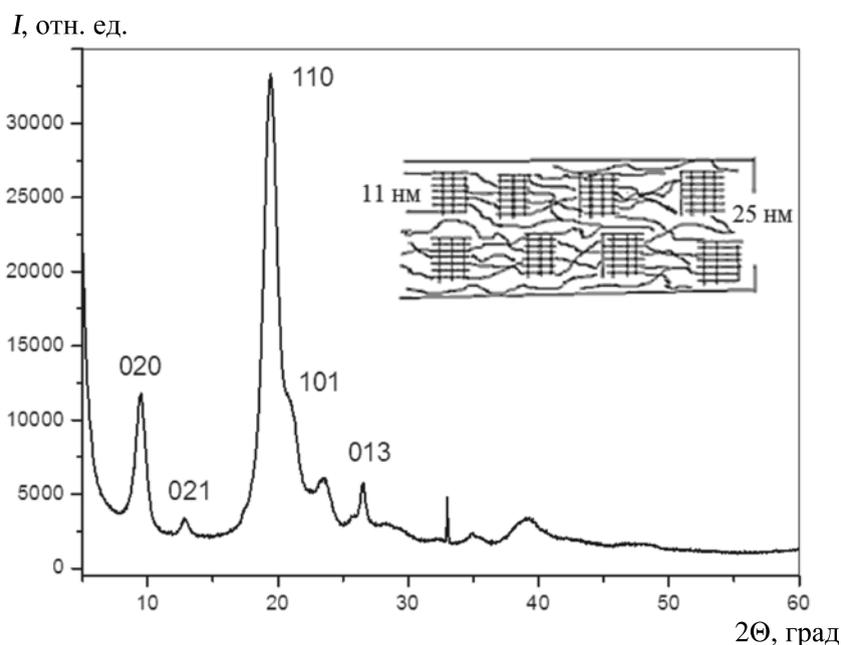


Рис. 2. Рентгенодифрактограмма порошка из наночастиц хитина. На вставке показана схема строения наночастицы хитина

мер кристаллической ячейки  $b$  существенно больше размера  $a$ , что, видимо, обусловлено наличием в макромолекуле боковой группы  $-NH-CO-CH_3$ . Макромолекулы в ячейке этой кристаллической модификации хитина располагаются антипараллельно друг другу. Средний размер  $L$  кристаллической области, определенный по величине интегральной интенсивности дифракционных максимумов, составляет 12,5 нм. Оценка размера кристаллита в направлении  $b$ -оси по методу Шеррера для рефлекса (020) дала значение  $L = 11,1$  нм. Оценить размер кристаллитов в направлении оси  $c$ , т. е. в направлении осей макромолекул, не представилось возможным, ввиду отсутствия четкого рефлекса (002) или его более высоких порядков; такое отсутствие свидетельствует о существенно меньшем размере кристаллитов в направлении осей макромолекул, об их большей дефектности. На основе полученных данных можно сделать вывод о большей упорядоченности наночастиц хитина в поперечном направлении, чем в продольном.

Сопоставление данных рентгеноструктурного анализа с результатами электронно-микроскопических исследований позволяет заключить, что в поперечном направлении

наночастица состоит из двух кристаллитов с поперечными размерами 11 – 12 нм,  $b$ -оси которых расположены перпендикулярно оси наночастицы.

Особенностью кристаллической структуры наночастиц хитина является существенно больший размер кристаллитов в поперечном направлении, чем в продольном. Для целлюлозы и ее производных в ориентированном состоянии, а также для ряда других полисахаридов продольный размер кристаллитов обычно больше поперечного и составляет около 7 нм [14].

**Реологические свойства растворов хитозана и их смесей с наночастицами хитина.** Наночастицы хитина были использованы в качестве наполнителя для получения резорбируемых композиционных волокон. Для оптимизации режима формирования волокон необходимы сведения о реологических свойствах раствора хитозана и его смесей с наполнителем. На рис. 3 приведены зависимости вязкости от скорости сдвига для раствора хитозана и его смесей с наночастицами хитина.

Данные реологических измерений позволяют заключить, что зависимость вязкости от скорости сдвига для всех исследуемых растворов носит нелинейный характер.

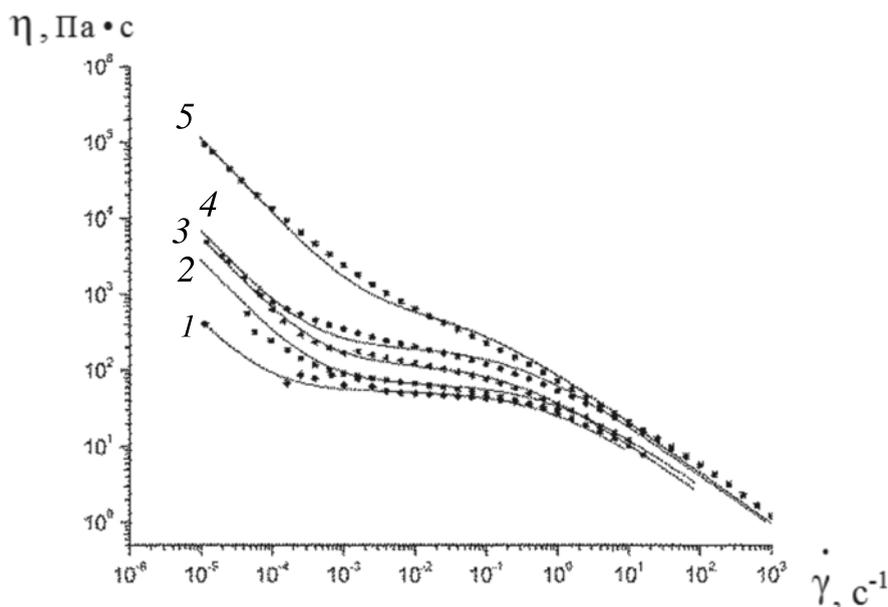


Рис. 3. Зависимости вязкости от скорости сдвига для раствора хитозана (1) и смесей с различным содержанием наночастиц хитина, мас. % : 1,0 (2), 7 (3), 10 (4), 20 (5)

Для раствора, не содержащего наполнителя (кривая 1 на рис. 3), значимое уменьшение вязкости наблюдалось при скорости сдвига более  $10 \text{ с}^{-1}$ . Вязкость раствора хитозана увеличивалась с ростом содержания наночастиц хитина; особенно это заметно при содержании наполнителя более 1 мас. % (кривые 3–5 на рис. 3). С увеличением содержания наночастиц хитина пороговое значение скорости деформации смещается в сторону меньших значений  $\dot{\gamma}$ . Для смеси, содержащей 20 мас.% наполнителя, зависимость  $\eta(\dot{\gamma})$  приближается к линейной в широком диапазоне скоростей сдвига. Снижение вязкости при увеличении сдвиговых напряжений связано с разрушением исходной структуры раствора и созданием новой, переходом из изотропного состояния в анизотропное. Формирование анизотропной структуры раствора под действием сдвигового поля характерно для большинства жесткоцепных полимеров [15].

Повышение содержания наполнителя в растворе хитозана сопровождается ростом вязкости и напряжения сдвига, что особенно заметно при низких скоростях сдвига. Это свидетельствует о хорошем взаимодействии частиц хитина с макромолекулами хитозана, высокой адгезии наполнителя и матрицы, а также об образовании кластерной структуры наполнителя.

Низкое содержание наполнителя в растворе (менее 1 мас.%) мало влияет на реологические свойства раствора хитозана.

**Структура и свойства композиционных волокон.** В работах [11, 12] показано, что ориентированная структура волокон из хитозана формируется на стадии прохождения раствора или его смеси с наночастицами через фильеру; ориентация частиц наполнителя и макромолекул полимера зависят от скорости сдвига, возникающей в фильере.

Режим формования волокна подбирался в соответствии с уравнением [11]:

$$\dot{\gamma} = \frac{2Q}{\pi R^3},$$

где  $Q$  – скорость подачи полимера,  $R$  – радиус фильеры.

Значения величин  $Q$  и  $R$  позволяют по-

лучать скорости сдвига, которые обеспечивают структурирование раствора при прохождении его через фильеру.

Как показали эксперименты, растворы хитозана, содержащие наночастицы хитина, обладают необходимыми динамическими свойствами, которые позволяют сохранять ламинарность струи в осадителе после прохождения раствора через фильеру. Формование волокон из хитозана и композиционных волокон, содержащих наночастицы хитина, проводили коагуляционным методом.

Из результатов электронно-микроскопических исследований (рис. 4) следует, что волокна на основе хитозана обладают гладкой поверхностью и гомогенной внутренней структурой. Особенностью фибриллярного строения волокна, содержащего наночастицы хитина, является наличие плоских микрофибрилл – слоистых структур, которые отчетливо видны на сколе композиционного волокна в жидком азоте (см. рис. 4, з). Плоские микрофибриллы включают наночастицы хитина, которые ориентированы вдоль оси волокна и имеют поперечные размеры 25 – 30 нм. Эта величина немного больше размера, определенного для лиофилизата суспензии наночастиц хитина (20 нм), что свидетельствует о хорошей адгезии частиц хитина к хитозановой матрице. Хорошая адгезия обусловлена тем, что макромолекула хитозана содержит боковые группы как  $-\text{NH}_2$ , так и  $-\text{NH}-\text{CO}-\text{CH}_3$ ; последние характерны для макромолекулы хитина.

На рис. 5 приведена фоторентгенограмма волокна из хитозана, полученного в равновесных условиях, когда в процессе формования на него не действовали растягивающие напряжения; волокно имело усадку (отрицательная вытяжка  $\lambda = -40 \%$ ). Распределение интенсивности дифракционного максимума, соответствующего рефлексам [200] и [220] хитозана, имеющее вид кольца, свидетельствует о слабо ориентированной, практически изотропной, структуре волокна. Вытяжка волокна на 60 % при его формировании приводит к ориентации кристаллитов. На рентгенограмме это проявляется в стягивании дифракционного мак-

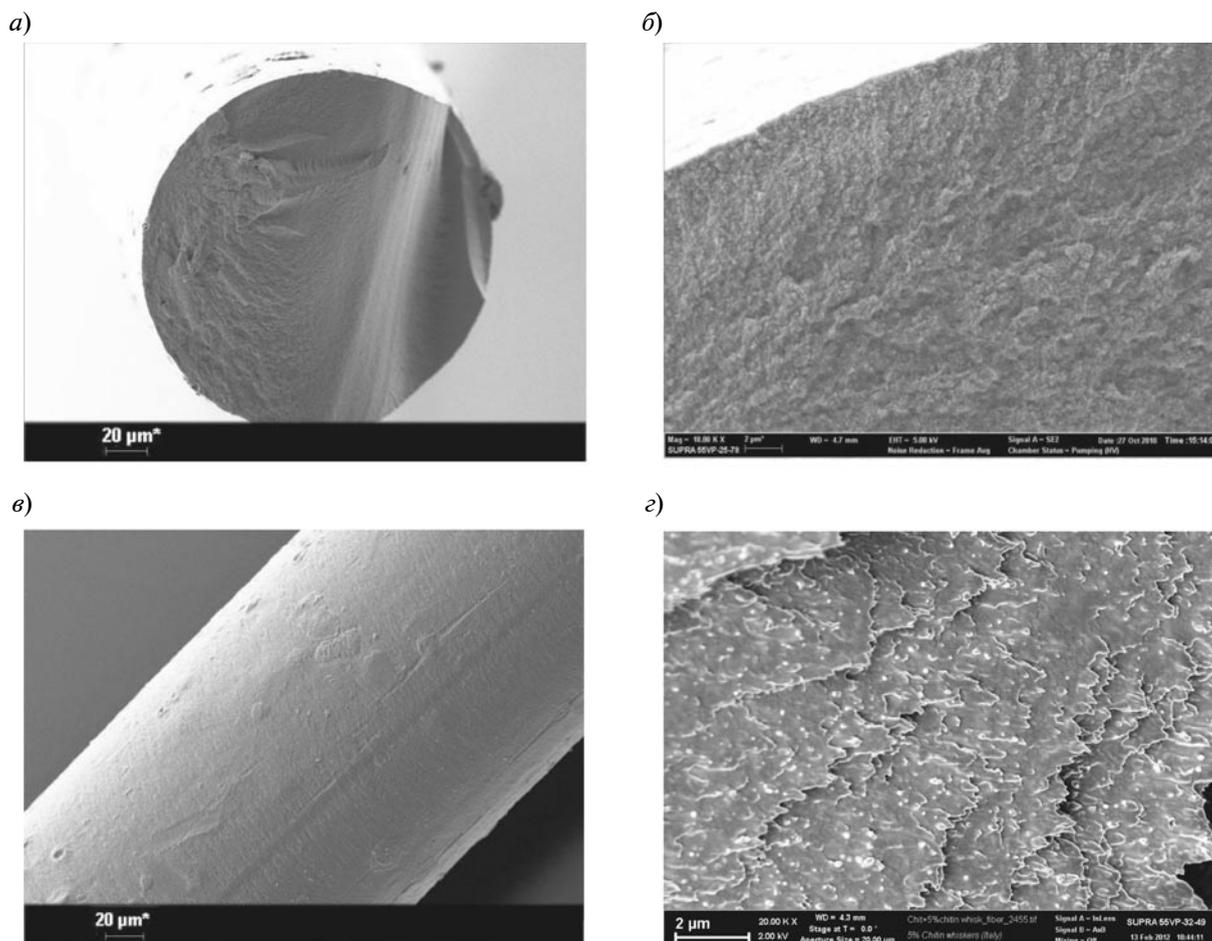


Рис. 4. Микрофотографии волокна из хитозана (*а*, *б*) и композиционного волокна (*в*, *г*), содержащего 1 мас. % наночитина

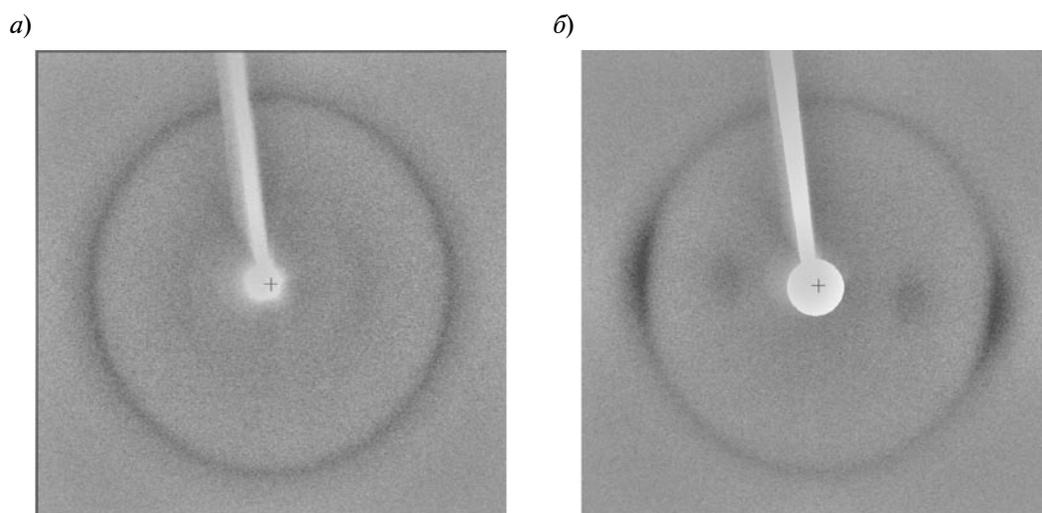


Рис. 5. Фоторентгенограммы волокон из хитозана для различных значений  $\lambda$ , %: -40 (*а*) и 60 (*б*)

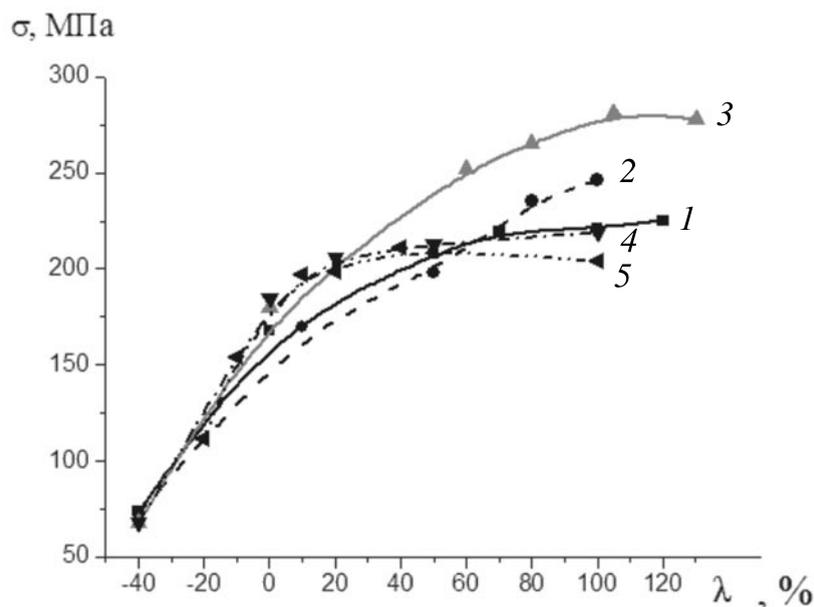


Рис. 6. Зависимости прочности хитозановых (1) и композиционных (2 – 5) волокон с различным содержанием наночастиц хитина, % : 0 (1), 0,05 (2), 0,10 (3), 1,0 (4) и 20 (5), от величины ориентационной вытяжки

симума к экватору. Следует отметить, что распределение интенсивности в виде дуги наблюдается для большинства исследованных волокон из хитозана и композиционных волокон, содержащих наночастицы хитина. Даже небольшая вытяжка приводит к ориентации кристаллитов хитозана.

На рис. 6 приведены зависимости прочности хитозановых и композиционных волокон от степени вытяжки. Видно, что прочность хитозановых волокон, не содержащих наполнителя, возрастает с увеличением вытяжки до  $\lambda \approx 20$  %. Дальнейшая вытяжка при формировании мало влияет на упрочнение волокон.

Прочность композиционных волокон, содержащих малое количество наполнителя (0,05 – 0,30 масс.%), монотонно увеличивается при вытяжке вплоть до  $\lambda = 100 - 120$  %. Увеличение содержания наночастиц хитина в волокне до значений более 1 мас.% существенно изменяет характер зависимости  $\sigma(\lambda)$ ; рост прочности прекращается при  $\lambda \approx 20$  %.

Увеличение прочности волокон обусловлено изменением их надмолекулярной структуры, ориентацией макромолекул.

Ориентацию кристаллитов хитозана в процессе формирования волокон оценивали по полуширине  $\alpha$  азимутального распределения интенсивности дифракционного максимума [200]. Из данных, приведенных в таблице, следует, что даже небольшая вытяжка приводит к ориентации кристаллитов.

Величина  $\alpha$  зависит от содержания наночастиц хитина в композиционном волокне. Малое количество наполнителя способствует ориентационной вытяжке волокон, предельная ориентация кристаллитов наблюдается уже при значении  $\lambda \approx 60$  %. Дальнейшее увеличение степени вытяжки не способствует ориентации кристаллитов. Вместе с тем, увеличивается прочность и модуль упругости волокон. Это можно объяснить ориентацией макромолекул в межкристаллитных областях фибрилл хитозана.

Композиционные волокна, полученные в равновесных условиях, обладают большей ориентацией кристаллитов, чем аналогичные волокна, не содержащие наполнителя. Введение наночастиц в количестве 1 мас.% позволяет получить ориентирован-

Таблица

**Величина азимутального распределения интенсивности  
рефлексов [200] хитозана для волокон,  
полученных с различной ориентационной вытяжкой**

Содержание хитина, мас. %	$\lambda$ , %	$\alpha$ , град
0	-40	90,6
	0	29,5
	30	31,2
	60	29,4
0,1	-40	57,3
	0	29,1
	23	27,6
	90	29,5
1,0	-40	62,4
	0	28,8
	66	30,0
	90	30,6
	180	28,3
20	20	32,7

Обозначения:  $\lambda$  – степень ориентационной вытяжки,  $\alpha$  – полуширина азимутального распределения интенсивности дифракционного максимума [200]

ную структуру без вытяжки волокна при его формировании. Это позволяет предположить, что наличие анизодиаметричных наночастиц (нанофибрилл хитина) способствует ориентации макромолекул хитозана. Как видно из электронной микрофотографии скола в жидком азоте композиционного волокна (см. рис. 4, з), частицы наполнителя хорошо ориентированы вдоль оси волокна. Этому способствуют сдвиговые напряжения, возникающие при прохождении через фильеру раствора хитозана, содержащего наофибриллы хитина.

Ориентация частиц наполнителя, их хорошее взаимодействие с хитозановой матрицей повышает прочностные и упругие характеристики композиционных волокон, содержащих наофибриллы хитина. На рис. 7 приведены зависимости прочности и модуля упругости волокон от содержания наофибрилл хитина.

Расчет величины перкаляционного барьера по методу, приведенному в рабо-

те [16], для частиц с осевым отношением  $l = 25$ , соответствующим геометрическим размерам наофибрилл хитина, дал значение 1 мас. %; при содержании частиц наполнителя менее 1,0 мас.% образование кластерной структуры невозможно.

Процесс ориентационной вытяжки композиционных волокон с малым (до 1 мас.%) содержанием наполнителя можно описать следующей схемой. При взаимодействии молекулы хитозана с уксусной кислотой (растворителем) происходит протонирование группы  $-NH_2$  с образованием соли – ацетата хитозана. В растворе частицы наполнителя располагаются хаотично, преимущественная ориентация отсутствует. Между наночастицами хитина существует достаточно большой объем, в котором находятся макромолекулы ацетата хитозана и уксусной кислоты. Попадая в поле сдвиговых напряжений при прохождении через фильеру, как частицы наполнителя, так и макромолекулы ацетата хитозана ориентируются.

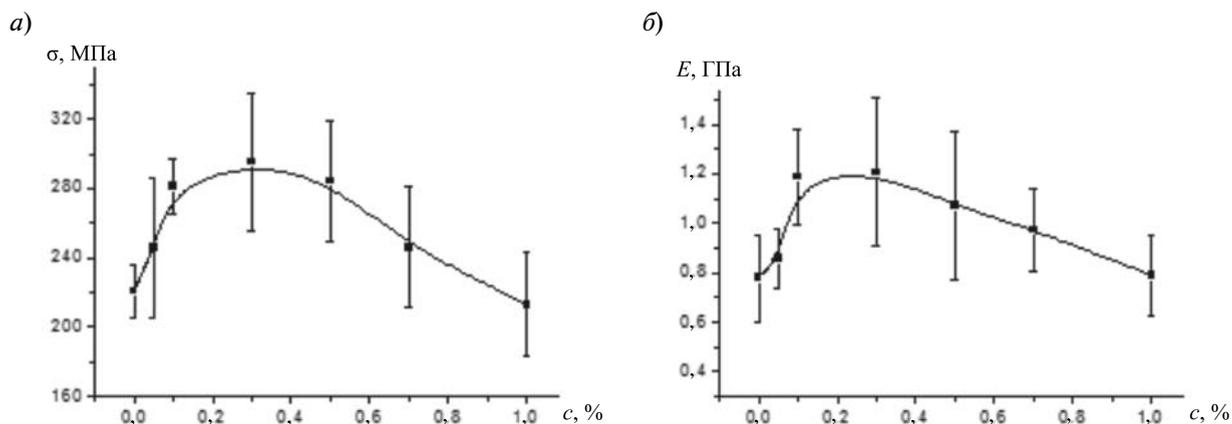


Рис. 7. Зависимости прочности (а) и модуля упругости (б) композиционных волокон на основе хитозана от содержания наночастиц хитина

Ввиду хорошей адгезии, макромолекулы ацетата хитозана, находящиеся в приповерхностном слое хитина, приобретают дополнительную ориентацию. В процессе вытяжки в осадительной ванне происходит ориентация макромолекул ацетата хитозана, что приводит к образованию ориентированной кристаллической структуры. Дальнейшее увеличение вытяжки при формировании композиционных волокон способствует ориентации макромолекул в межкристаллитных аморфных областях внутри фибрилл хитозана. После прохождения раствора через фильеру, контакта струи с осадителем (спирто-щелочной смесью) происходит переход полимера из солевой

формы в основную. Наличие сдвиговых напряжений в фильере и вытяжка волокна после его осаждения способствуют формированию ориентированной структуры как макромолекул полимера, так и наночастиц наполнителя. Схема формирования ориентированной структуры композиционных волокон на основе хитозана и наночастиц хитина представлена на рис. 8.

Предлагаемая схема позволяет объяснить немонотонный характер зависимости прочности и модуля упругости от содержания наночастиц. Оптимальное содержание наполнителя 0,1 – 0,3 мас. % обеспечивает, с одной стороны, дополнительную ориентацию молекул хитозана на поверхности

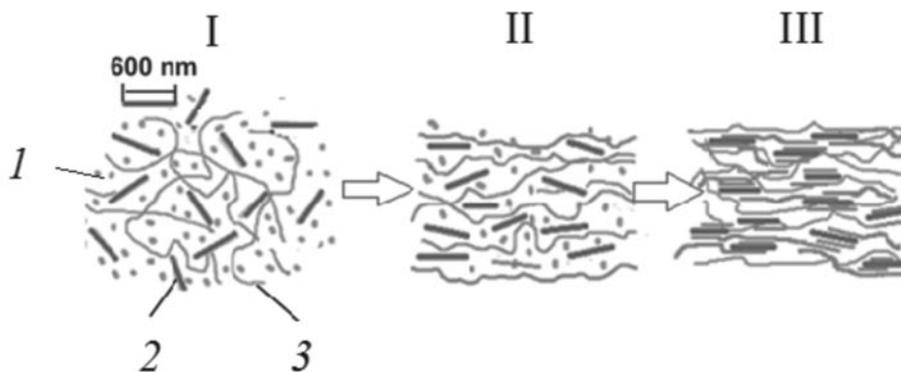


Рис. 8. Схема формирования ориентированной структуры композиционных волокон на основе хитозана и наночастиц хитина: I – раствор хитозана, II – смесь после ее прохождения через фильеру, III – композиционное волокно; 1 – растворитель, 2 – наночастицы хитина, 3 – ацетат хитозана

нанофибрилл хитина, с другой, — достаточную подвижность макромолекул полимера, необходимую для их ориентации в процессе вытяжки. При содержании нанофибрилл хитина свыше 1 мас. % происходит образование жесткой сетки из частиц наполнителя (кластерной структуры), которая препятствует ориентации макромолекул хитозана. Этим можно объяснить снижение прочности и модуля упругости волокон, содержащих более 1 мас. % наночастиц хитина.

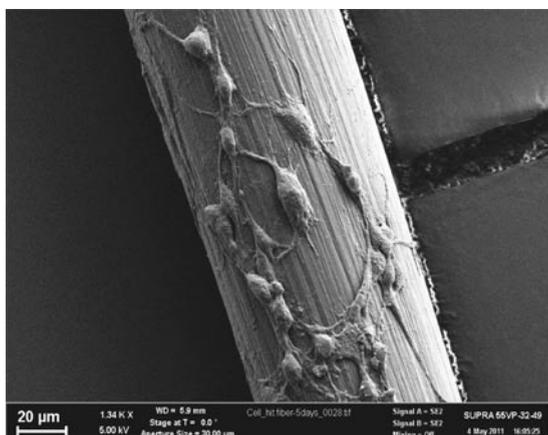
**Адгезия мезенхимных стволовых клеток.** Одним из основных критериев использования материала в качестве матриц для клеточных технологий является адгезия стволовых или соматических клеток на его поверхности. Адгезия зависит от химического строения матрицы, структуры ее поверхности, в частности от наличия неоднородностей, соизмеримых с размерами клеток, пористости, наличия следов растворителя и других примесей, повышающих цитотоксичность.

Для исследования совместимости клеток с волокнами из хитозана были использованы культуры мезенхимных стволовых клеток жировой ткани (ASCs). Белая жировая ткань крысы, полученная методом липэктомии, была подвергнута гомогенизации, ферментативной обработке 0,2 %-м раствором коллагеназы (Sigma, США) и центрифугированию. Клетки культивировали в питательной среде MEM Alpha Modification (Gibco, США) с добавлением 15 %-й фе-

тальной сыворотки телят (Gibco, США) и антибиотиков (100 ед./мл пенициллина, 100 мкг/мл стрептомицина (Gibco, США)). Культивирование стволовых клеток проводили в CO<sub>2</sub>-инкубаторе в атмосфере повышенной влажности (70 %), при температуре 37 °С, содержание углекислого газа составляло 5 – 7 %; при достижении 80 %-го монослоя производили пересев клеток в свободные пластиковые флаконы.

Осаждение стволовых клеток на хитозановую матрицу проводили из жидкой питательной среды, содержащей мезенхимные стволовые клетки. Для исследования адгезии клеток на поверхности волокон методом сканирующей электронной микроскопии была проведена процедура фиксации клеток на поверхности волокон. По истечении 72 ч с момента посева клеток образцы промывали 0,1 М PBS (натрий-фосфатный буфер, pH = 7,4), после чего фиксировали в течение 40 мин 0,25 %-м раствором глutarового альдегида в PBS при температуре 4 °С. После удаления фиксирующего раствора образцы промывали PBS, затем проводили дегидратацию материала восходящими концентрациями спиртов и сушили при 20° С. Далее образцы помещали на предметные столики и напыляли на них золото. Изучение объектов проводили на сканирующем электронном микроскопе Supra 55VP (Carl Zeiss) в режиме регистрации вторичных электронов при ускоряю-

а)



б)

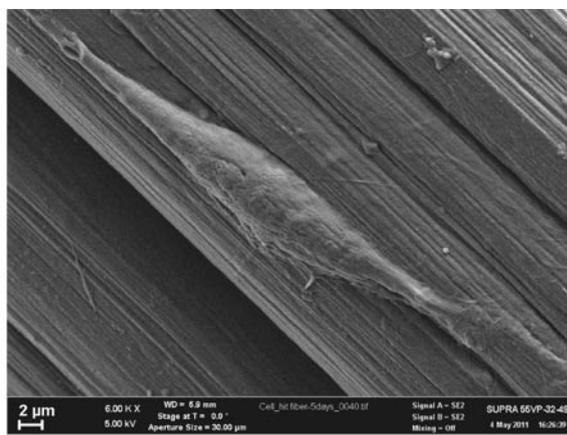


Рис. 9. Микрофотографии поверхности волокон из хитозана, полученных с различной степенью вытяжки  $\lambda$ , %: 20 (а) и 100 (б), после культивации мезенхимных стволовых клеток в течение 3 сут



щем напряжении 20 кВ.

На рис. 9 приведены микрофотографии волокон из хитозана после культивации на них стволовых клеток. Видно, что поверхность волокон содержит стволовые клетки, они хорошо закреплены и распластаны. Поверхность волокна, полученного с высокой вытяжкой ( $\lambda = 100\%$ ), характеризуется фибриллярной структурой поверхности (рис. 9, б), содержит неоднородности в виде каналов, расположенных вдоль волокна. Клетки на такой поверхности имеют вытянутую форму.

Влияние рельефа поверхности матрицы на форму фибробластов исследовано в работах [17, 18], где установлено, что изменение формы стволовых клеток есть один из факторов их направленной дифференциации.

### Заключение

Получены композиционные волокна на основе хитозана и нанофибрилл хитина. Показано, что зависимость вязкости

растворов хитозана от скорости сдвига обусловлена ориентацией макромолекул полимера и наночастиц наполнителя. Введение нанофибрилл хитина в количестве 0,1 – 0,3 мас.% от массы хитозана способствует ориентации макромолекул полимера, что приводит к повышению прочности и модуля упругости волокон.

Установлено, что мезенхимные стволовые клетки хорошо закрепляются и распластываются на поверхности хитозановых волокон. Фибриллизация волокон, полученных с высокой вытяжкой, приводит к появлению продольных каналов на их поверхности, что способствует изменению формы стволовых клеток.

Таким образом, волокна на основе хитозана, согласно полученным результатам, могут быть использованы в качестве одномерных матриц для клеточных технологий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 14-33-00003.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Langer R., Tirrell D.A. Designing materials for biology and medicine // *Nature*. 2004. Vol. 428, pp. 487-492.
2. Dhandayuthapani B., Yoshida Ya., Maekawa T., Kumar D.S. Polymeric scaffolds in tissue engineering application // *International Journal of Polymer Science*. 2011. Vol. 61, pp. 475-480.
3. Rathke T.D., Hudson S.M. Review of chitin and chitosan as fiber and film formers // *Journal Macromol. Sci.* 1994. Vol. 34, pp. 375-437.
4. Rinaudo M. Chitin and chitosan: properties and applications // *Prog. Polym. Sci.* 2006. Vol. 31, pp. 603-632.
5. Pillai C.K.S., Paul W., Sharma C.P. Chitin and chitosan polymers: chemistry, solubility and fiber formation // *Prog. Polym. Sci.* 2009. Vol. 34, pp. 641-678.
6. Sriupayo J., Supaphol P., Rujiravanit R. Preparation and characterization of  $\alpha$ -chitin whisker-reinforced chitosan nanocomposite films with or without heat treatment // *Carbohydr. Polym.* 2005. Vol. 62, pp. 130-136.
7. Muzzarelli R.A.A. Chitin and its derivatives: new trends of applied research // *Carbohydrate Polymers*. 1983. Vol. 3. No. pp. 4, 53-75.
8. Panarin E.F., Nud'ga L.A., Petrova V.A., Bochek A.M. Composite chitin and chitosan based matrices for culturing human dermal cells // *Cell Transplant and Tissue Ing.* 2009. Vol. 4, pp. 42-46.
9. Вихорева Г.А., Гольбрайх Л.С. Пленки и волокна на основе хитина и его производных // *Хитин и хитозан. Получение, свойства и применение.* М., Наука. 2002. С. 254-278.
10. Агеев Е.П., Вихорева Г.А., Зоткин М.А., Матушкина Н.Н., Герасимов В.И., Зезин С.Б., Оболонкова Е.С. Структура и транспортные свойства хитозановых пленок, модифицированных термообработкой // *Высокомолек. соед.* 2004. Т. 46. № 312. С. 2035-2041.
11. Dresvyanina E.N., Dobrovolskaya I.P., Popryadukhin P.V., Yudin V.E., Ivan'kova E.M. Influence of spinning conditions on properties of chitosan fibers // *Fiber Chemistry*. 2012. Vol. 44, pp. 260-263.
12. Dobrovol'skaya I.P., Popryadukhin P.V., Khomenko A.Yu., Dresvyanina E.N., Yudin V.E., Elokhoyskii V. Yu., Chvalun S.N. Structure and characteristics of chitosan based fibers containing chrysotile and halloysite // *Polym. Sci. Ser. A*. 2011. Vol. 53, pp. 418-423.
13. Sikorski P., Hori R., Wada M. Revisit of  $\alpha$ -chitin crystal structure using high resolution X-ray diffraction data // *Biomacromolecules*. 2009. Vol. 10, pp. 1100-1105.
14. Dobrovolskaya I.P., Slutsker L.I., Chereisky

**Z.Yu., Utevsky L.E.** Changing the structure of rayon fibers during pyrolysis // Polymer Science USSR. Ser. A. 1975. Vol. 17, pp. 1555-1559.

15. **Baird D.G.** Viscometry of anisotropic solutions of poly-p-phenyleneterephthalamide in sulfuric acid // Journal of Applied Polymer Science. 1978. Vol. 22, pp. 2701-2706.

16. **Garboczi E., Snyder K., Douglas J., Thorpe M.** Geometrical percolation threshold of overlapping

ellipsoids // Phys. Rev. 1995. Vol. 52, pp. 819-828.

17. **Barbucci R., Pasqui D., Wirsén A., Affrossman S., Curtis A., Tetta C.** Micro and nanostructured surfaces // Journal of Mater. Sci. Mat. in Med. 2003. Vol. 14, pp. 721-725.

18. **Lim J.Y., Donahue H.** Cell sensing and response to micro- and nanostructured surfaces produced by chemical and topographic patterning // J. Tiss. Eng. 2007, Vol. 13, pp. 1879-1891.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ДОБРОВОЛЬСКАЯ Ирина Петровна** – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории полимерных материалов для тканевой инженерии и трансплантологии Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; ведущий научный сотрудник лаборатории механики полимеров и композиционных материалов Института высокомолекулярных соединений РАН.

199004, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 31  
dobrov@hq.macro.ru

**ДРЕСВЯНИНА Елена Николаевна** – научный сотрудник лаборатории полимерных материалов для тканевой инженерии и трансплантологии Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; научный сотрудник лаборатории механики полимеров и композиционных материалов Института высокомолекулярных соединений РАН.

199004, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 31  
elenadresvyanina@gmail.com

**ЮДЕНКО Александра Николаевна** – студентка ИФНиТ Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; инженер-исследователь лаборатории механики полимеров и композиционных материалов Института высокомолекулярных соединений РАН.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
ansa2@mail.ru

**ПОПРЯДУХИН Павел Васильевич** – кандидат технических наук, научный сотрудник лаборатории полимерных материалов для тканевой инженерии и трансплантологии Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; научный сотрудник лаборатории механики полимеров и композиционных материалов Института высокомолекулярных соединений РАН.

199004, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 31  
pavel-pn@mail.ru

**ИВАНЬКОВА Елена Михайловна** – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории полимерных материалов для тканевой инженерии и трансплантологии Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; старший научный сотрудник лаборатории механики полимеров и композиционных материалов Института высокомолекулярных соединений РАН.

199004, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 31  
ivelen@mail.ru

**ЮДИН Владимир Евгеньевич** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры медицинской физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; заведующий лабораторией механики полимеров и композиционных материалов Института высокомолекулярных соединений РАН.

199004, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 31  
yudin@hq.macro.ru



*Dobrovolskaya I.P., Dresvyanina E.N., Yudenko A.N., Popryadukhin P.V., Ivankova E.M., Yudin V.E.* THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF ONE-DIMENSIONAL COMPOSITE MATRIX BASED ON CHITOSAN AND CHITIN NANOFIBRILS AND INTENDED FOR CELL TECHNOLOGIES.

The goals of this work are to obtain and to study the structure and properties of chitosan fibers filled with chitin nanofibrils. Biocompatible and bioresorbable composite fibers consisting of chitosan filled with anisotropic chitin nanoparticles (nanofibrils) were prepared by the coagulation method. The structure of the fibers and of the chitin nanofibrils was investigated by the XRD and SEM methods. Chitin powder was obtained by lyophilization of initial chitin suspension, films by drying the aqueous suspension. It was evident that the microparticles have strip type structure with the transverse size approximately 30  $\mu\text{m}$  and with the thickness of 0.1  $\mu\text{m}$ ; they consist of nanofibrils of 11-12 nm width and 600-800 nm length. The chitin nanofibrils were used as the filler for obtaining the bioresorbable composite fibers. The results of rheological studies allow to conclude that the dependence of the viscosity ( $\eta$ ) on the shear rate ( $\dot{\gamma}$ ) has nonlinear behavior for all investigated solutions. For the chitosan solution not containing the filler, the decrease of viscosity was observed at the shear rate of 10  $\text{s}^{-1}$  or more. The threshold value of the shear rate at which the dependence  $\eta(\dot{\gamma})$  becomes nonlinear displaces to the smaller values when the chitin nanofibril content increases. For the mixture containing 20 wt% of chitin filler the dependence  $\eta(\dot{\gamma})$  becomes linear over a wide range of shear rates. It was found that both components (chitin and chitosan) of these composite fibers were oriented. The incorporation of 0.1–0.3 wt.% of chitin nanofibrils (with respect to dry chitosan) into the chitosan matrix led to an increase in strength and Young modulus of composite fibers. Based on these results, a scheme of formation of oriented structure of composite fibers comprising anisodiametric nanoparticles was developed. The adhesion of stem or somatical cells on the material surface is one of the basic criteria of its use as the matrices for the cellular technologies. SEM micrograph of the chitosan fibers taken after the cultivation of stem cells on them indicated that the surface of the fibers contained stem cells, which were well-fixed and split. The fibrillation of the fibers, obtained on high degree of drawing, contributed to the adhesion on fiber surface of the mesenchymal stem cells that changed their form.

CHITOSAN, CHITIN NANOFIBRIL, RHEOLOGY OF POLYMER SOLUTION, COMPOSITE FIBER, ORIENTED STRUCTURE, MECHANICAL PROPERTIES, ADHESION OF MESENCHYMAL STEM CELLS.

#### REFERENCES

1. Langer R., Tirrell D.A. Designing Materials for Biology and Medicine. *Nature*, 2004, Vol. 428, pp. 487-492.
2. Dhandayuthapani B., Yoshida Ya., Maekawa T., Kumar D.S. Polymeric Scaffolds in Tissue Engineering Application. *International Journal of Polymer Science*, 2011, Vol. 61, pp. 475-480.
3. Rathke T.D., Hudson S.M. Review of Chitin and Chitosan as Fiber and Film Formers. *Journal Macromol. Sci.*, 1994, Vol. 34, pp. 375-437.
4. Rinaudo M. Chitin and Chitosan: Properties and Applications. *Prog. Polym. Sci.* 2006, Vol. 31, pp. 603-632.
5. Pillai C.K.S., Paul W., Sharma C.P. Chitin and Chitosan Polymers: Chemistry, Solubility and Fiber Formation. *Prog. Polym. Sci.*, 2009, Vol. 34, pp. 641-678.
6. Sriupayo J., Supaphol P., Rujiravanit R. Preparation and Characterization of A-Chitin Whisker-Reinforced Chitosan Nanocomposite Films with or without Heat Treatment. *Carbohydr. Polym.*, 2005, Vol. 62, pp. 130-136.
7. Muzzarelli R.A.A. Chitin and Its Derivatives: New Trends of Applied Research. *Carbohydrate Polymers*, 1983, Vol. 3, No. 4, pp. 53-75.
8. Panarin E.F., Nud'ga L.A., Petrova V.A., Bochek A.M. Composite Chitin and Chitosan based Matrices for Culturing Human Dermal Cells. *Cell Transplant and Tissue Ing.*, 2009, Vol. 4, pp. 42-46.
9. Vikhoreva G.A., Golbraykh L.S. Plenki i volokna na osnove khitina i yego proizvodnykh. *Khitin i khitozan. Polucheniye, svoystva i primeneniye.* Moscow, Nauka, 2002, pp. 254-278. (rus)
10. Ageyev Ye.P., Vikhoreva G.A., Zotkin M.A., Matushkina N.N., Gerasimov V.I., Zezin S.B., Obolonkova Ye.S. Struktura i transportnyye svoystva khitozanovykh plenok, modifitsirovannykh termoobrabotkoy. *Vysokomolek. soyed.*, 2004, Vol. 46, No. 312, pp. 2035-2041. (rus)
11. Dresvyanina E.N., Dobrovolskaya I.P., Popryadukhin P.V., Yudin V.E., Ivan'kova E.M. Influence of Spinning Conditions on Properties of Chitosan Fibers. *Fiber Chemistry*, 2012, Vol. 44, pp. 260-263.
12. Dobrovolskaya I.P., Popryadukhin P.V., Khomenko A.Yu., Dresvyanina E.N., Yudin V.E., Elokhovskii V. Yu., Chvalun S.N. Structure and Characteristics of Chitosan Based Fibers Containing

Chrysotile and Halloysite. *Polym. Sci., Ser. A*, 2011, Vol. 53, pp. 418-423.

13. **Sikorski P., Hori R., Wada M.** Revisit of  $\alpha$ -Chitin Crystal Structure Using High Resolution X-ray Diffraction Data. *Biomacromolecules*, 2009, Vol. 10, pp. 1100-1105.

14. **Dobrovolskaya I.P., Slutsker L.I., Chereisky Z.Yu., Utevsky L.E.** Changing the Structure of Rayon Fibers During Pyrolysis. *Polymer Science USSR. Ser. A*, 1975, Vol. 17, pp. 1555-1559.

15. **Baird D.G.** Viscometry of Anisotropic Solutions of Poly-p-Phenyleneterephthalamide in Sulfuric Acid. *J. Appl. Polym. Sci.*, 1978. Vol. 22,

pp. 2701-2706.

16. **Garboczi E., Snyder K., Douglas J., Thorpe, M.** Geometrical Percolation Threshold of Overlapping Ellipsoids. *Phys. Rev.*, 1995, Vol. 52, pp. 819-828.

17. **Barbucci R., Pasqui D., Wirsen A., Affrossman S., Curtis A., Tetta C.** Micro- and Nano-Structured Surfaces. *J. Mater. Sci. Mat. in Med.*, 2003. Vol. 14, pp. 721-725.

18. **Lim J.Y., Donahue H.** Cell Sensing and Response to Micro- and Nano-Structured Surfaces Produced by Chemical and Topographic Patterning. *J. Tiss. Eng.* 2007, Vol. 13, pp. 1879-1891.

#### THE AUTHORS

**DOBROVOLSKAYA Irina P.**

*St. Petersburg Polytechnic University*

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

dobrov@hq.macro.ru

**DRESVYANINA Elena N.**

*St. Petersburg Polytechnic University*

31 Bolshoy Ave. V.O., St. Petersburg, 199004, Russia

elenadresvyanina@gmail.com

**YUDENKO Alexandra N.**

*St. Petersburg Polytechnic University*

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

ansa2@mail.ru

**POPRYADUKHIN Pavel V.**

*St. Petersburg Polytechnic University*

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

pavel-pn@mail.ru

**IVANKOVA Elena M.**

*St. Petersburg Polytechnic University*

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

ivelen@mail.ru

**YUDIN Vladimir E.**

*St. Petersburg Polytechnic University*

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

yudin@hq.macro.ru



УДК 57.086. 2

Г.Е. Побегалов<sup>1</sup>, А.Н. Арсениев<sup>1</sup>, М.В. Якунина<sup>1</sup>, Л.С. Минахин<sup>2</sup><sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Россия<sup>2</sup> Институт Ваксмана, Ратгерский университет штата Нью-Джерси, США

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ СИЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРОМОТОРА С РНК-ПОЛИМЕРАЗОЙ *PSEUDOMONAS AERUGINOSA* НА СТАДИИ ИНИЦИАЦИИ ТРАНСКРИПЦИИ

Одной из важнейших проблем современности является широкое распространение антибиотикоустойчивости у наиболее распространенных патогенных бактерий человека. В частности, одним из таких патогенов является грамотрицательная бактерия *Pseudomonas aeruginosa* (*P. aeruginosa*, синегнойная палочка), вызывающая широкий спектр нозокомиальных инфекций. Поиск новых эффективных способов борьбы с данным патогеном требует тщательного изучения жизнедеятельности этого организма. Особый интерес как мишени для воздействия представляют из себя ключевые ферменты клетки, одним из которых является ДНК-зависимая РНК-полимераза, отвечающая за первую стадию экспрессии генов – транскрипцию.

Применив метод оптической ловушки для изучения инициации транскрипции РНК-полимеразы модельного патогенного организма *P. Aeruginosa*, мы впервые измерили силу взаимодействия РНК-полимеразы этой бактерии с промоторным участком ДНК в ходе образования промоторного комплекса; она составила  $13,1 \pm 2,8$  пН. Полученные данные можно использовать для поиска новых ингибиторов РНК-полимеразы *P. aeruginosa*.

PSEUDOMONAS AERUGINOSA, ТРАНСКРИПЦИЯ, РНК-ПОЛИМЕРАЗА, ОПТИЧЕСКАЯ ЛОВУШКА.

### Введение

Грамотрицательная бактерия *Pseudomonas aeruginosa* (*P. aeruginosa*, синегнойная палочка) является распространенным возбудителем различных инфекций у человека. Данная бактерия может вызывать инфекции дыхательной системы, мочеиспускательного тракта, мягких тканей, а также желудочно-кишечные инфекции, дерматиты и различные систематические инфекции у пациентов с ослабленным иммунитетом. На сегодняшний день патогенные штаммы *P. aeruginosa* все чаще оказываются устойчивыми ко многим антибиотикам. Изучение жизнедеятельности указанной бактерии как модельного патогена представляет большой интерес с точки зрения разработки более эффективных антибиотиков, действующих на данный тип бактерий.

Транскрипция – это первый шаг на пути преобразования информации, закодированной в последовательности ДНК, в белки,

необходимые для жизнедеятельности любых организмов. Известно, что специфическое подавление процессов транскрипции – распространенный механизм биологического действия антибиотиков на бактериальную мишень. Данный процесс осуществляется комплексным ферментом – РНК-полимеразой (РНКП). Первой и лимитирующей стадией для процесса транскрипции является инициация, которая в свою очередь включает в себя множество промежуточных стадий. В природе существует множество белков – факторов инициации, и, соответственно, механизмов регуляции, которые можно использовать для синтеза антибиотиков нового поколения.

Однако основная цель данной стадии – распознавание РНК-полимеразой специализированных последовательностей ДНК – промоторов, с которых в строго определенных местах начинается синтез молекулы РНК.

Все бактериальные промоторы генов,

работающих при росте и развитии бактериальной колонии в физиологических условиях, характеризуются ярко выраженными консервативными нуклеотидными последовательностями (промоторными элементами) и по этим признакам делятся на два основных класса. Промоторы основного (–10/–35)-класса имеют два консервативных района, находящихся на расстояниях –10 и –35 нуклеотидов от старта транскрипции +1 (районы ТАТААТ и ТТGACA, соответственно). Так называемые промоторы с удлинённым (–10)-районом характеризуются отсутствием (–35)-района и дополнительным TG-мотивом, расположенным непосредственно перед (–10)-районом.

Разнообразие биомеханических преобразований, возникающих в ходе транскрипции, а также огромное количество факторов, оказывающих влияние на работу РНКП на каждом этапе транскрипции, делает данный процесс особо интересным для изучения и поиска способов его регулирования. Биохимические исследования *in vitro* ранее позволили охарактеризовать важные аспекты активности РНКП, но многие детали остаются неизвестными из-за усреднения по тысячам молекул при использовании стандартных биохимических подходов. С этой точки зрения большой интерес представляет применение одномолекулярных методов для изучения функциональной активности и регулирования РНКП. Одномолекулярные методы, такие как атомно-силовая микроскопия, одномолекулярная флуоресцентная микроскопия, а также методы магнитной и оптической ловушек, позволяют проводить измерения на одиночных биологических молекулах [1, 2].

В последнее время метод оптической ловушки стал применяться для исследования транскрипции, в частности процесса элонгации, что открыло новые возможности:

наблюдать в режиме реального времени движение одной молекулы РНКП по ДНК;

измерять кинетику реакции;

наблюдать поведение РНКП на матрице;

измерять изменение параметров движения РНКП в зависимости от последовательности матрицы;

измерять силы, развиваемые данным ферментом, на уровне единиц пиконьютонов.

Основными объектами таких одномолекулярных исследований ранее выступали бактериальная РНКП из *Escherichia coli* [3], эукариотическая РНКП II [4, 5] из дрожжей *Saccharomyces cerevisiae* и некоторые вирусные РНКП [6, 7].

В данной работе мы впервые применили одномолекулярный метод оптической ловушки для изучения инициации транскрипции РНКП модельного патогенного организма *P. aeruginosa*.

### Схема эксперимента

В работе была использована уникальная установка «Лазерный пинцет» с двумя оптическими ловушками (НИК «НаноБио», СПбПУ) и четырехканальная микрофлюидная камера, описанные ранее [8, 9].

Схема эксперимента представлена в нижней части рис. 1. Микросфера диаметром 5 мкм, покрытая стрептавидином, закреплялась на поверхности покровного стекла микрофлюидной камеры. РНКП прикреплялась к поверхности микросферы благодаря наличию стрептага (streptag) на С-конце  $\alpha$ -субъединицы, способного связываться со стрептавидином. Концы ДНК были модифицированы биотином и прикреплены к полистироловым микросферам диаметром 3 мкм, покрытым стрептавидином. Манипуляция микросферами осуществлялась при помощи двух оптических ловушек, в результате чего молекула ДНК распрямлялась и подносилась к поверхности микросферы с прикрепленной РНКП. При смещении пьезостолика микросфера, закрепленная на поверхности покровного стекла, смещалась относительно оптических ловушек. Таким образом осуществлялось перемещение молекулы РНКП вдоль выстроенной молекулы ДНК.

При связывании РНКП с промоторной последовательностью ДНК дальнейшее смещение пьезостолика приводило к возникновению силы, стремящейся сместить микросферу с закрепленной ДНК из оптической ловушки. При достижении порога-

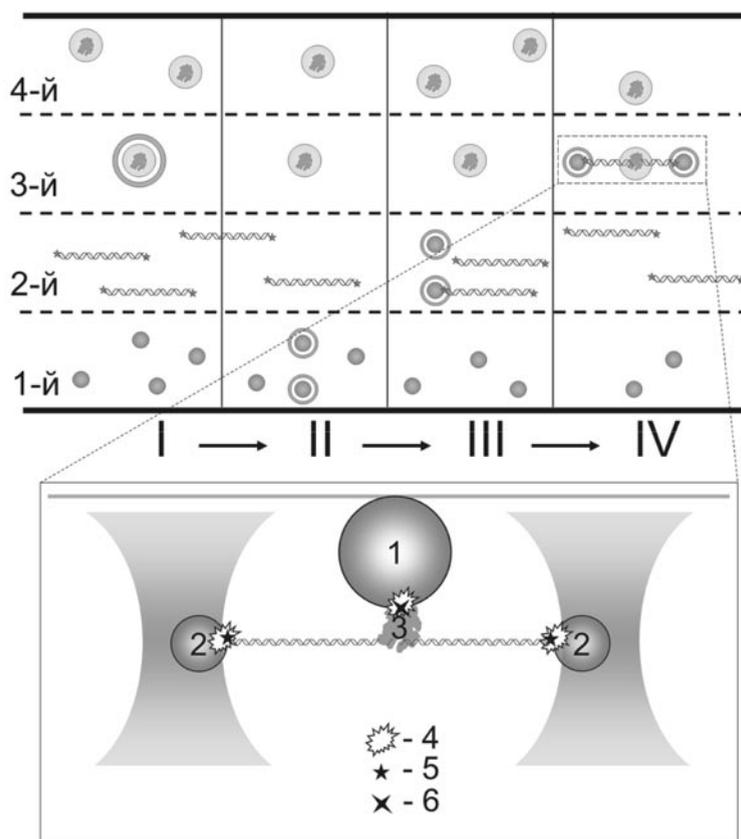


Рис. 1. Схема эксперимента: I – IV – формирование объекта исследования в четырехканальной (1-й – 4-й) микрофлюидной камере; внизу – измерение силы взаимодействия РНКП с промоторной последовательностью ДНК;

1 – полистироловая микросфера диаметром 5 мкм, закрепленная на покровном стекле;  
 2 – полистироловые микросферы диаметром 3 мкм, удерживаемые в оптических ловушках; 3 – РНКП;  
 4 – стрептавидин; 5 – биотин; 6 – strep-tag

вой силы связь между РНКП и ДНК разрывалась.

Сила взаимодействия ДНК и РНКП определялась максимальным смещением микросферы из центра оптической ловушки по формуле

$$F = k\Delta x_m,$$

где  $k$  – жесткость оптической ловушки [9],  $\Delta x_m$  – максимальное смещение микросферы.

Непосредственно перед проведением эксперимента внутренняя поверхность четырехканальной проточной камеры и трубок подвергалась очистке путем последовательного вмывания в каждый канал 100 мкл этанола, 300 мкл дистиллированной воды и 200 мкл буферного раствора (Tris-HCl

50 мМ, pH = 7,5; KCl 40 мМ; MgCl<sub>2</sub> 10 мМ; DTT 5 мМ).

Затем в камеру (см. рис. 1) при одинаковой скорости (1 мкл/мин) подавали следующие жидкости (по 200 мкл в каждый канал):

в 1-й канал – раствор, содержащий 0,01% микросфер диаметром 3 мкм, покрытых стрептавидином;

во 2-й канал – раствор биотинилированных молекул ДНК (15 нМ);

в 3-й канал – буферный раствор;

в 4-й канал – раствор, содержащий микросферы диаметром 5 мкм с поверхностью, модифицированной РНКП.

При указанных условиях эксперимента в микрофлюидной камере формировалось четыре ламинарных потока (см. рис. 1,

1-й – 4-й каналы). При помощи оптической ловушки микросфера с поверхностью, модифицированной РНКП, захватывалась в 4-м канале, переносилась в 3-й и закреплялась на поверхности покровного стекла (см. рис. 1, I)). Затем в 1-м канале осуществлялся захват двух микросфер при помощи оптических ловушек (см. рис. 1, II) Сдвигом микроскопного столика микросферы переносились через 2-й канал в 3-й. За время переноса в среднем одна молекула ДНК успевала закрепиться на одной из микросфер (см. рис. 1, III). Вторая микросфера прикреплялась к свободному концу ДНК, молекула ДНК выпрямлялась и подносились к микросфере с поверхностью, модифицированной РНКП (см. рис. 1, IV).

Движением пьезостолика осуществлялось «сканирование» РНКП по ДНК. При узнавании промоторной последовательности ДНК РНКП связывалась с ДНК, и дальнейшее смещение пьезостолика приводило к натяжению участка ДНК, расположенного между промоторной последовательностью и концом ДНК, закрепленным на микросфере. По смещению микросферы диаметром 3 мкм из центра ловушки опре-

делялась сила натяжения участка ДНК. При достижении пороговой силы натяжения связь между РНКП и ДНК разрывалась.

### Материалы и методы

В работе использовалась РНКП, выделенная из штамма *P. aeruginosa* PAO1RpoA::strep (получена из лаборатории генной технологии Католического университета Лувена, Бельгия). В этом штамме синтезируется геномная рекомбинантная  $\alpha$ -субъединица РНКП, слитая с аффинным хвостом strep-tag, представляющим собой синтетический полипептид из восьми аминокислот (Trp-Ser-His-Pro-Gln-Phe-Glu-Lys), способный специфически связываться с различными аффинными сорбентами на основе стрептавидина. Хроматографическое выделение и очистку РНКП проводили по стандартной методике [10]. Финальная очистка РНКП производилась на гель-фильтрационной колонке Superdex 200D до чистоты приблизительно 95 %, достаточной для проведения эксперимента (рис. 2).

Полученные РНКП прикреплялись к полистироловым микросферам согласно следующему протоколу:

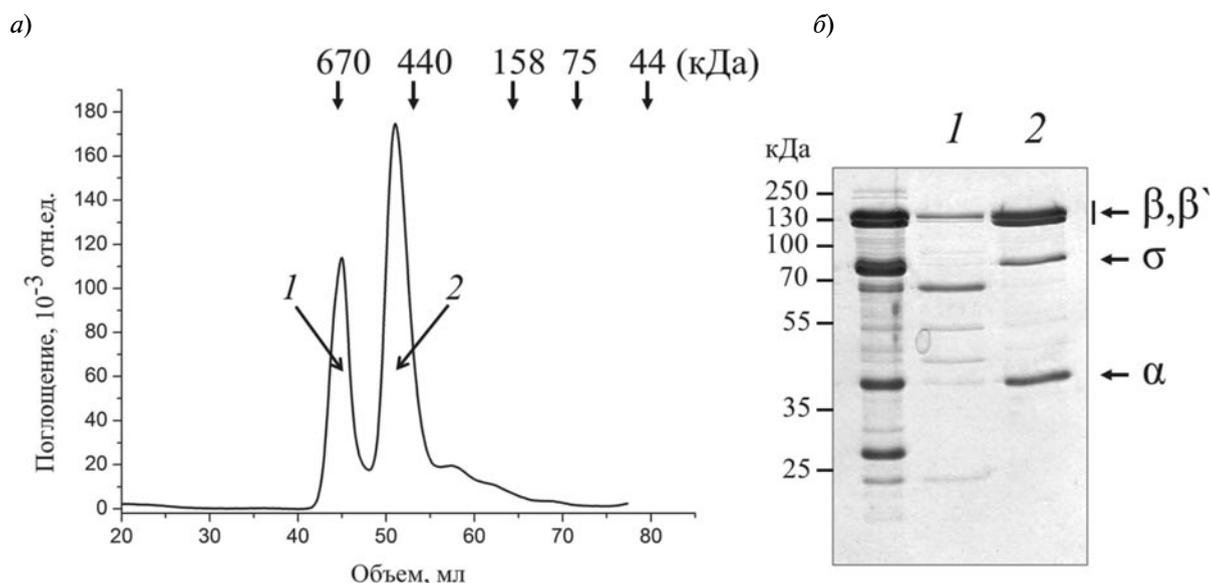


Рис. 2. Анализ эффективности очистки РНК полимеразы *P. aeruginosa* на гель-фильтрационной колонке: а – хроматограмма, б – электрофореграмма фракций.

Левый столбец на электрофореграмме – это суммарный препарат РНК-полимеразы до очистки при помощи гель-фильтрации, 1, 2 – очищенные препараты белков, соответствующие двум основным пикам на хроматограмме;  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\beta'$ ,  $\sigma$  – субъединицы РНК-полимеразы

1. К 10 мкл раствора, содержащего 0,5 % полистироловых микросфер диаметром 5 мкм, покрытых стрептавидином (Spherotech), добавляли 90 мкл Tris-HCl 100 mM, pH = 7,5.

2. Раствор тщательно перемешивали и откручивали в микроцентрифуге на скорости 13 000 об/мин в течение 5 мин. В результате на дне пробирки образовался белый осадок микросфер.

3. Из раствора отбирали 99 мкл супернатанта и добавляли 99 мкл Tris-HCl 100 mM, pH = 7,5.

4. Повторяли откручивание и отбор супернатанта.

5. К микросферам добавляли 20 мкл раствора РНКП (700 нг/мкл).

6. Смесь инкубировали в течение 2 ч с периодическим мягким перемешиванием при помощи вортекса.

В качестве ДНК, содержащей промоторную последовательность, использовалась ДНК бактериофага  $\lambda$  (48 502 пары оснований). Для манипуляции при помощи оптических ловушек концы геномной ДНК модифицировались биотином согласно следующему протоколу:

1. 13 мкл воды, очищенной при помощи системы Milli-Q, смешивали с 2 мкл MgCl<sub>2</sub> 25 mM, 2,5 мкл 10X Taq Buffer (Fermentas),

0,4 мкл dATP 2,5 mM, 0,4 мкл dCTP 2,5 mM, 0,4 мкл dTTP 2,5 mM (Beagle), 1 мкл biotin-11-dGTP 1 mM (Perkin Elmer). Раствор перемешивали на вортексе.

2. Добавляли 4 мкл ДНК бактериофага  $\lambda$  (0,3 мг/мл) и перемешивали раствор легким встряхиванием.

3. Добавляли 0,6 мкл Taq ДНК-полимеразы (1 ед/мкл, Fermentas).

4. Пробирку с полученным раствором инкубировали в термоциклере при температуре 72 °C в течение 30 мин. Температура крышки термоциклера устанавливали равной 80 °C.

5. Раствор охлаждали до 4 °C.

6. Избыточные нуклеотиды выводили из раствора путем фильтрации через спин-колонку MicroSpin S-400 HR, GE Healthcare (центрифугирование 850g, 5 мин).

## Результаты

Сила взаимодействия РНКП с ДНК определялась как максимальная сила, достижимая в ходе натяжения ДНК при увеличении расстояния между микросферой с поверхностью, модифицированной РНКП, связанной с промотором, и микросферой с закрепленным концом ДНК.

Увеличение расстояния между микросферами осуществлялось при помощи пьезостолика; он смешал микрофлюидную камеру с закрепленной на покровном стекле микросферой относительно лазерного луча. С помощью последнего удерживались микросферы, используемые для манипуляции ДНК. На рис. 3 представлена типичная зависимость силы натяжения участка ДНК, расположенного между промотором и концом ДНК, от смещения пьезостолика.

Геном  $\lambda$ -фага — модельного фага, заражающего *E. coli*, — содержит несколько промоторов, узнаваемых бактериальной хозяйской РНКП и регулирующих развитие фага в ходе инфекции. Известно, что промоторы в *E. coli* (и, соответственно, в  $\lambda$ -фаге) и в *P. aeruginosa* имеют очень похожие консенсусы [11]. Известно также, что наиболее сильных промоторов, к тому же образующих стабильные комплексы с РНКП, в геноме всего два: это ранние промоторы  $P_L$  и  $P_R$ . Измеренная сила взаимо-

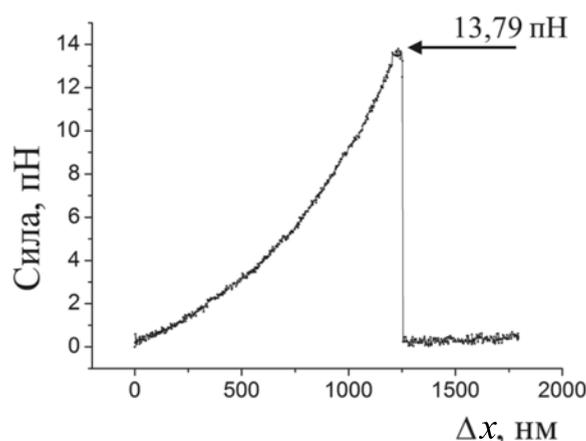


Рис. 3. Зависимость силы натяжения участка ДНК, расположенного между промоторной последовательностью и концом ДНК, закрепленном на микросфере, от смещения пьезостолика.

При достижении силы в 13,79 пН связь между РНК-полимеразой *P. aeruginosa* и ДНК разрывалась

действия РНКП *P. aeruginosa* с промотором составила  $13,1 \pm 2,8$  пН. Судя по небольшому разбросу полученных значений силы взаимодействия, РНКП в ходе эксперимента преимущественно связывалась с одним из этих промоторов. В ходе дальнейших экспериментов планируется провести более детальные исследования для определения силы взаимодействия с каждым из промоторов.

### Заключение

В рамках проведенных исследований впервые была измерена сила взаимодействия РНКП *P. aeruginosa* с промоторным участком ДНК в ходе образования промоторного комплекса.

Разработанный метод исследования РНК полимеразы *P. aeruginosa* с примени-

ем оптических ловушек и полученные с его помощью данные полезны для дальнейшего анализа влияния различных регуляторов на процесс транскрипции в данной бактерии как в модельном патогенном организме.

Следующим шагом планируется изучение влияния белка – регулятора инициации транскрипции – на формирование РНК-полимеразой промоторного комплекса. Для этого будет использоваться ДНК, модифицированная подобным же образом, имеющая один сильный промотор и лишенная других сигналов транскрипции (элонгационных пауз, терминаторов, других промоторов), а также белок – регулятор инициации транскрипции.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках Соглашения № 14.В37.21.0846.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Neuman K., Nagy A. Single-molecule force spectroscopy: optical tweezers, magnetic tweezers and atomic force microscopy // *Nature Methods*. 2008. No. 5, pp. 491-505.
2. Wang F., Greene E. Single molecule studies of transcription: from one RNA polymerase at a time to the gene expression profile of a cell // *J. Mol. Biol.* 2011. Vol. 412. No. 5, pp. 814-831.
3. Abbondanzieri E., Greenleaf W., Shaevitz J., Landick R., Block S. Direct observation of base-pair stepping by RNA polymerase // *Nature*. 2005. Vol. 438. No. 7067, pp. 460-465.
4. Dangukwanich M., Ishibashi T., Liu S., Kireeva M., Lubkowska L., Kashlev M., Bustamante C. Complete dissection of transcription elongation reveals slow translocation of RNA polymerase II in a linear ratchet mechanism // *Elife*. 2013; 2:e00971.
5. Zhou J., Schweikhard V., Block S. Single-molecule studies of RNAPII elongation // *J. Biochim. Biophys. Acta*. 2013. Vol. 1829. No. 1, pp. 29-38.
6. Skinner G., Baumann C., Quinn D., Molloy J., Hoggett J. Promoter binding, initiation, and elongation by bacteriophage T7 RNA polymerase. A single-molecule view of the transcription cycle // *J. Biol. Chem.* 2004. Vol. 279. No. 5, pp. 3239-3244.
7. Skinner G., Kalafut B., Visscher K. Downstream DNA tension regulates the stability of the T7 RNA polymerase initiation complex // *Biophys. J.* 2011. Vol. 100. No. 4, pp. 1034-1041.
8. Сабанцев А.В., Побегалов Г.Е., Мурашов С.В., Мельников А.С., Ходорковский М.А. Модернизация флуоресцентного микроскопа для исследования биологических структур с субдифракционным разрешением // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2012. № 2(146). С. 94–99.
9. Побегалов Г.Е., Арсениев А.Н., Ведяйкин А.Д., Соколова М.Л., Федорова Я.В., Сабанцев А.В. Изменение механических свойств молекулы ДНК при взаимодействии с интеркалирующим красителем YOYO-1 // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2013. № 1(165). С. 136–143.
10. Helmann D. Purification of *Bacillus subtilis* RNA polymerase and associated factors // *Methods in Enzymology*. 2003. Vol. 370, pp. 10-24.
11. Gragerov A., Chenchik A., Aivasashvili V., Beabealashvili B., Nikiforov V. *Escherichia coli* and *Pseudomonas putida* RNA polymerases display identical contacts with promoters // *Mol. Gen. Genet.* 1984. Vol. 195. Iss. 3, pp. 511-515.

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПОБЕГАЛОВ Георгий Евгеньевич – аспирант кафедры биофизики ИФНиТ Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

**АРСЕНИЕВ Анатолий Николаевич** – аспирант НИК «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

**ЯКУНИНА Мария Вячеславовна** – аспирантка кафедры биофизики ИФНиТ Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

**МИНАХИН Леонид Станиславович** – доцент Института Ваксмана, Ратгерс, Университета штата Нью Джерси, США.

190 Frelinghuysen Rd, Piscataway, NJ 08854, USA  
minakhin@waksman.rutgers.edu

**Pobegalov G.E., Arsenyev A.N., Yakunina M.V., Minakhin L.S. THE DETERMINATION OF BINDING FORCE BETWEEN PROMOTER AND PSEUDOMONAS AERUGINOSA RNA POLYMERASE DURING TRANSCRIPTION INITIATION.**

Gram-negative bacteria *Pseudomonas aeruginosa* is a wide-spread cause of different infections that is often found to be resistant to many different antibiotics. Detailed knowledge of these bacteria vital processes can facilitate the development of new effective antibiotics. RNA polymerase is one of the most common targets for antibiotics in bacteria.

In this work optical trapping is used for the first time in order to study transcription initiation in model pathogenic organism *P. aeruginosa*. Three beads configuration have been chosen as an optimal scheme for trapping experiments in this study. The binding force between *P. aeruginosa* RNA polymerase and promoter region in DNA has been measured for the first time, during the assembly of promoter complex. The measured force was  $13.1 \pm 2.8$  pN. These results could be used to search for new *P. aeruginosa* RNA polymerase inhibitors.

PSEUDOMONAS AERUGINOSA, TRANSCRIPTION, RNA-POLYMERAZE, OPTICAL TRAPPING.

#### REFERENCES

1. Neuman K., Nagy A. Single-molecule force spectroscopy: optical tweezers, magnetic tweezers and atomic force microscopy. *Nature Methods*, 2008, No. 5, pp. 491-505.
2. Wang F., Greene E. Single molecule studies of transcription: from one RNA polymerase at a time to the gene expression profile of a cell. *J. Mol. Biol.*, 2011. Vol. 412. No. 5, pp. 814-831.
3. Abbondanzieri E., Greenleaf W., Shaevitz J., Landick R., Block S. Direct observation of base-pair stepping by RNA polymerase. *Nature*, 2005. Vol. 438. No. 7067, pp. 460-465.
4. Dangkulwanich M., Ishibashi T., Liu S., Kireeva M., Lubkowska L., Kashlev M., Bustamante C. Complete dissection of transcription elongation reveals slow translocation of RNA polymerase II in a linear ratchet mechanism. *Elife*, 2013; 2:e00971.
5. Zhou J., Schweikhardt V., Block S. Single-molecule studies of RNAPII elongation. *J. Biochim. Biophys. Acta*, 2013, Vol. 1829, No. 1, pp. 29-38.
6. Skinner G., Baumann C., Quinn D., Molloy J., Hoggett J. Promoter binding, initiation, and elongation by bacteriophage T7 RNA polymerase. A single-molecule view of the transcription cycle. *J. Biol. Chem.*, 2004, Vol. 279, No. 5, pp. 3239-3244.
7. Skinner G., Kalafut B., Visscher K. Downstream DNA tension regulates the stability of the T7 RNA polymerase initiation complex. *Biophys.*, 2011, Vol. 100, No. 4, pp. 1034-1041.
8. Sabantsev A.V., Pobegalov G.E., Murashov S.V., Mel'nikov A.S., Khodorkovskij M.A. The fluorescent microscope upgrading to investigate biological structures with subdiffractional resolution. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2012, No. 2(146), pp. 94-99.
9. Pobegalov G.E., Arseniev A.N., Vedyaykin A.D., Sokolova M.L., Fedorova Ya.V., Sabantsev A.V. Changing of DNA molecule mechanical properties during interaction with YOYO-1 intercalating dye. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2013, No. 1(165), pp. 136-143.

10. **Helmann D.** Purification of *Bacillus subtilis* RNA polymerase and associated factors. *Methods in Enzymology*, 2003, Vol. 370, pp. 10-24.

11. **Gragerov A., Chenchik A., Aivasashvili V.,**

**Beabealashvili B., Nikiforov V.** *Escherichia coli* and *Pseudomonas putida* RNA polymerases display identical contacts with promoters. *Mol. Gen. Genet.*, 1984, Vol. 195, Iss. 3, pp. 511-515.

#### THE AUTHORS

**POBEGALOV Georgiy E.**

*St. Petersburg Polytechnic University*

29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

lwdrums@gmail.com

**ARSENIEV Anatoly N.**

*St. Petersburg Polytechnic University*

29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

arsenievanatoly@gmail.com

**YAKUNINA Maria V.**

*St. Petersburg Polytechnic University*

29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

yakuninam@gmail.com

**MINAKHIN Leonid S.**

*Waksman Institute of Microbiology, Rutgers, The State University of New Jersey.*

190 Frelinghuysen Rd, Piscataway, NJ 08854, USA

minakhin@waksman.rutgers.edu



УДК 544.03

*И.П. Добровольская<sup>1,2</sup>, П.В. Попрядухин<sup>1,2</sup>, В.Е. Юдин<sup>1,2</sup>, Е.М. Иванькова<sup>1,2</sup>*<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный политехнический университет<sup>2</sup>Институт высокомолекулярных соединений РАН

## ФОРМИРОВАНИЕ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ ПЛЕНОК ИЗ АЛИФАТИЧЕСКОГО СОПОЛИАМИДА

Методом коагуляции получены пористые пленки на основе алифатического сополиамида (сополимера  $\epsilon$ -капролактама и гексаметилен-диамин-адипината). Исследовано изменение фазового состава растворов от температуры и концентрации, от состава спирто-водного растворителя. Показано, что пленки со средним размером пор 1,3 мкм характеризуются моодисперсным распределением пор по размерам, имеют прочность 4,4 МПа, относительное удлинение 52 %. Культивация стволовых клеток (ASCs) на поверхности пленок из СПА позволяет сделать вывод об отсутствии их цитотоксичности.

ПЛЕНКИ, ПОРИСТОСТЬ, АЛИФАТИЧЕСКИЙ СОПОЛИАМИД, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ, ПРОЧНОСТЬ, ОТНОСИТЕЛЬНОЕ УДЛИНЕНИЕ, АДГЕЗИЯ СТВОЛОВЫХ КЛЕТОК.

### Введение

Пористые пленочные материалы на основе полимеров алифатического и ароматического строения используют для фильтрации, перапарации, электродиализа, газоразделения жидкостей и газов [1]. В последние годы пористые материалы используются в качестве матриц для адгезии пролиферации стволовых и соматических клеток [2 – 5]. Для создания пористой структуры используют различные методы, в частности облучение полимерной пленки ионами высокой энергии, метод разделения фаз раствора полимера и его коагуляции [1, 6]. Такие пленочные материалы содержат поры с размерами 0,1 – 10 мкм и более.

Особый интерес для клеточных технологий представляют материалы на основе нановолокон, полученных методом электроформования [7 – 9]. Этим методом получают полимерные волокна диаметром от 50 до 4500 нм. Раствор или расплав полимера, попадая в электрическое поле высокого напряжения, поляризуется, что приводит к образованию микроструй, которые осаждаются на приемном электроде в виде нановолокон [10 – 12]. Таким способом получают нановолокна из полиэтилена, полипропилена, поливинилпирролидона, поливинилового спирта, полиэтиленокси-

да, полиамидов, полиметилметакрилата, полилактида, производных целлюлозы и других полимеров [13, 14]. Пленочные материалы на основе нановолокон (размер пор – десятки-сотни микрометров) характеризуются низкой плотностью, высокой пористостью, водо- и газопроницаемостью [2 – 4].

Перспективным направлением использования пористых пленок является получение на их основе материалов медицинского назначения, которые должны обладать биоинертностью, не содержать остатков растворителей и других токсичных примесей, обеспечивать необходимый газо- и влагообмен с внешней средой, препятствовать проникновению патогенной микрофлоры.

В последнее время пористые пленочные материалы нашли применение в качестве матриц для клеточных технологий. В этом случае материал не должен содержать остатков растворителя или других веществ, обладающих цитотоксичностью. Его химическая и пористая структура должна способствовать адгезии стволовых или соматических клеток на поверхности, обеспечивать обменные процессы для эффективной пролиферации и дифференциации клеток.

В связи с этим для получения пористых пленочных материалов представляет интерес

алифатический сополиамид (СПА) – сополимер  $\epsilon$ -капролактама  $-\text{NH}-(\text{CH}_2)_5-\text{CO}-$  и гексаметилендиаминадипината –



Растворителем СПА является спирто-водная смесь, что делает процесс формования экологически безопасным. Материалы из этого полимера не содержат цитотоксичных остатков растворителя, сохраняют свои характеристики в водных средах в течение длительного времени.

Пористая структура и свойства материалов на основе нановолокон, а также СПА, полученного коагуляцией, изучены недостаточно; также мало информации о влиянии растворителя и условий формования (температура, время выдержки раствора перед осаждением) на пористую структуру пленочного материала и его механические характеристики.

Целью работы является исследование фазового состава растворов СПА, формирования пористой структуры пленок, полученных методом коагуляции, изучение прочностных и деформационных свойств, а также адгезии створковых мезенхимных клеток на их поверхности.

### Экспериментальная часть

В работе использовали СПА производства ОАО «Анид» (Россия) с соотношением  $\epsilon$ -капролактама и гексаметилендиаминадипината 60/40; температура плавления по данным дифференциальной сканирующей калориметрии составляла 188 °С. Измерения проводили на калориметре DSC 204 F1 Phoenix, фирма NETZSCH (Германия).

СПА растворяли в спирто-водной смеси при температуре 80 °С в течение одного часа. Формование раствора проводили на стеклянную подложку с помощью щелевой фильеры, высота щели составляла 400 мкм. После выдержки на воздухе в течение определенного времени подложку с раствором помещали в осадитель (воду), где происходила коагуляция; время осаждения составляло 10 мин, после чего пленку сушили на воздухе.

Механические характеристики определяли в режиме одноосного растяжения на

образцах в виде полос шириной 2 мм и длиной рабочей части 25 мм. Испытания проводили на универсальной установке для механических испытаний UTS 10 (Германия); скорость растяжения образцов составляла 40 мм/мин. По результатам испытаний определяли модуль упругости  $E$ , прочность на разрыв  $\sigma_p$  и разрывную деформацию  $\epsilon_p$ .

Начало разделения фаз определяли по точке помутнения раствора, переход в твердое состояние – по отсутствию его текучести.

Водопроницаемость измеряли на лабораторной установке при избыточном давлении 1 атм, образцы имели форму дисков диаметром 20 мм и толщину 150 мкм. Паропроницаемость пленок определяли по изменению веса бюкса с водой, покрытого исследуемой пленкой. Расстояние от пленки до поверхности воды составляло 10 мм.

Измерения вязкости растворов проводили на реометре MCR301 фирмы Anton Paar при 20 °С. При измерении зависимости вязкости от скорости сдвига использовали измерительный узел CC17 «цилиндр в цилиндре». Удельную поверхность пористых материалов определяли по изотермам адсорбции азота при 77 °К по методу Брунауэра – Эммита – Теллера [14]. Для измерений использовали аппарат SORPTOMATIC 1990 Carlo Erba.

Измерения распределения пор по размерам, среднего радиуса пор проводили на поросиметре Pascal 140 + 240 by Thermo Electron-Porotec.

Структуру пленок исследовали с помощью сканирующего электронного микроскопа Supra 55VP фирмы Carl Zeiss (Германия).

### Измерение фазового разделения растворов СПА

Для изучения фазового разделения растворов СПА использовали метод светорассеяния. Начало разделения фаз определяли по точке помутнения; измерения проводили на спектрофотометре SPECORD (Германия). Как известно, интенсивность света с длиной волны  $\lambda$  при его прохождении через оптически неоднородную среду снижается, причем потеря интенсивности проходяще-

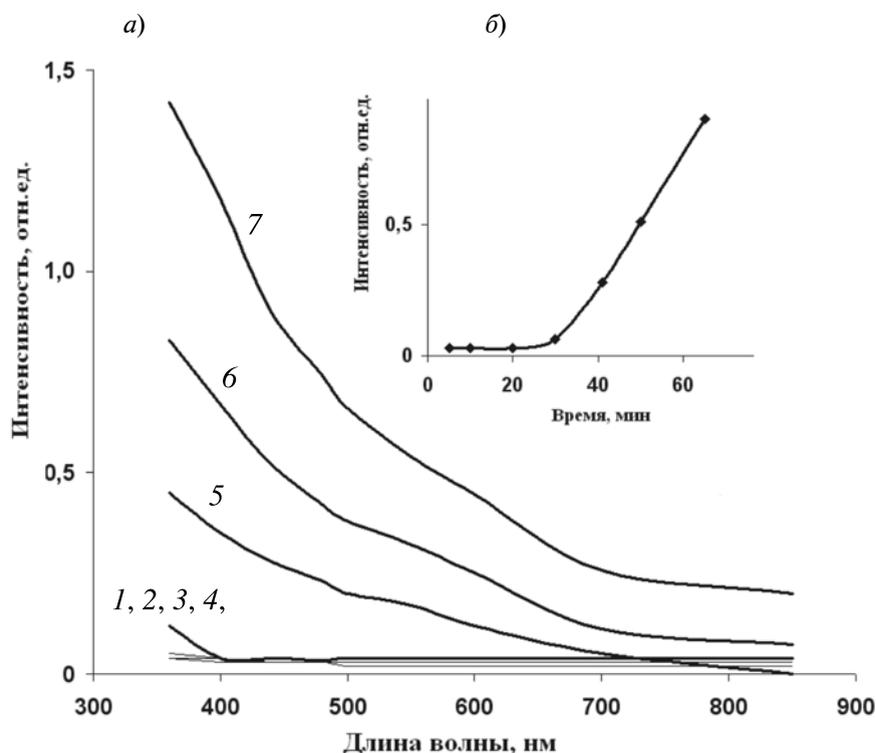


Рис. 1. Зависимости интенсивности светорассеяния растворов СПА от длины волны света  $\lambda$ , полученные после различного времени их выдержки  $t$  (а) и от времени выдержки ( $\lambda = 440$  нм) (б). Значения  $t$ , мин: 5 (кривая 1), 10 (2), 20 (3), 30 (4), 40 (5), 50 (6) и 70 (7)

го светового пучка зависит от размера рассеивающих частиц, их концентрации, толщины слоя, полидисперсности размеров частиц. В работе для определения точки помутнения использовали свет с длинами волн в диапазоне 350 – 850 нм.

На рис. 1, а приведены зависимости интенсивности проходящего света от длины волны для растворов СПА с концентрацией 18 мас. %; соотношение этанол/вода было 70/30. Перед измерением светорассеяния растворы выдерживались при 20 °С в течение различного времени (от 5 до 70 мин).

Зависимость интенсивности рассеяния света с длиной волны  $\lambda = 440$  нм от времени выдержки раствора приведена на рис. 1, б. Увеличение интенсивности светорассеяния в зависимости от времени позволяет сделать заключение о начале образования гелевой фазы, которому соответствует точка перегиба на зависимости «интенсивность светорассеяния – время» (рис. 1, б).

Аналогичные кривые были получены

для растворов с различной концентрацией полимера, а также с соотношением этанол/вода от 40/60 до 100/0.

Для цитологических исследований пленочных материалов были использованы культуры мезенхимных стволовых клеток жировой ткани крысы (ASCs). Культивирование стволовых клеток проводили в  $\text{CO}_2$ -инкубаторе в атмосфере влажности 70 %, при  $T = 37$  °С, содержание углекислого газа составляло 5 – 7 %. Для оценки степени адгезии клеток к различным субстратам использовали платы с квадратными лунками (Nunc, США), в которые помещали исследуемые материалы.

Осаждение стволовых клеток на СПА-матрицу проводили из жидкой питательной среды, содержащей стволовые клетки; время выдержки исследуемого образца в матриксе составляло от одного часа до двух недель. Для исследования адгезии клеток и их пролиферации методом сканирующей электронной микроскопии была проведена

фиксация клеток на поверхностях материалов с использованием раствора глутарового альдегида. По истечении необходимого времени с момента посева клеток образцы промывали 0,1 М PBS (фосфатный буферный раствор), pH = 7,4; после этого фиксировали в течение 40 мин 0,25 %-м раствором глутарового альдегида в PBS при  $T = 4 \text{ }^\circ\text{C}$ . После удаления фиксирующего раствора образцы промывали PBS и проводили дегидратацию материала восходящими концентрациями спиртов. После удаления этанола образцы помещали на 30 мин в гексаметилдисилазан, после чего высушивали на воздухе.

### Основные результаты и их обсуждение

**Свойства растворов СПА в спирто-водных смесях.** Известно [1, 6], что процесс формирования пористой структуры из раствора полимера включает следующие стадии: фазовое разделение раствора с выделением частиц геля, замещение растворителя осадителем и образование пор.

Визуально фазовое разделение в системе полимер-растворитель проявляется в помутнении раствора, что связано с образованием частиц геля с повышенной плотностью. При этом происходит синерезис растворителя из образовавшихся частиц геля и, как следствие, уменьшение концентрации полимера в жидкой фазе. При попадании системы с высокой гетерогенностью плотности в осадитель, на месте областей с пониженной плотностью образуются поры различной формы и размеров. Области с повышенной концентрацией полимера формируют плоские элементы структуры, обеспечивающие прочностные свойства материала.

На рис. 2 приведена диаграмма состояния растворов СПА разной концентрации в растворителе с отношением этанол/вода 80/20;  $t$  – время выдержки раствора при  $T = 20 \text{ }^\circ\text{C}$ . Ниже кривой 1 раствор находится в однофазном жидком состоянии. При увеличении времени его выдержки на воздухе, происходит фазовое разделение, образование гелеобразной фазы (область между кривыми 1 и 2). Выше кривой 2 завершает-

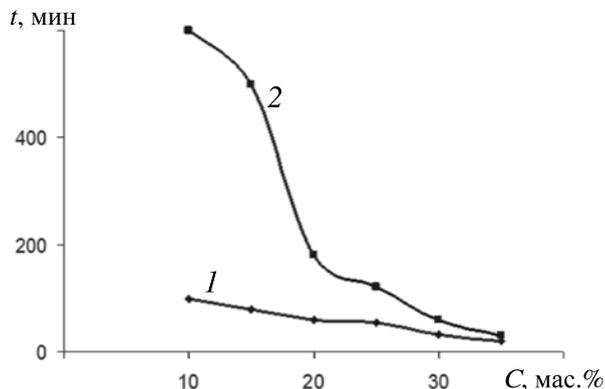


Рис. 2. Диаграмма состояния растворов СПА в растворителе (соотношение этанол/вода – 80/20)

ся переход раствора в гелеобразное состояние во всем объеме.

Растворы с концентрацией СПА выше 20 мас.% характеризуются узким временным интервалом существования двухфазной системы. Это создает трудности для формирования пористой структуры с необходимыми параметрами: общей пористостью, средним размером пор, распределением пор по размерам.

Оптимальным сочетанием времени начала фазового разделения раствора и интервалом существования двух фаз обладают растворы с концентрацией 15 – 20 мас.%. Это подтверждается результатами реологических исследований растворов СПА разной

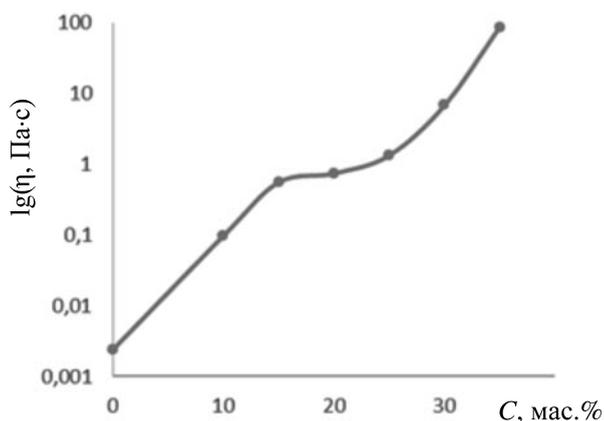


Рис. 3. Зависимость вязкости раствора СПА от его концентрации (растворитель – смесь этанол/вода с отношением 80 / 20 об. %),  $T = 20 \text{ }^\circ\text{C}$

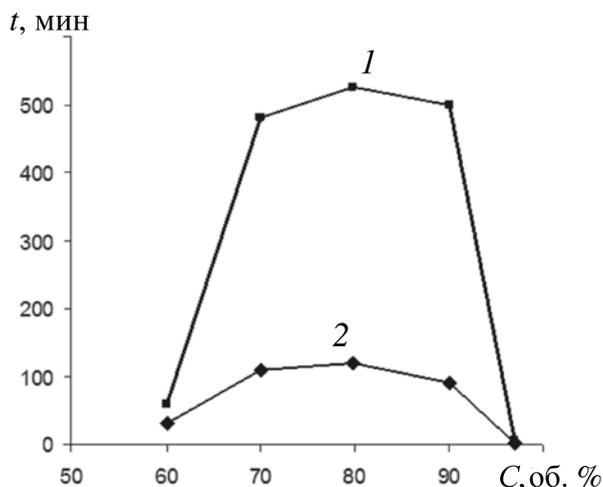


Рис. 4. Диаграмма состояния растворов СПА с концентрацией 18 мас. %;  $t$  – время выдержки раствора при  $T = 20$  °С;  $C$  – объемное содержание этанола в спирто-водной смеси. Выше кривой 1 – гель, ниже кривой 2 – раствор СПА

концентрации. Все растворы СПА в спирто-водных растворителях являются ньютоновскими жидкостями, т. е. для них отсутствует зависимость вязкости от скорости сдвига. На рис. 3 приведена зависимость вязкости растворов СПА (растворитель – смесь этанол/вода с отношением 80/20 об. %) от их концентрации. Видно, что в диапазоне концентраций 15 – 20 мас.% вязкость растворов изменяется незначительно, ее значения позволяют формовать из раствора как пленки, так и волокна.

Важным фактором, влияющим как на растворение полимера, так и на формирование пористой структуры, является состав растворителя, соотношение этанол/вода. Анализ диаграммы состояния растворов, содержащих 18 мас.% СПА, в спирто-водных смесях с различным содержанием этанола (рис. 4) позволил определить оптимальный состав растворителя. Гомогенный раствор СПА существует ниже кривой 2, гель – выше кривой 1. Раствор СПА на основе спирто-водной смеси, содержащей 80 об.% этанола, характеризуется максимальным временным интервалом, в котором одновременно существуют две фазы: частицы геля и раствор с низким содержанием полимера. При увеличении времени  $t$  выдержки раствора в интервале  $t_1 \leq t \leq t_2$  доля гелевой фазы увеличивается, а раствора уменьшается. Варьирование соотношения фаз позволяет прогнозировать объем пор и их средний размер.

**Структура пористых пленок СПА.** Наличие двух фаз в растворе СПА и их влияние на пористую структуру пленки подтверждают данные электронно-микроскопических исследований. Коагуляция 10 мас.% раствора СПА после его выдержки на стеклянной подложке в течение 120 с приводит к образованию двух видов элементов структуры: плоских частиц (рис. 5, а) и частиц сферической формы (рис. 5, б). Можно предположить, что плоские частицы – результат коагуляции гелевой фазы с пониженным содержанием растворителя; сферы же, на-

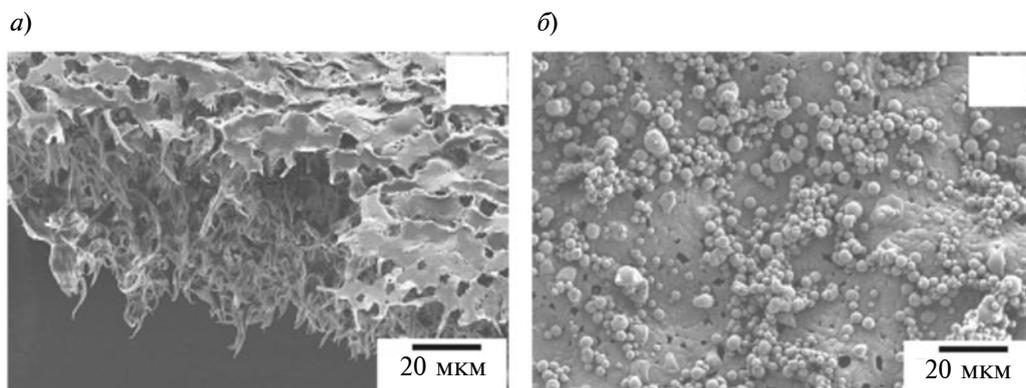


Рис. 5. Микрофотографии пленок, полученных из растворов СПА с концентрацией 10 мас.% и выдержанных перед осаждением в течение 120 с; снимки сделаны на поверхности (а) и во внутреннем слое (б) пленки

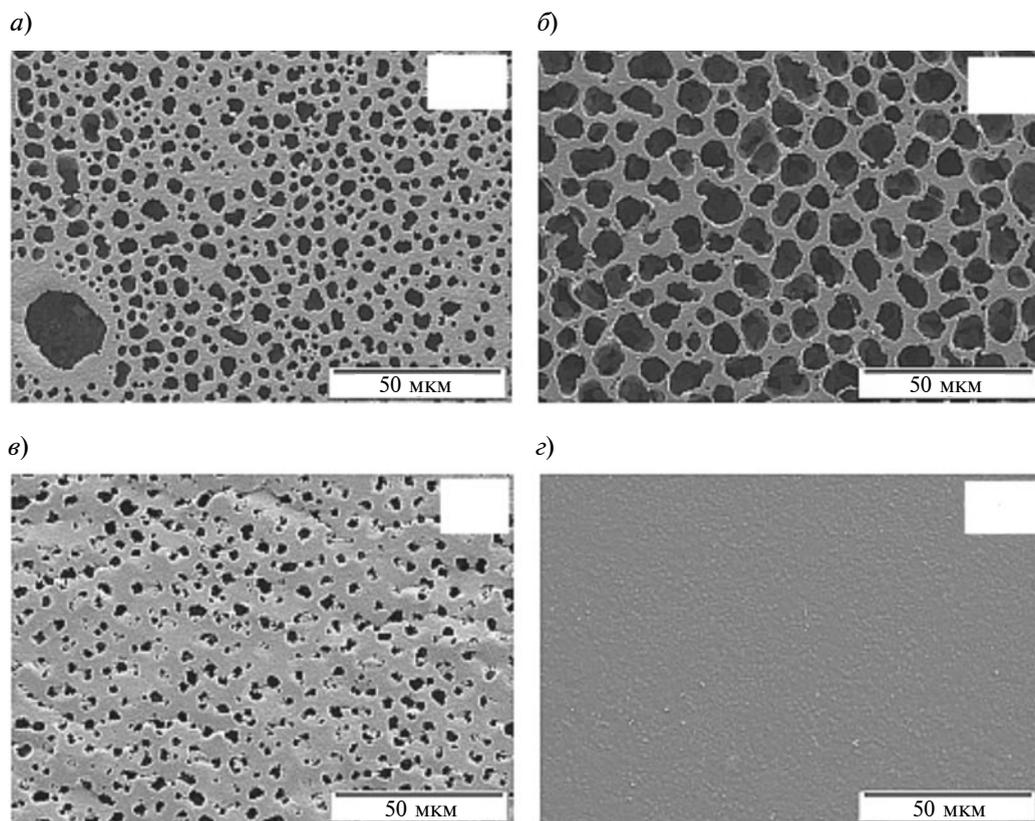


Рис. 6. Микрофотографии поверхностей пленок СПА, полученных из раствора концентрации 18 мас.%; время выдержки перед осаждением, мин: 1 (а), 2 (б), 4 (в) и 20 (з)

против, – следствие коагуляции раствора с пониженным содержанием полимера и повышенным содержанием растворителя.

При формовании на подложку раствора, содержащего 18 мас.% СПА, выдержке его в течение более 1 мин и последующем помещении его в осадитель пленка не содержит изолированных сферических частиц (рис. 6).

Пленки, выдержанные в течение 1 – 6 мин на воздухе, а затем погруженные в осадитель (рис. 6, а – в), обладают хорошо развитой пористой структурой. При времени выдержки  $t$  менее 2 мин пористая структура неоднородна, наблюдается большой разброс размеров пор от 1 до 50 мкм. При выдержке в течение 2 мин поры равномерно покрывают всю поверхность пленки. Методом ртутной порометрии получены величина среднего размера пор и функция распределения пор по размерам (рис. 7). Пленка, полученная из 18 мас.%-го раствора после вы-

держки перед осаждением в течение 2 мин, обладает монодисперсным распределением пор со средним размером 1,3 мкм.

При увеличении времени выдержки размер пор и их количество уменьшаются

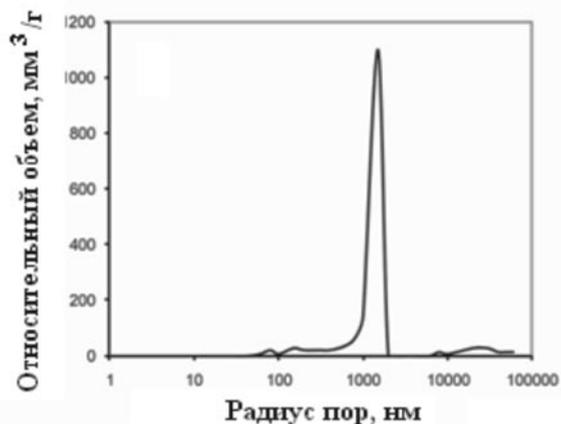


Рис. 7. Функция распределения пор по размерам пленки СПА

вплоть до полного исчезновения (рис. 6, *з*) при выдержке в течение 20 мин и более. Длительная выдержка на подложке сформированного раствора приводит к образованию геля во всем объеме, препятствует образованию пор при контакте с осадителем.

**Свойства пористых пленок из СПА.** О наиболее развитой пористой структуре пленок, их сквозной пористости свидетельствуют данные по водопроницаемости полученных пленок (табл. 1). Последняя зависит от времени выдержки раствора на подложке перед осаждением и времени гелеобразования. Наибольшая водопроницаемость у пленок, выдержанных перед осаждением в течение 2 мин, наименьшая – в течение 20 мин.

Важной характеристикой пористых пленок является их паропроницаемость. Измерения показали, что величина паропроницаемости составляет 0,26 г/(см<sup>2</sup>·сут). Это значение близко к значениям паропроницаемости материалов, используемых в качестве раневых покрытий [16].

Пористые пленки из СПА обладают механическими характеристиками (табл. 2),

позволяющими их использовать как основу для раневых покрытий, матриц для клеточных технологий, в качестве фильтрационного материала. Отметим, что пористость существенно снижает прочность пленок. Пленки с минимальной пористостью обладают максимальными значениями прочности и модуля упругости.

**Оценка цитотоксичности пористых пленок из СПА.** О перспективности использования пористых пленок на основе СПА для клеточных технологий свидетельствуют результаты исследования адгезии и пролиферации стволовых клеток на поверхности пленок. На рис. 8 приведены микрофотографии пленок после их экспозиции в клеточном матриксе в течение 3 и 7 сут. Видно, что поверхность матрицы покрыта клетками, что свидетельствует о хорошей адгезии стволовых клеток по отношению к матрице, отсутствию ее цитотоксичности.

Таким образом, пористые пленочные материалы на основе СПА, полученные методом коагуляции, могут быть использованы в качестве материалов медицинского назначения, в частности раневых покры-

Таблица 1

**Водопроницаемость пленок СПА, полученных с различным временем выдержки перед осаждением**

Время, мин	1	2	4	6	20
Поток, кг·ч·м <sup>-2</sup>	187	233	171	46	0

Таблица 2

**Механические характеристики пленок СПА, полученных с различным временем выдержки перед осаждением**

Время, мин	$E$ , МПа	$\sigma_p$ , МПа	$\varepsilon_p$ , %
1	91 ± 10	3,2 ± 0,2	23 ± 2
2	129 ± 18	4,4 ± 0,2	52 ± 5
4	287 ± 17	8,4 ± 0,2	123 ± 3
6	465 ± 37	12 ± 1	212 ± 1
20	829 ± 79	48 ± 4	382 ± 46

Обозначения:  $E$  – модуль упругости,  $\sigma_p$  – прочность на разрыв,  $\varepsilon_p$  – разрывная деформация.

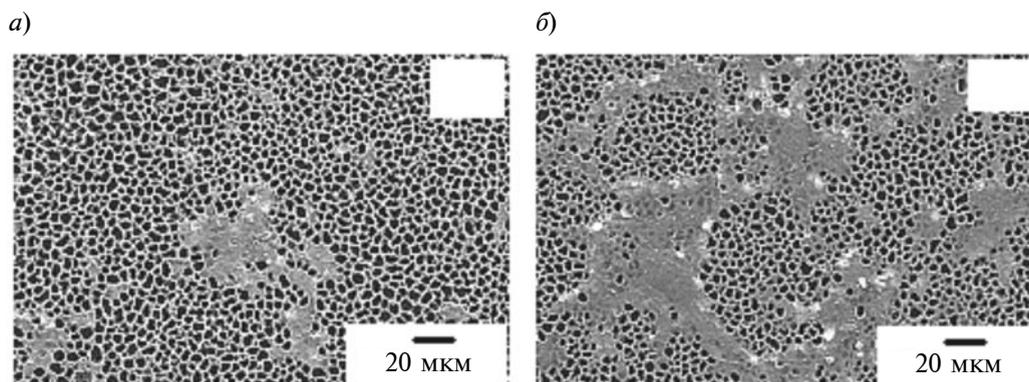


Рис. 8. Культивация стволовых клеток (ASCs) на пористых пленках из СПА в течение трех (а) и семи суток (б)

тий, а также матриц для клеточных технологий.

### Заключение

Исследование фазового состава растворов СПА в спирто-водном растворителе позволило разработать оптимальные параметры формирования пористой структуры пленок, полученных методом коагуляции. Пленки характеризуются

монодисперсным распределением пор со средним размером 1,3 мкм, прочностью 4,4 МПа, относительным удлинением 52 %. Культивация стволовых клеток (ASCs) на поверхности пленок из СПА позволяет сделать вывод об отсутствии их цитотоксичности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант №14-33-00003.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Mulder M.** Basic principles of membrane technology. Center for Membrane Science and Technology. University of Twente, The Netherlands, Kluwer, Dordrecht, 1996. 564 p.
2. **Mitchell G.R., Domingos M., Bartolo P.** Polymers, biomanufacturing and regenerative medicine // *Advanced Materials Research*. 2012. Vol. 506, pp. 11-14.
3. **Zhang Y., Li R., Fan Y., Liu H., Guo Y., Wang L., Shi C., Zhu D., Zhang X.** Microarchitectural and mechanical characterization of chitosan/hydroxyapatite/demineralized bone matrix composite scaffold // *Journal of Porous Materials*. 2012. Vol. 19. No. 2, pp. 251-259.
4. **Kim M.S., Kim J.H., Min B.H., Chun H.J., Han D.K., Lee H.B.** Polymeric scaffolds for regenerative medicine // *Polymer Reviews*. 2011. Vol. 51. No. 1, pp. 23-52.
5. **Tanaka Y., Yamaoka H., Nishizawa S., Nagata S., Ogasawara T., Asawa Y., Fujihara Y., Takato T., Hoshi K.** The optimization of porous polymeric scaffolds for chondrocyte/atelocollagen based tissue-engineered cartilage // *Biomaterials*. 2010. Vol. 31. No. 16, pp. 4506-4516.
6. **Kesting R.E.** Synthetic polymeric membranes. A structural perspective. 2<sup>nd</sup> Ed. New York, John Wiley and Sons, 1985. 348 p.
7. **Sill T.J., von Recum H.A.** Electrospinning: Applications in drug delivery and tissue engineering // *Biomaterials*. 2008. No. 29, pp. 1989-2006.
8. **Ma P.X., Zhang R.** Synthetic nano-scale fibrous extracellular matrix // *J. Biomed. Mater. Res.* 1999. No. 46, pp. 60-72.
9. **Croister F., Jérôme C.** Chitosan-based biomaterials for tissue engineering // *European Polymer Journal*. 2013. No. 49, pp. 780-792.
10. **Doshi J., Reneker D.H.** Electrospinning process and applications of electrospun fibers // *J. Electrostatics*. 1995. Vol. 35. No. 1, pp. 51-60.
11. **Greiner A., Wendorff J.H.** Electrospinning: A fascinating method for the preparation of ultra-thin fibers // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007. No. 46, pp. 5670-5703.
12. **Liu H.Q., Hsieh Y.L.** Ultrafine fibrous cellulose membranes from electrospinning of cellulose acetate // *J. Polym. Sci. B., Polym. Phys.* 2002. Vol. 40. No. 18, pp. 19-29.
13. **Schiffman J.D., Schauer C.L.** A review: Electrospinning of biopolymer nanofibers and their applications // *Polymer Revs.* 2008. No. 48, pp. 317-352.

14. Huang Z.M., Zhang Y.Z., Kotaki M., Ramakrishna S. A review on polymer nanofibers by electrospinning and their applications in nanocomposites // Compos. Sci. Technol. 2003. No. 63, pp. 2223-2253.

15. Brunauer S., Emmett P.H., Teller E. Absorption of gases in multimolecular layers // J. Am. Chem. Soc. 1938. Vol. 60. Iss. 2, pp. 309-319.

16. Арьев Т.Я. Ожоги и отморожения. Л.: Медицина, 1971. 285 с.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ДОБРОВОЛЬСКАЯ Ирина Петровна** – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории полимерных материалов для тканевой инженерии и трансплантологии Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, ведущий научный сотрудник лаборатории механики полимеров и композиционных материалов Института высокомолекулярных соединений РАН.

199004, Россия, г. Санкт-Петербург, В. О. Большой пр., 31  
dobrov@hq.macro.ru

**ПОПРЯДУХИН Павел Васильевич** – кандидат технических наук, научный сотрудник лаборатории полимерных материалов для тканевой инженерии и трансплантологии Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, научный сотрудник лаборатории механики полимеров и композиционных материалов Института высокомолекулярных соединений РАН.

199004, Россия, г. Санкт-Петербург, В. О. Большой пр., 31  
pavel-pn@mail.ru

**ЮДИН Владимир Евгеньевич** – доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией полимерных материалов для тканевой инженерии и трансплантологии Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, заведующий лабораторией механики полимеров и композиционных материалов Института высокомолекулярных соединений РАН.

199004, Россия, г. Санкт-Петербург, В. О. Большой пр., 31  
yudin@hq.macro.ru

**ИВАНЬКОВА Елена Михайловна** – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории полимерных материалов для тканевой инженерии и трансплантологии Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, старший научный сотрудник лаборатории механики полимеров и композиционных материалов Института высокомолекулярных соединений РАН.

199004, Россия, г. Санкт-Петербург, В. О. Большой пр., 31  
ivelen@mail.ru

#### *Dobrovolskaya I.P., Popryadukhin P.V., Yudin V.E., Ivankova E.M.* POROUS STRUCTURE FORMING OF THE ALIPHATIC COPOLYAMIDE FILMS.

The effects of concentration and viscosity of the copolyamide (CoPA) (copolymer of  $\epsilon$ -caprolactam and hexamethylenediaminadipate) solutions in aqueous/alcoholic solvents on their phase state have been studied. To study the CoPA solution phase state the light scattering method was used. The start of the phase separation was estimated by the determination of the turbidity point. The films obtained by the coagulation method were characterized by monodisperse pores distribution with an average pore size of 1.3  $\mu\text{m}$ . Mechanical properties, water permeability of the porous films and the specific surface areas according to BET method were measured. Using scanning electron microscopy it was found that proliferation of mesenchymal ASCs stem cells on such porous films were characterized by good adhesion of cells to CoPA matrix. It was shown that the porous structure, transport and mechanical properties of those CoPA films allowed their application as two-dimensional matrices for cellular technology.

ALIPHATIC COPOLYAMIDE, COAGULATION METHOD, POROUS STRUCTURE, MECHANICAL PROPERTIES, MESENCHYMAL STEM CELLS.

## REFERENCES

1. **Mulder M.** *Basic principles of membrane technology* Center for Membrane Science and Technology. University of Twente, The Netherlands, Kluwer, Dordrecht, 1996. 564 p.
2. **Mitchell G.R., Domingos M., Bartolo P.** Polymers, biomanufacturing and regenerative medicine. *Advanced Materials Research*, 2012, Vol. 506, pp. 11-14.
3. **Zhang Y., Li R., Fan Y., Liu H., Guo Y., Wang L., Shi C., Zhu D., Zhang X.** Microarchitectural and mechanical characterization of chitosan/hydroxyapatite/demineralized bone matrix composite scaffold. *Journal of Porous Materials*, 2012, Vol. 19, No. 2, pp. 251-259.
4. **Kim M.S., Kim J.H., Min B.H., Chun H.J., Han D.K., Lee H.B.** Polymeric scaffolds for regenerative medicine. *Polymer Reviews*, 2011, Vol. 51, No. 1, pp. 23-52.
5. **Tanaka Y., Yamaoka H., Nishizawa S., Nagata S., Ogasawara T., Asawa Y., Fujihara Y., Takato T., Hoshi K.** The optimization of porous polymeric scaffolds for chondrocyte/atelocollagen based tissue-engineered cartilage. *Biomaterials*, 2010, Vol. 31, No. 16, pp. 4506-4516.
6. **Kesting R.E.** *Synthetic polymeric membranes. A structural perspective.* 2<sup>nd</sup> Ed. N. Y., John Wiley and Sons, 1985. 348 p.
7. **Sill T.J., von Recum H.A.** Electrospinning: Applications in drug delivery and tissue engineering. *Biomaterials*, 2008, No. 29, pp. 1989-2006.
8. **Ma P.X., Zhang R.** Synthetic nano-scale fibrous extracellular matrix. *J. Biomed. Mater. Res.*, 1999, No. 46, pp. 60-72.
9. **Croister F., Jérôme C.** Chitosan-based biomaterials for tissue engineering. *European Polymer Journal*, 2013, No. 49, pp. 780-792.
10. **Doshi J., Reneker D.H.** Electrospinning process and applications of electrospun fibers. *J. Electrostatics*, 1995, Vol. 35, No. 1, pp. 51-60.
11. **Greiner A., Wendorff J.H.** Electrospinning: A fascinating method for the preparation of ultrathin fibers. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2007, No. 46, pp. 5670-5703.
12. **Liu H.Q., Hsieh Y.L.** Ultrafine fibrous cellulose membranes from electrospinning of cellulose acetate. *J. Polym. Sci. B, Polym. Phys.*, 2002, Vol. 40, No. 18, pp. 19-29.
13. **Schiffman J.D., Schauer C.L.** A review: Electrospinning of biopolymer nanofibers and their applications. *Polymer Reviews*, 2008, No. 48, pp. 317-352.
14. **Huang Z.M., Zhang Y.Z., Kotaki M., Ramakrishna S.** A review on polymer nanofibers by electrospinning and their applications in nanocomposites. *Compos. Sci. Technol.*, 2003, No. 63, pp. 2223-2253.
15. **Brunauer S., Emmett P.H., Teller E.** Absorption of gases in multimolecular layers. *J. Am. Chem. Soc.*, 1938, Vol. 60, Iss. 2, pp. 309-319.
16. **Ar'ev T.Ya.** *Ozhogi i otmorozheniya.* Leningrad, Meditsina, 258 p. (rus)

## THE AUTHORS

### **DOBROVOLSKAYA Irina P.**

*St. Petersburg Polytechnic University,  
Institute of Macromolecular Compounds RAS  
31 Bolshoy Ave. V.O., St. Petersburg, 199004, Russia  
dobrov@hq.macro.ru*

### **POPRYADUKHIN Pavel V.**

*St. Petersburg Polytechnic University,  
Institute of Macromolecular Compounds RAS  
31 Bolshoy Ave. V.O., St. Petersburg, 199004, Russia  
dobrov@hq.macro.ru*

### **YUDIN Vladimir E.**

*St. Petersburg Polytechnic University  
Institute of Macromolecular Compounds RAS  
31 Bolshoy Ave. V.O., St. Petersburg, 199004, Russia  
yudin@hq.macro.ru*

### **IVANKOVA Elena M.**

*St. Petersburg Polytechnic University  
Institute of Macromolecular Compounds RAS  
31 Bolshoy Ave. V.O., St. Petersburg, 199004, Russia  
evelen@mail.ru*

УДК 531.6

*Д.А. Кожанов*

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

## **СТРУКТУРНАЯ МОДЕЛЬ ГИБКИХ ТКАНЫХ, ПРЕДВАРИТЕЛЬНО ПОВРЕЖДЕННЫХ КОМПОЗИТОВ В УСЛОВИЯХ ОДНООСНОГО РАСТЯЖЕНИЯ**

В данной работе представлена структурная модель поведения гибких тканых композиционных материалов с полотняным плетением армирующих нитей в условиях статического одноосного растяжения. Учтено упруго-пластическое деформирование образцов материала. Выявлено влияние предварительного повреждения материала на поведение диаграммы деформирования. Адекватность предлагаемой модели подтверждена сравнением расчетных результатов с экспериментальными данными.

ГИБКИЙ ТКАНЫЙ КОМПОЗИТ, ДИАГРАММА ДЕФОРМИРОВАНИЯ, ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЕ ПОВРЕЖДЕНИЕ, СТРУКТУРНАЯ МОДЕЛЬ, ОДНООСНОЕ РАСТЯЖЕНИЕ.

### **Введение**

В работе рассматриваются гибкие тканые композиционные материалы. В качестве армирующих элементов в них выступают ткань полотняного плетения и виниловая матрица. Такие материалы используются, например, при производстве скеггов для судов на воздушной подушке, быстровозводимых надувных сооружений, а также при изготовлении мягкой кровли для зданий и сооружений.

Необходимо учесть, что материал в процессе эксплуатации может испытывать ударные воздействия в локальных областях. Для определения последствий повреждения и его влияния на жесткостные характеристики материала необходима модель, которая бы описывала структуру рассматриваемых материалов и последствия ударного воздействия.

На данный момент предложено довольно много моделей, позволяющих описывать поведение тканых композиционных материалов; эти модели отражают структуру материалов, их геометрическую не-

линейность [1 – 3], а также используют сведения континуальной механики [4 – 6]. Однако все они не дают возможности описать, например, влияние предварительного повреждения материала. Кроме того, имеющиеся модели (за исключением модели [6]) применимы только к негибким тканым композитам.

Таким образом, моделей, способных описать поведение гибких тканых композиционных материалов при упруго-пластическом деформировании, а также учитывающих геометрическую нелинейность материала, явно недостаточно. Модели же, которая бы позволяла описывать влияние предварительного повреждения такого материала, в литературе не представлено.

В данной работе впервые построена модель, отражающая поведение материала при вводимых начальных повреждениях. Последние сводятся к остаточным геометрическим искажениям, причем не только в зоне упругих деформаций, но и в условиях упругопластического деформирования.

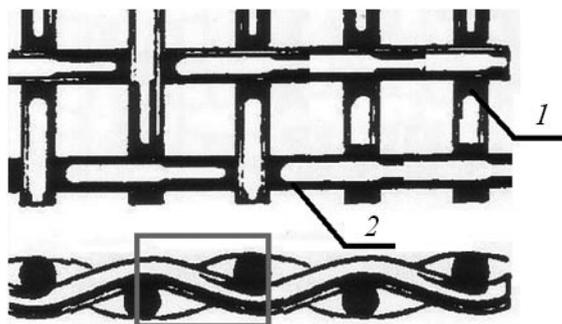


Рис. 1. Полотняное плетение нитей основы (1) и утка (2) тканого композита: виды сбоку и сверху; структурный элемент модели выделен прямоугольником

### Построение структурной модели

Тканые композиционные материалы имеют достаточно сложную структурную геометрию (рис. 1). Для построения структурной модели целесообразно выделить в материале область, которая вносит основной вклад в характеристику жесткости. Необходимо также оценить вид диаграммы деформирования и определить, какие изменения вносят в нее предварительные повреждения.

### Экспериментальные предпосылки

С целью учета предварительного повреждения материала было экспериментально исследовано влияние ударного воздействия на поведение диаграммы деформирования композитов.

Предварительно листы исследуемых материалов (тканый композит) подвергали ударному воздействию; для этого их фиксировали на установке Devenport FDB/230 и ударили по ним грузами с различным весом на битке.

Образцы вырезали таким образом, чтобы направление основы совпадало с осью образца и поврежденная область находилась в его центре. Образцы имели следующие размеры, м:

длина  $l_0 = 0,022$ ; ширина  $b_0 = 0,016$ ;  
толщина  $h = 0,005$ ; длина поврежденной области  $l_d = 0,01$ .

Испытания на растяжение проводили с

постоянной скоростью, равной 0,3 мм/с.

Для удобства анализа экспериментальных данных были систематизированы виды диаграмм деформирования. В результате было сделано заключение о трехсегментном характере диаграммы деформирования (рис. 2). На диаграммах измеряли три угла наклона прямых, по которым вычисляли экспериментальные параметры – модули упругости и упрочнения (модули Юнга).

Было специально изучено влияние предварительного ударного воздействия разной силы на поведение диаграмм деформирования тканых композитов при одноосном статическом нагружении. Усредненные результаты такого исследования представлены в таблице (приведена в конце статьи).

### Структурная модель поведения тканого композита

Главной особенностью тканых композитов является их геометрическая нелинейность. В полотняном плетении нами был выделен структурный элемент (см. рис. 1), который периодически повторяется в структуре рассматриваемого материала. В условиях статического одноосного растяжения вдоль нитей основы удобно использовать именно такой элемент.

К структурному элементу с жестко закрепленным левым концом приложим с правого конца растягивающую силу  $F$  (рис. 3). Определим горизонтальное перемещение точки  $A$ , так как нас интересует деформи-

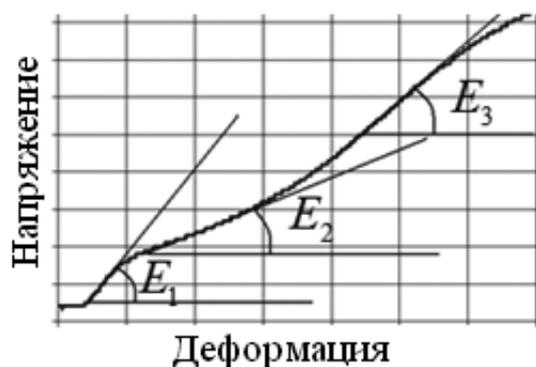


Рис. 2. Типичная диаграмма деформирования тканого материала;  $E_1$  – модуль упругости на первом сегменте;  $E_2, E_3$  – модули упрочнения на втором и третьем сегментах

рование элементов конструкции из рассматриваемого материала, не приводящее к выходу из плоскости. Для этого воспользуемся теоремой Кастельяно [7]:

$$q_m = \frac{\partial U_i}{\partial Q_m},$$

где  $q_m$  – перемещение в направлении действия силы  $Q_m$ ,  $U_i$  – внутренняя энергия, накопленная в  $i$ -м структурном элементе.

Для нахождения внутренней энергии разобьем наш структурный элемент на несколько участков (см. рис. 3). Разбиение на участки проведено по признаку их основной функции в процессе деформирования.

Полученный структурный элемент можно рассматривать как стержень с прямоугольным сечением, так как направление действия силы совпадает с направлением армирующих элементов в нити;  $\rho$  – радиус кривизны на четвертом и пятом участках, в неповрежденном образце  $\rho = \infty$ .

Предположим, что первый и второй участки будут работать только на растяжение; тогда третий – на сдвиг, а четвертый и пятый – на изгиб. При этом на четвертом и пятом участках возможно возникновение пластических деформаций (кроме упругих). Таким образом, внутренняя энергия, накопленная в стержне, включает два слагаемых:

$$U = U_{\text{упр}} + U_{\text{пластич}},$$

где  $U_{\text{упр}} = \sum_{l=1}^5 U_{\text{упр}}^i$ ,  $U_{\text{пластич}} = \sum_{l=4}^5 U_{\text{пластич}}^i$  – величины внутренней энергии, накопленной соответственно в структурном элементе от упругих деформаций и в стержне от пластических деформаций, возникающих на четвертом и пятом участках.

Первый и второй участки – эквивалентны; они будут характеризоваться только продольной силой  $N$ . Третий участок структурного элемента характеризуется перерезывающей силой  $Q$ . Четвертый и пятый участки также эквивалентны и характеризуются изгибающим моментом  $M$ .

Для нахождения  $U_{\text{пластич}}$  воспользуемся линейной теорией с кинематическим упрочнением [7], согласно которой зависимость напряжение – деформация представляется следующим образом:

$$\sigma = \begin{cases} E\varepsilon, \varepsilon \leq \varepsilon_i; \\ \sigma_i + E_t(\varepsilon - \varepsilon_i), \varepsilon > \varepsilon_i, \end{cases}$$

где  $E$  – модуль упругости на участке упругого деформирования,  $E_t$  – модуль упрочнения на пластическом участке диаграммы деформирования;  $\sigma_i$  – предел текучести;  $\varepsilon_i = \sigma_i / E$  – максимальные упругие деформации.

Найдем удельную внутреннюю энергию деформаций, накопленную до разрушения материала, как

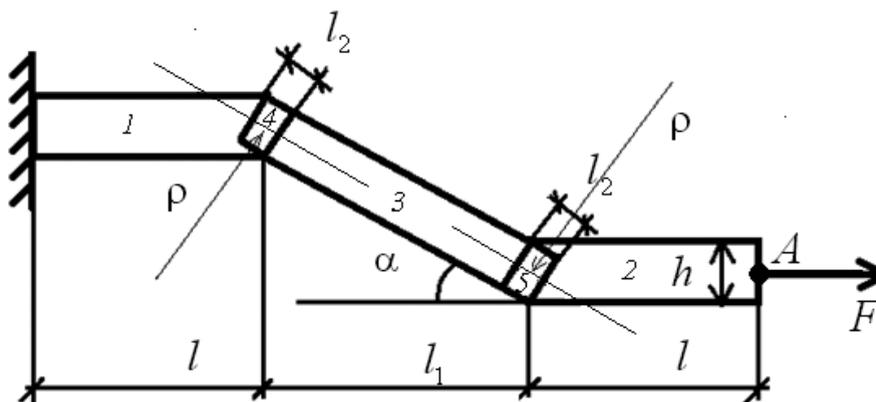


Рис. 3. Схематическое представление структурного элемента в условиях одноосного растяжения:

$F$  – растягивающая сила;  $A$  – точка для наблюдения перемещения; 1 – 5 – номера участков разбиения (даны их размеры);  $\rho$  – радиус кривизны, вносимой изгибающим моментом при повреждении (здесь  $\rho = \infty$ )

$$W = \int_0^{\varepsilon_p} \sigma d\varepsilon_p.$$

В результате интегрирования получим следующее выражение:

$$W = (\sigma^2 - \sigma_t^2) \frac{E - E_t}{2EE_t}.$$

После этого оценим распределение напряжений по сечению стержня. На рис. 4 изображено поперечное сечение 4-го (либо 5-го) участка структурного элемента, в которых проходит граница  $h_0$  между зонами упругого и пластического деформирования. Поперечное сечение сечение 4-го и 5-го участка – это прямоугольник  $h \times b$ , где  $h$  – высота сечения (толщина единичной нити плетения),  $b$  – высота сечения (ширина единичной нити плетения). Размеры области упругого деформирования  $2h_0 \times b$ , где  $h_0$  – расстояние от нейтральной оси до области пластического деформирования.

Для нахождения величины  $h_0$  воспользуемся формулой

$$\frac{1}{\rho} = \frac{2\varepsilon}{h} = \frac{\varepsilon_t}{h_0},$$

где  $\rho$  – радиус кривизны,  $\varepsilon$  – текущая деформация.

Выразим  $\varepsilon$  при  $\sigma > \sigma_t$ :

$$\varepsilon = \frac{\sigma - \sigma_t}{E_t} + \frac{\sigma_t}{E} = \frac{\sigma_t E_t + E(\sigma - \sigma_t)}{EE_t}.$$

Тогда

$$\rho = \frac{h}{2\varepsilon} = \frac{hEE_t}{2(\sigma_t E_t + E(\sigma - \sigma_t))};$$

$$h_0 = \varepsilon_t \rho = \frac{\sigma_t E_t h}{2(\sigma_t E_t + E(\sigma - \sigma_t))}.$$

Внутренняя энергия, накопленная в стержне от пластических деформаций, находится как

$$U_{\text{пластич}}^1 = U_{\text{пластич}}^2 = 2 \int_0^{l_2} \int_0^b \int_0^{h/2} W dW;$$

$$U_{\text{пластич}}^1 = \frac{bl_2 h(E - E_t)}{EE_t} (\sigma^2 - \sigma_t^2) \times$$

$$\times \left[ 1 - \frac{\sigma_t E_t}{\sigma_t E_t + E(\sigma - \sigma_t)} \right].$$

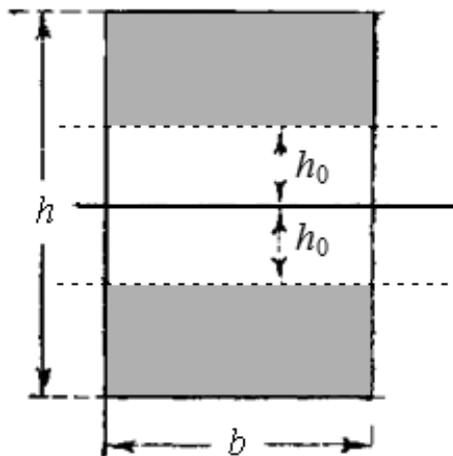


Рис. 4. Четвертый (либо пятый) участок структурного элемента, где находится граница между зонами упругого (светлая область) и пластического деформирования; граница показана пунктиром

Таким образом, внутренняя энергия, накопленная в  $i$ -м структурном элементе, выражается как

$$U_i = \begin{cases} U_{\text{упр}}, \sigma \leq \sigma_t; \\ U_{\text{упр}} + U_{\text{пластич}}, \sigma > \sigma_t. \end{cases}$$

Применяя теорему Кастельяно, получаем, что

$$\frac{\partial U_{\text{упр}}}{\partial F} = \frac{2F}{E} \left[ \frac{l}{A} + \frac{6 l_1 (1 + \nu) \sin \alpha}{5 A} + \frac{l_2^3 \sin \alpha}{3 I} \right],$$

где  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $\alpha$  – угол наклона 3-го участка структурного элемента (см. рис. 3),  $I$  – момент инерции поперечного сечения,  $A = h \times b$  – площадь поперечного сечения нити структурного элемента;

$$\frac{\partial U_{\text{пластич}}}{\partial F} = \frac{bl_2 h(E - E_t)}{EE_t} \times$$

$$\times \left\{ 2\sigma \left( 1 - \frac{\sigma_t E_t}{\sigma_t E_t + E(\sigma - \sigma_t)} \right) + (\sigma^2 - \sigma_t^2) \left[ \frac{\sigma_t E_t E}{A(\sigma_t E_t + E(\sigma - \sigma_t))^2} \right] \right\}.$$

Горизонтальное перемещение точки  $A$  следует выражению

$$\Delta_A = \begin{cases} \frac{\partial U_{\text{упр}}}{\partial F}, \sigma \leq \sigma_t; \\ \frac{\partial U_{\text{упр}}}{\partial F} + \frac{\partial U_{\text{пластич}}}{\partial F}, \sigma > \sigma_t. \end{cases}$$

### Учет влияния повреждений

В предыдущем разделе была выдвинута модель, описывающая поведение структурного элемента тканого композита при растяжении вдоль нити основы вплоть до его разрушения. На следующем этапе развития модели необходимо учесть влияние предварительных повреждений материала.

Введем предположения о форме образца, подвергнувшегося ударному повреждению. На рис. 5 изображено его продольное сечение. Видно, что в центре сечения имеется криволинейный участок. Представим этот участок половиной дуги окружности и полагаем, что повреждение распространяется по всей ширине образца. В этом случае задачу можно рассматривать как одномерную.

Допустим, что остаточные деформации, которые возникают после предварительного ударного нагружения, связаны с изменением радиусов кривизны на четвертом и пятом участках (рис. 6).

На четвертом участке структурного элемента направление вносимого повреждением радиуса кривизны  $\rho_0$  совпадает с направлением радиуса кривизны  $\rho$ , вносимым изгибающим моментом. На пятом участке структурного элемента направление  $\rho_0$  обратно направлению радиуса кривизны  $\rho$ .

В упругой области деформации, вносимые повреждением, следуют выражению  $\varepsilon_t = h / \rho_0$ .

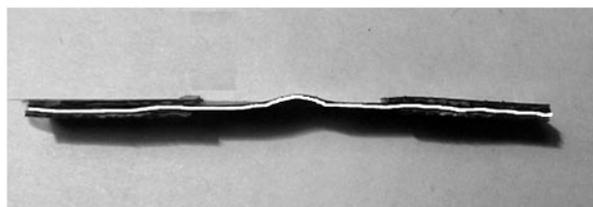


Рис. 5. Продольное сечение образца после ударного нагружения; в центре имеется криволинейный участок

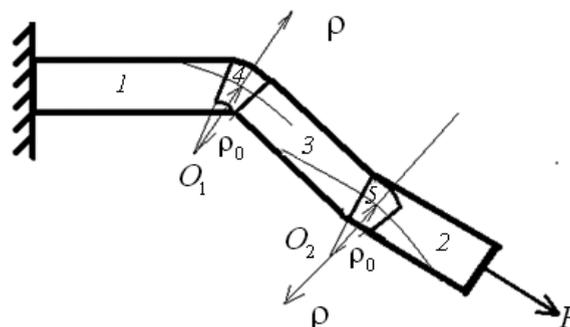


Рис. 6. Моделирование результата предварительных повреждений образца:  $O_1, O_2$  – центры дуг кривизны;  $\rho, \rho_0$  – радиусы кривизны, вносимые изгибающим моментом и повреждением, соответственно

В пластической области диаграммы деформирования влияние повреждений можно выразить следующим образом:

$$h_0 = \varepsilon_t (\rho \pm \rho_0) = \frac{\sigma_t E_t h}{2(\sigma_t E_t + E(\sigma - \sigma_t))} \pm \frac{\sigma_t}{E} \rho_0;$$

$$\left( \frac{\partial U_{\text{пласт}}}{\partial F} \right)_{\text{повр}} = \frac{b l_2 h (E - E_t)}{E E_t} \times$$

$$\times \left\{ 2\sigma \left( 1 \pm \frac{\sigma_t \rho_0}{E h} - \frac{\sigma_t E_t}{\sigma_t E_t + E(\sigma - \sigma_t)} \right) + \right.$$

$$\left. + (\sigma^2 - \sigma_t^2) \left[ \frac{\sigma_t E_t E}{A(\sigma_t E_t + E(\sigma - \sigma_t))^2} \right] \right\}.$$

Образцы, изучаемые в эксперименте, содержали, согласно нашей модели, одиннадцать структурных элементов по длине образца; четыре из них были повреждены, а семь остались неповрежденными. Таким образом, суммарное удлинение образца композита следует выражению

$$\Delta = 7 \left( \frac{\partial U_{\text{упр}}}{\partial F} + \frac{\partial U_{\text{пласт}}}{\partial F} \right) +$$

$$+ 4 \left( \left( \frac{\partial U_{\text{пласт}}}{\partial F} \right)_{\text{повр}} + \varepsilon_t l_0 \right).$$

На рис 7. представлены экспериментальные и расчетные диаграммы деформирования, полученные с применением построенной модели.

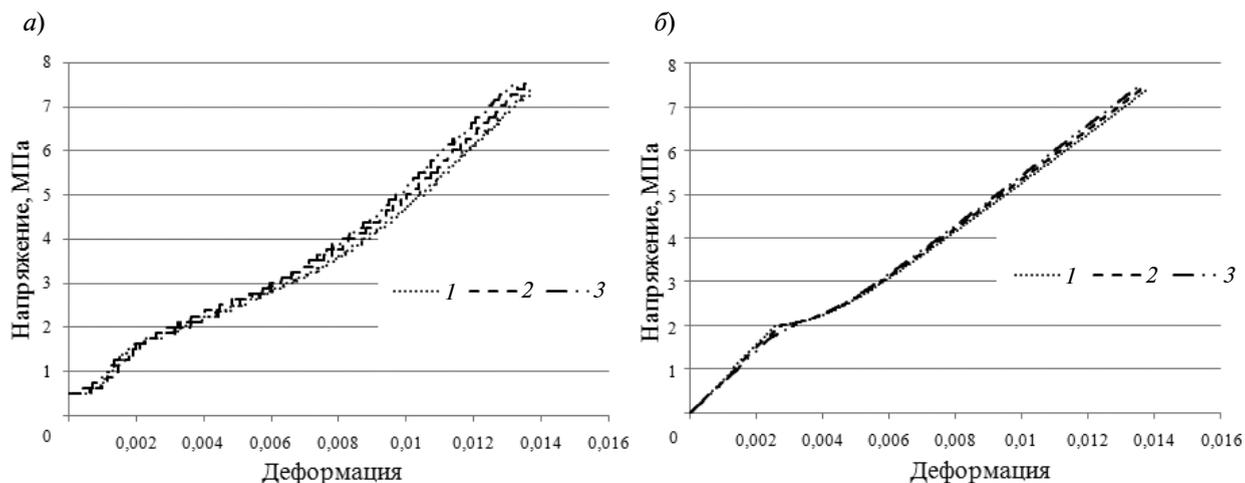


Рис. 7. Экспериментальные (а) и расчетные (б) диаграммы деформирования неповрежденного (1) и предварительно поврежденных (2, 3) материалов. Повреждения материала эквивалентны нагрузкам 300 г (2) и 500 г (3)

**Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными**

В таблице представлено сравнение результатов расчета по развитой нами структурной модели с экспериментальными данными.

Таким образом, полученная модель дает хорошее качественное описание диаграммы деформирования тканых композитов в условиях статического одноосного растяжения, вплоть до разрушения. В результате построенной модели жесткость на первом и втором

Таблица

**Сравнение экспериментальных и расчетных результатов по одноосному растяжению гибких тканых композитов, подвергнутых и не подвергнутых предварительному повреждению**

$k$	$E_k$ , МПа		Среднеквадратичное отклонение, МПа	Погрешность, %
	эксперимент	расчетный		
<i>Неповрежденные образцы</i>				
1	687,5	775,9	44,2	12,9
2	305,5	281,9	11,8	7,7
3	687,5	565,1	61,2	17,8
<i>Поврежденные образцы (нагружение, эквивалентное 300 г)</i>				
1	680,6	760,9	40,2	11,8
2	275,0	221,9	26,6	19,3
3	687,5	570,7	58,4	17,0
<i>Поврежденные образцы (нагружение, эквивалентное 550 г)</i>				
1	675,5	730,6	27,6	8,2
2	250,0	204,0	23,0	18,4
3	692,3	579,4	56,4	16,3

Обозначения:  $E_k$  – модуль Юнга на  $k$ -м сегменте диаграммы деформирования (см. рис. 2).

Примечания. 1. Среднеквадратичное отклонение рассчитывалось между экспериментальным и расчетным значениями.

2. Повреждение образцов осуществлялось ударным нагружением.



участках диаграммы одноосного растяжения снижается с увеличением уровня повреждений, а на третьем возрастает, что соответствует результатам эксперимента.

Также установлено, что, согласно предлагаемой модели, при увеличении уровня повреждений уменьшается длина второго участка диаграммы деформирования. Данное явление также обнаружено при анализе результатов эксперимента.

### Заключение

Впервые предложена модель, которая

позволяет описывать поведение гибких тканых композиционных материалов при одноосном растяжении образцов, учитывая геометрическую нелинейность материала и влияние его предварительного повреждения на диаграмму деформирования. Проведенные эксперименты подтвердили адекватность предлагаемой модели. Полученные результаты открывают новые возможности для прогнозирования последствий ударных воздействий на тканые композиционные материалы в самых разнообразных сферах их применения.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Naas R.** The stretching of the fabric and the shape of the envelope. NASA TR-16, 1917. 154 p.
2. **Васильев В.В.** Механика конструкций из композиционных материалов. М.: Машиностроение, 1988, 270 с.
3. **Васильев В.В.** Композиционные материалы. М.: Машиностроение, 1990. 510 с.
4. **Man X., Swan C.C.** A mathematical modeling framework for analysis of functional clothing // *J. Eng. Fiber and Fabrics*. 2007. Vol. 2. No. 3, pp. 10-27.
5. **Wu Z., Au C.K., Yuen M.** Mechanical properties of fabric materials for draping simulation // *Int. J. Clothing Sc. Tech.* 2003. Vol. 15. No. 1, pp. 56-68.
6. **Берендеев Н.Н.** Описание поведения тканого композита при статическом нагружении с использованием структурной модели // *Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского*. 2013. № 4(4). С. 173–179.
7. **Беляев Н.М.** Сопrotивление материалов. М.: Наука, 1965. 856 с.

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

**КОЖАНОВ Дмитрий Александрович** – аспирант *Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского*.  
603950, Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23  
pbk996@mail.ru

---

## *Kozhanov D.A.* A STRUCTURAL MODEL FOR FLEXIBLE WOVEN AND PRE-DAMAGED COMPOSITES UNDER CONDITIONS OF UNIAXIAL TENSION.

In this paper we consider a flexible woven composite materials with plain weave reinforcing fibers and vinyl matrix. The main features of these materials are a geometric nonlinearity and a complexity of their microstructure. Flexible woven composites differ in architecture of plain weave, the percentage of reinforcing fibers and their thickness. The paper puts forward micromechanical structural model describing the complete diagram of deformation of the flexible woven composites under uniaxial tension. The model is laminated with the inelastic deformations. A periodically repeating element was detached, and then it was divided into sub-elements. The strain energy was calculated at each structural element and then it was used to calculate displacements according to the Castellano theorem. The article exemplifies modeling of preliminary damage to the material, and the influence of damage on the stress-strain diagram was analyzed. The damage was introduced by changing in the topology of geometry of reinforcing strands, the change correlating with certain residual deformations. This model is universal for any flexible composite woven plain weave. The simulation results were compared with experimental ones, and the model demonstrated a good fit to the data mentioned and minimum errors.

FLEXIBLE WOVEN COMPOSITE, DIAGRAM OF DEFORMATION, PRELIMINARY DAMAGE, STRUCTURAL MODEL, UNIAXIAL TENSION.

#### REFERENCES

1. **Haas R.** *The Stretching of the Fabric and the Shape of the Envelope*. NACATR-16, 1917.
2. **Vasilyev V.V.** *Mekhanika konstruksiy iz kompozitsionnykh materialov*. Moscow, Mashinostroyeniye, 1988. 270 p. (rus)
3. **Vasilyev V.V.** *Kompozitsionnyye materialy*. Moscow, Mashinostroyeniye, 1990, 510 p. (rus)
4. **Man X., Swan C.C.** A mathematical modeling framework for analysis of functional clothing. *J. Eng. Fiber and Fabrics*, 2007, Vol. 2, No. 3, pp. 10-27. (rus)
5. **Wu Z., Au C.K., Yuen M.** Mechanical properties of fabric materials for draping simulation. *Int. J. Clothing Sc. Tech.*, 2003, Vol. 15, No. 1, pp. 56-68. (rus)
6. **Berendeyev N.N.** Opisaniye povedeniya tkanogo kompozita pri staticheskom nagruzhenii s ispol'zovaniyem strukturnoy modeli // *Vestnik Nizhegorodskogo universiteta im. N.I. Lobachevskogo*, 2013, No. 4(4), pp. 173-179. (rus)
7. **Belyayev N.M.** *Soprotivleniye materialov*. Moscow, Nauka, 1965. 856 p. (rus)

#### THE AUTHOR

**KOZHANOV Dmitry A.**

*Lobachevsky State university of Nizhni Novgorod*  
23 Gagarina Ave., Nizhni Novgorod, Russia  
pbk996@mail.ru

УДК 623. 983

*А.С. Смирнов, А.Г. Голубев*

ОАО «Концерн «ЦНИИ Электроприбор»»

## **ОПТИМИЗАЦИЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ АМПЛИТУДНО-ЧАСТОТНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫХ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКИХ ГИДРОФОНОВ**

Одним из существенных параметров гидроакустической антенны является ее динамический диапазон, определяемый, в частности, амплитудно-частотной характеристикой (АЧХ) чувствительности гидрофонов. При использовании традиционных пьезокерамических гидрофонов оптимальной является АЧХ чувствительности, обеспечивающая выбеливание спектра шума моря на выходе системы пространственной фильтрации. Особенностью задачи оптимизации АЧХ чувствительности волоконно-оптических гидрофонов является устранение перегрузки тракта в области верхних значений частоты, при этом чем выше частота сигнала, тем при меньшем его уровне возникает перегрузка. Настоящая статья посвящена решению этой проблемы и выработке соответствующих рекомендаций.

ИНТЕРФЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКИЙ ГИДРОФОН, ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ГИДРОФОНА, ДИНАМИЧЕСКИЙ ДИАПАЗОН.

### **Введение**

В течение двух последних десятилетий в качестве перспективного направления проектирования компонентов гидроакустических антенн рассматриваются волоконно-оптические интерферометрические гидрофоны (ВОИГ) [1–3]. Принцип действия ВОИГ основан на том, что падающие на них акустические сигналы изменяют фазу света, распространяющегося в волоконном световоде, который размещен в чувствительном элементе. Флуктуации фазы, порожденные акустическим сигналом, преобразуются в интерферометрической схеме в фазомодулированные (ФМ) колебания интенсивности; последние регистрируются фотодетектором и обрабатываются. Конечной целью является получение сигнала, пропорционального принимаемому акустическому [4].

Как отмечено в статье [5], при использовании таких технологий необходимо пе-

ресмотреть и заново проанализировать систему взаимосвязи параметров элементов конструкции, обрабатываемых сигналов и характеристик гидроакустической антенны. В указанной работе приведена методика расчетов оптимальной (предельно допустимой) чувствительности ВОИГ. Эта методика относилась к версии равномерной амплитудно-частотной характеристики (АЧХ) указанной чувствительности.

В настоящей работе решается задача оптимизации АЧХ ВОИГ. Эта оптимизация нацелена на получение максимального динамического диапазона (ДД) тракта приема сигналов с ВОИГ.

### **Факторы, определяющие динамический диапазон тракта**

Пределы динамического диапазона тракта приема сигналов с ВОИГ задаются возможными уровнями принимаемого сигнала: минимальным и максимальным.

При некотором высоком уровне сигнала наступает перегрузка тракта; она ограничивает сверху рассматриваемый диапазон и определяет значение максимального уровня принимаемых сигналов. Эффект перегрузки в тракте с ВОИГ обусловлен расширением спектра фазомодулированного сигнала при увеличении индекса модуляции. При прочих равных условиях эффект наблюдается тем раньше, чем больше чувствительность гидрофонов. С учетом этого фактора чувствительность необходимо минимизировать.

Снизу динамический диапазон тракта ограничен требованием существенного преобладания минимального уровня принимаемого акустического сигнала над уровнем внутренних шумов, приведенных к его входу. С учетом этого фактора чувствительность необходимо максимизировать.

При работе в условиях неравномерного спектра принимаемого сигнала, а точнее — спада уровня этого спектра с ростом частоты, указанное требование преобладания должно выполняться, прежде всего, на верхних частотах (они наиболее проблемны в этом отношении). Если же учитывать, что спектр внутренних шумов тракта является, как правило, равномерным, то в классической схеме с пьезокерамическими гидрофонами следует считать оптимальной АЧХ чувствительности этих гидрофонов, нарастающую с ростом частоты. При этом скорость нарастания должна обеспечивать выравнивание спектра принимаемого сигнала в точке тракта обработки, соответствующей результату пространственной фильтрации.

Особенность рассматриваемой системы состоит в том, что перегрузка в гидрофоне при прочих равных условиях наступает тем быстрее (т. е. при более низких значениях уровня сигнала), чем выше его частота [5]. Далее мы излагаем решение задачи определения оптимальной АЧХ ВОИГ с учетом указанного обстоятельства.

### Постановка задачи

После анализа факторов, определяющих пределы динамического диапазона тракта приема сигналов с ВОИГ, кратко сформулируем постановку задачи. Имеются отсчеты спектра (здесь и далее под спектром

подразумевается величина корня квадратного из спектральной плотности мощности) принимаемого акустического сигнала при его минимальном уровне  $P_{\text{ак. мин}}(f_i)$ . Рассматриваются две модели АЧХ чувствительности ВОИГ:

$$\gamma(f; \tilde{\gamma}, \nu, f_0) = \begin{cases} \tilde{\gamma} \cdot f^\nu & \text{при } \nu \leq 1 \rightarrow \text{модель 1;} \\ \tilde{\gamma} \exp\{-\nu(f - f_0)^2 10^{-8}\} & \text{при } \nu > 0 \rightarrow \text{модель 2.} \end{cases}$$

Положительным свойством модели 1 является зависимость формы АЧХ (с точностью до частотно-независимого масштаба  $\tilde{\gamma}$ ) всего от одного параметра  $\nu$ . Ее недостатком следует считать ограничение величины этого параметра сверху в силу требования конечности энергии акустического шума после умножения его спектра на обсуждаемую АЧХ. Указанное ограничение мы задаем условием  $\nu \leq 1$ .

Такое ограничение снимается в случае использования АЧХ резонансного типа, примером которой является модель 2. К недостаткам же этой модели относятся, во-первых, необходимость оптимизации двух параметров —  $\nu$  и  $f_0$ , которые определяют форму АЧХ (также с точностью до масштаба  $\tilde{\gamma}$ ), а во-вторых, зависимость результатов решения задачи оптимизации от произвола в выборе аппроксимирующей функции.

### Подход к решению задачи оптимизации АЧХ чувствительности ВОИГ

Решение задачи оптимизации применительно к модели 2 (с квазиганссовой аппроксимирующей функцией), приведенное в настоящей работе, лишь иллюстрирует методику оптимизации. Использование такой методики позволяет решить задачу оптимизации АЧХ с помощью произвольной аппроксимирующей функции, в том числе заданной таблично в произвольных точках на оси частот.

Решение представленной задачи состоит в определении наилучшего сочетания параметров этой модели  $\nu$ ,  $f_0$  и  $\tilde{\gamma}$ , которое бы обеспечивало максимальную верхнюю границу ДД тракта с ВОИГ при фиксированном уровне внутренних шумов тракта,

приведенных к его входу (т. е. при фиксированной нижней границе этого ДД). Выбор критерия оптимальности АЧХ, связанного со своего рода «защитой» нижней границы ДД при обеспечении максимально возможной его верхней границы (как альтернативы критерия минимизации нижней границы ДД при его фиксированной верхней границе) оправдан, в частности, в том случае, если в гидроакустическом комплексе приоритет отдается режиму шумопеленгования малошумных морских объектов.

### Методика расчета оптимальной АЧХ чувствительности ВОИГ

В основе решения поставленной задачи лежит аппарат анализа предельной чувствительности ВОИГ, изложенный в работе [5]. Такой анализ проводится путем расчета совокупности зависимостей

$$K(\gamma_i) = Y(\gamma_i) / \gamma_i,$$

где  $\gamma_i$  – значение чувствительности ВОИГ на частоте  $f_i$ ,  $Y(\gamma_i)$  – уровень (действующее значение) отклика тракта предварительной обработки на сигнал  $S_{ак}(t)$ , представляющий собой суперпозицию  $I$  тональных компонент сигнала при массиве значений  $\gamma(f_i; \tilde{\gamma}, \nu, f_0)$  (т. е. отсчетов АЧХ) чувствительности ВОИГ:

$$S_{ак}(t) = \sqrt{2} \cdot \sum_{i=1}^I \gamma(f_i; \tilde{\gamma}, \nu, f_0) \times \sqrt{\Delta f_i} \cdot \delta \cdot \frac{P_{ак\ min}(f_i)}{P(f_i)} \cdot \sin(2\pi f_i t), \quad (1)$$

где  $f_i$ , Гц – частоты спектральных отсчетов, составляющие геометрическую прогрессию со знаменателем  $\nu$ ;  $\Delta f_i$ , Гц – ширина полосы частот спектральной компоненты, определяемая таким образом, чтобы среднее геометрическое крайних частот этой полосы равнялось  $f_i$ ; а именно определяемая как

$$\Delta f_i = f_i(\sqrt{\nu} - 1 / \sqrt{\nu});$$

$P(f_i)$  – отсчет спектра при уровне сигнала, превышающем по напряжению минимальный в  $\delta$  раз. Другими словами,  $\delta$  – отношение уровня принимаемого акустического сигнала к его минимально возможному уровню.

Выбор входного воздействия (1) при анализе предельной чувствительности гидрофона по широкополосному сигналу продиктован следующими соображениями. Сигнал (1) характеризуется дискретным спектром с некратными частотами; это позволяет проанализировать амплитудную характеристику тракта (она определяет степень его линейности) на разных частотах. При этом гармоники одних частот не мешают анализу амплитудной характеристики тракта на других частотах. Используемые веса тональных составляющих сигнала (1) обеспечивают имитацию реального входного акустического сигнала, причем как в части формы его спектра, так и в части его интегрального уровня. Далее при проведении расчетов принимаем следующие значения входящих в (1) параметров:  $\nu = 1,3$ ;  $I = 22$ ;  $f_1 = 259$  Гц. Массив спектральных отсчетов уровня акустического сигнала  $P_{ак\ min}(f_i)$  принят в соответствии с данными работы [6] для ситуации, когда волнение моря составляет 1 балл. Указанные значения параметров модели достаточны для «представления» сигнала в типичной полосе тракта 0,1 – 8,0 кГц примерно с десятикратным запасом.

Если изменять величину относительного масштаба уровня сигнала  $\delta$  в модели (1) и вычислять на сетке выбранных частот массив соответствующих ему значений отклика  $Y(\gamma_i, \delta)$ , то можно установить предельное значение этого масштаба  $\delta_{max}$ ; при его превышении наступает перегрузка тракта по отношению к спектральной компоненте на частоте  $f_i$ . Представляется оправданным предположение о том, что при появлении перегрузки тракта по указанной причине этот тракт едва ли останется линейным по отношению к спектральным компонентам на иных частотах, даже при сохранении на этих частотах линейности зависимостей  $K(\gamma_i, \delta)$ . Однако даже если это предположение и окажется неверным, то нарушение линейности тракта хотя бы по одной его спектральной компоненте становится достаточным для признания факта, что тракт не является линейным по всему широкополосному сигналу. Следует заметить, что величина динамического диапазона антенны

(приемного тракта) равна  $20\lg(\delta_{\max})$ .

Фиксация нижней границы ДД осуществляется следующим образом. Условие малости уровня его внутреннего шума, приведенного ко входу тракта, по сравнению с минимально возможным уровнем акустического сигнала при всех частотах  $f$ , в пределах рабочего диапазона имеет вид

$$\eta \cdot \sigma_{\text{внш}}(f) / \gamma(f; \tilde{\gamma}, \nu, f_0) \leq P_{\text{ак min}}(f) \cdot \xi^{-1}(f) \cdot M, \quad (2)$$

где  $\eta = 3 - 10$ ;  $\sigma_{\text{внш}}(f)$  – уровень внутреннего шума тракта;  $\xi(f)$ , разы – выигрыш в отношении сигнал/шум по напряжению, имеющий место при пространственной фильтрации на частоте  $f$ ;  $M$  – количество гидрофонов в рабочем пятне антенны.

Следует добавить, что уровень  $\sigma_{\text{внш}}(f)$  от частоты не зависит; здесь и далее аргумент частоты  $f$  при уровнях компонент внутреннего шума приведен лишь для указания на то, что речь идет о спектрах. Что касается произведения  $\xi^{-1}(f) \cdot M$ , то оно учитывает соотношение коэффициентов передачи по амплитуде системы пространственной фильтрации для акустического шума и внутреннего шума тракта на частоте  $f$ . Далее для простоты полагаем это произведение равным единице, что оправдано, например, при приеме на единичный гидрофон. В общем случае антенны оптимизация АЧХ чувствительности гидрофонов осуществляется по разработанной нами методике и учитывает конкретный тип и параметры антенны.

При  $\xi^{-1}(f) \cdot M = 1$  из неравенства (2) следует:

$$\gamma(f; \tilde{\gamma}, \nu, f_0) \geq \eta \cdot \sigma_{\text{внш}}(f) / P_{\text{ак min}}(f). \quad (3)$$

При этом величина уровня внутреннего шума  $\sigma_{\text{внш}}(f)$  может быть определена с помощью известной методики, а именно [7]:

$$\sigma_{\text{внш}}(f) = \sqrt{U_{\text{оп}}^2(f) + U_{\text{кв}}^2(f)}, \quad (4)$$

где  $U_{\text{оп}}(f)$ ,  $U_{\text{кв}}(f)$  – соответственно уровни шумов оптической и цифровой компонент тракта (последняя компонента – шум квантования), определяемые как

$$U_{\text{оп}}(f_i) = (0,5 \cdot f_{\text{опр}})^{-0,5} \cdot q_{\text{фп}}^{-1}, \quad (5)$$

$$U_{\text{кв}}(f_i) = 0,3 \cdot 2^{1,5 - n_k} \cdot (0,5 \cdot f_{\text{опр}} \cdot \zeta)^{-0,5}, \quad (5)$$

где  $f_{\text{опр}}$  – частота опроса ВОИГ;  $q_{\text{фп}}$  – отношение сигнал/шум на выходе фотоприемника оптической части тракта;  $n_k$  – количество корректных разрядов используемого АЦП;  $\zeta$  – количество выборок, выполняемых АЦП на интервале длительности импульса опроса сигнала от одного ВОИГ при их (этих выборок) последующем осреднении.

В итоге оптимальное сочетание параметров  $\nu$ ,  $f_0$  и  $\tilde{\gamma}$ , определяющих АЧХ чувствительности ВОИГ, находится по указанной методике при следующем критерии оптимальности: предельно допустимое значение  $\delta_{\max}$  максимально при значении чувствительности  $\gamma(f; \tilde{\gamma}, \nu, f_0)$ , которое удовлетворяет соотношению (3) и учитывает соотношения (4) и (5).

#### Процедура и результаты расчетов параметров оптимальной АЧХ чувствительности ВОИГ

Для двух моделей, приведенных выше, необходимо определить форму АЧХ, которая бы обеспечивала максимальный динамический диапазон при заданной нижней границе чувствительности.

При проведении расчетов использовались следующие исходные данные:  $\sigma_{\text{внш}} = 15$  мкрад·(Гц)<sup>-1/2</sup>,  $\eta = 3$ , уровень шумов моря принимался при его волнении в 1 балл [6].

Пример графического представления

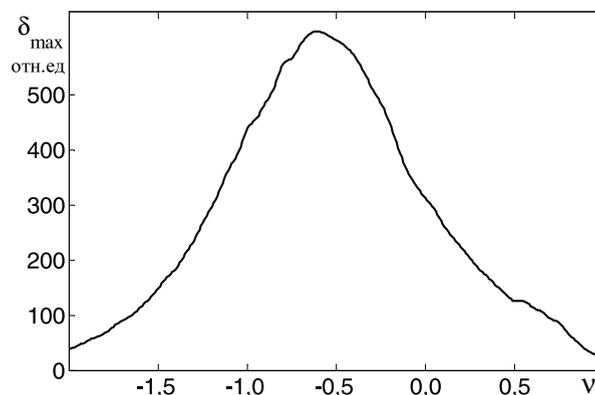


Рис. 1. Зависимость максимального значения  $\delta_{\max}$  от параметра  $\nu$ ; расчет по модели 1

нижней границы чувствительности можно видеть на рис. 2 (приведенные на рис. 2 результаты обсуждаются далее) в виде прямой линии, ограничивающей снизу АЧХ в полосе рабочих частот.

Расчет параметров, определяющих оптимальную форму АЧХ чувствительности, был проведен в два этапа. Первоначально из условия (3) определялся масштабирующий множитель АЧХ  $\tilde{\gamma}(v)$  (либо  $\tilde{\gamma}(v, f_0)$ ). Затем вычислялась зависимость  $\delta_{\max}(v)$  (либо  $\delta_{\max}(v, f_0)$  для модели 2), глобальный максимум которой и определяет оптимальную форму АЧХ.

Как отмечалось выше, определение динамического диапазона  $20\lg(\delta_{\max})$  основано на прямом вычислении уровня сигнала на выходе фазового детектора и сопоставления его уровня с уровнем исходного модулирующего сигнала. При расчетах уровня сигнала на выходе фазового детектора мы использовали алгоритм детектирования фазы и параметры приемного тракта, аналогичные принятым в работе [5].

Результаты расчета по модели 1 зависимости  $\delta_{\max}(v)$  формы АЧХ приведены на рис. 1.

В приведенном на рис. 1 примере результатов расчета по модели 1 оптимальные значения параметров формы АЧХ, соответствующие максимальному динамическому

диапазону размером в 56 дБ, оказались следующими:  $v_{opt} = -0,6$ ;  $\tilde{\gamma}_{opt} = 147$  рад/Па. В этой ситуации переход от рассмотренной в работе [5] модели АЧХ, соответствующей значению параметра  $v = 0$ , к оптимальной АЧХ применительно к ее модели 1 приводит к увеличению динамического диапазона на 6 дБ.

График оптимальной АЧХ чувствительности, рассчитанной по модели 1, приведен на рис. 2 (кривая 1).

Результаты расчета зависимости  $\delta_{\max}(v, f_0)$  по модели 2 приведены на рис. 3. Получено, что оптимальные значения параметров модели АЧХ, соответствующие максимальному динамическому диапазону в 65 дБ, следующие:  $v_{opt} = 4,8$ ;  $f_{0\ opt} = 7$  кГц,  $\tilde{\gamma}_{opt} = 0,7$  рад/Па. Таким образом, в расчетном примере применение модели 2 позволило расширить границы динамического диапазона на 9 дБ, по сравнению с аналогичными результатами, полученными по модели 1.

### Заключение

Проанализированы факторы, определяющие пределы динамического диапазона. На этой основе сформулирована постановка задачи для нахождения оптимальной чувствительности амплитудно-частотной характеристики (АЧХ) гидрофонов с учетом всех обстоятельств.

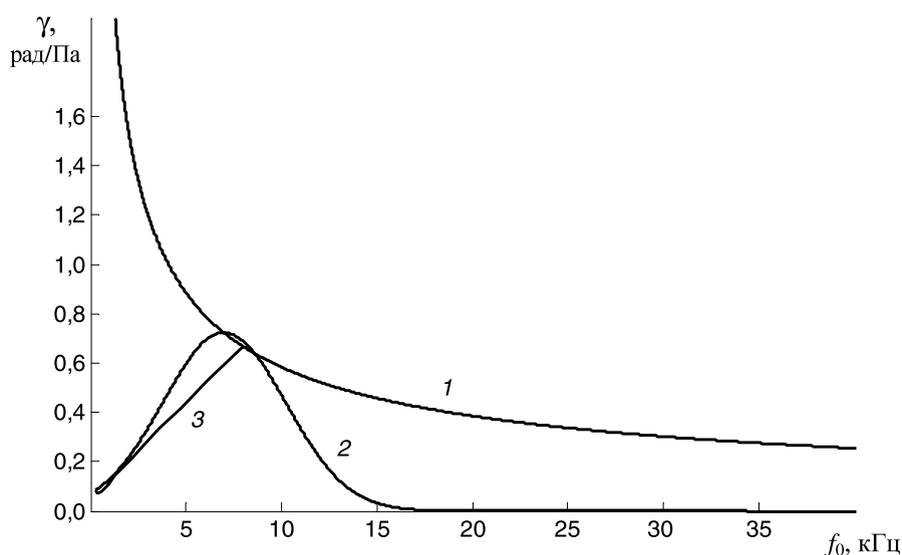


Рис. 2. Результаты расчетов оптимальной АЧХ по моделям 1 (кривая 1) и 2 (кривая 2). Нижняя граница чувствительности показана прямой линией 3

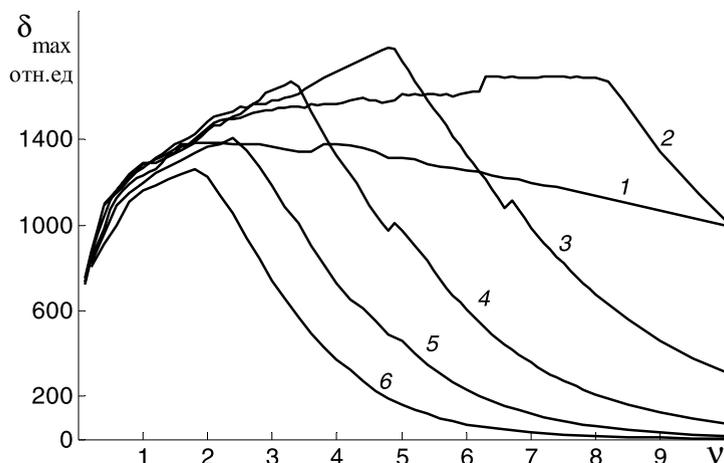


Рис. 3. Расчетные (по модели 2) зависимости максимального уровня принимаемого акустического сигнала  $\delta_{\max}$  от параметра  $\nu$  для различных значений частоты  $f_0$ , кГц: 5 (1), 6 (2), 7 (3), 8 (4), 9 (5), 10 (6)

В связи с решением поставленной задачи рассмотрены две модели АЧХ-чувствительности ВОИГ. С использованием обеих моделей рассчитаны зависимости максимального относительного уровня принимаемого акустического сигнала от параметров формы АЧХ.

Сравнение полученных результатов показало, что применение модели 2 позволяет расширить границы динамического диапа-

зона относительно аналогичных данных, полученных по модели 1.

В итоге предложена методика расчета оптимального параметра АЧХ ВОИГ, позволяющая при прочих равных условиях получить максимальный динамический диапазон приемного тракта гидроакустического комплекса.

Статья подготовлена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 14-08-01006-а.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Волоконно-оптические датчики. Вводный курс для инженеров и научных работников. Под ред. Э. Удда. М.: Техносфера. 2008, 520 с.

2. Shizhuo Y., Ruffin P.B., Yu Francis T.S. Fiber optic sensor. Talor & Francis Group, 2008. 479 p.

3. Kirkendall C.K., Dandridge A. Overview of high performance fiber-optic sensing. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2004. Vol. 37, pp. R197-R216.

4. Люкумович Л.Б. Волоконно-оптические интерферометрические измерения. Ч. 2. Волоконный интерферометрический чувствительный элемент. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2007. 68 с.

5. Голубев А.Г., Смирнов А.С. О расчете

верхней границы чувствительности интерференционных волоконно-оптических гидрофонов приемной гидроакустической антенны // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Информатика. Телекоммуникации. Управление. 2012. Вып. 6 (162). С. 73 – 80.

6. Урик Р.Дж. Основы гидроакустики. Л.: Судостроение, 1978. 445 с.

7. Голубев А.Г., Смирнов А.С. Расчет допустимого уровня шумов приемного тракта в гидроакустическом комплексе, содержащем антенну с волоконно-оптическими гидрофонами // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2014. № 1(189). С. 144–149.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СМИРНОВ Алексей Сергеевич – ведущий инженер ОАО «Концерн ЦНИИ “Электроприбор”». 197046, Россия, г. Санкт-Петербург, Малая Посадская ул., 30 hydroacoustics@mail.ru

ГОЛУБЕВ Анатолий Геннадиевич – доктор технических наук, ведущий научный сотрудник ОАО «Концерн ЦНИИ “Электроприбор”».

197082, Россия, г. Санкт-Петербург, , Малая Посадская ул., 30

agg300@mail.ru

## Smirnov A.S., Golubev A.G. THE OPTIMIZATION OF SENSITIVITY OF FREQUENCY RESPONSE OF INTERFEROMETRIC FIBER-OPTIC HYDROPHONES.

One of the most important parameters of sonar array is its dynamic range determining, in particular, by the frequency response of the hydrophone sensitivity. When using piezoelectric hydrophones the response sensitivity is optimal, providing that the sea noise spectrum at the output of the spatial filtration unit is suppressed. The salient feature of sonar arrays with interferometric fiber-optic hydrophones is a tract overload that occurs at the lower signal level the higher its frequency is. In this paper we have analyzed the factors determining the limits of the dynamic range. The formulation of the problem for finding the optimal frequency response sensitivity of hydrophones was stated. Examples of optimal parameters calculations using two models (monotonically decreasing and resonant ones) for frequency response shape sensitivity were given. When the results obtained were compared it was apparent that taking into account the shape of the frequency response sensitivity allows expanding the dynamic range of sonar array with interferometric fiber-optic hydrophones (in the case being considered the range was 9 db wider).

INTERFEROMETRIC FIBER-OPTIC HYDROPHONE, HYDROPHONE SENSITIVITY, DYNAMIC RANGE.

### REFERENCES

1. *Volokonno-opticheskie datchiki. Vodnyj kurs dlya inzhenerov i nauchnykh rabotnikov*. Pod red. E. Udda. Moscow, Tekhnosfera, 2008, 520 p. (rus)
2. **Shizhuo Y., Ruffin P.B., Yu Francis T.S.** *Fiber Optic Sensor*. Talor & Francis Group, 2008, 479 p.
3. **Kirkendall C.K., Dandridge A.** Overview of high performance fiber-optic sensing. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2004, Vol. 37, pp. R197-R216.
4. **Liokumovich L.B.** *Volokonno-opticheskie interferometricheskie izmereniya. Ch. 2. Volokonnyj interferometricheskij chuvstvitel'nyj element*. St. Petersburg, Izd-vo Politekhnicheskogo Un-ta, 2007. 68 p. (rus)
5. **Golubev A.G., Smirnov A.S.** Calculation of upper limit of sensitivity for interference fiber-optic hydrophone array. *The St. Petersburg Polytechnical University Journal: Computer Science. Telecommunication and Control Systems*, 2012, Iss. 6 (162), pp. 73-80. (rus)
6. **Urik R. Dzh.** *Osnovy gidroakustiki*. Leningrad, Sudostroenie, 1978, 445 p. (rus)
7. **Golubev A.G., Smirnov A.S.** The calculation of a tolerable noise level for the receiving section in the underwater acoustic unit containing an antenna with fiber-optic hydrophones. *The St. Petersburg Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2014, No. 1(189), pp. 144-149. (rus)

### THE AUTHORS

**SMIRNOV Alexei S.**

*Concern CSRI Elektropribor, JSC*

30, Malaya Posadskaya St., St. Petersburg, Russia, 197046.

hydroacoustics@mail.ru

**GOLUBEV Anatoly G.**

*Concern CSRI Elektropribor, JSC*

30, Malaya Posadskaya St., St. Petersburg, Russia, 197046.

agg300@mail.ru

УДК 519.3

*М.Р. Петрченко*

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

## ТИПИЧНЫЕ И НЕТИПИЧНЫЕ ПРЕДЕЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ КРОККО

Традиционная формулировка предельной задачи Крокко предполагает зависимость коэффициента переноса от плотности распределения концентрации. В этом случае предельная задача для уравнения Крокко связана с условием минимума положительного распределения, а само уравнение Крокко равносильно канонической системе двух уравнений. Доказывается возможность погружения потока предельной задачи в поле экстремалей, монотонность и выпуклость потенциала Крокко. В ряде задач распределение коэффициента переноса зависит от плотности потока консервативной примеси, т.е. от градиента плотности распределения концентрации. В этом случае существуют простые решения предельной задачи Крокко с компактным носителем. Иначе, решения сосредоточены на множестве конечной меры.

УРАВНЕНИЕ КРОККО, ПРЕДЕЛЬНАЯ ЗАДАЧА, КАНОНИЧЕСКАЯ СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ, МИНИМУМ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ, ПОЛЕ ЭКСТРЕМАЛЕЙ, ПОТОК.

### Введение

Уравнение Крокко (Луиджи Крокко (L. Crocco), 1909–1986, — выдающийся итальянский ученый) возникает в нелинейной предельной задаче переноса на компакте. Исторически уравнение Крокко впервые появляется в предельной задаче для скоростного поля потока вязкого газа [1, 2]. И до сих пор большинство работ по уравнению Крокко так или иначе связано с динамикой вязкой жидкости. Например, на порталах ВИНТИ РАН и e-library.ru приводятся ссылки примерно на 250 работ, опубликованных в 1990–2014 гг.; приблизительно три четверти из них так или иначе связаны с гидродинамической и прикладной тематикой (см., например, [3, 4–9]). Изучению же собственно предельных задач посвящено относительно небольшое число ключевых работ [5, 10–13].

Существуют явные преимущества предельной задачи Крокко перед другими известными предельными задачами.

Предельная задача для уравнения Крокко возникает в результате простого преобразования предельной задачи параболического типа, например, в задаче о диффузии консервативной примеси на полуограниченном промежутке.

### Постановка задачи

Если  $\theta(\zeta)$  — плотность распределения примеси,  $f(\theta)$  — коэффициент переноса примеси,  $\zeta$  — безразмерная координата, причем

$$\zeta := \frac{x}{2\sqrt{a_0 t}}, \zeta \in (0, \infty),$$

то уравнение переноса имеет вид

$$\frac{d}{d\zeta} \left( f(\theta) \frac{d\theta}{d\zeta} \right) + 2\zeta \frac{d\theta}{d\zeta} = 0. \quad (1)$$

Пусть предельные условия для уравнения (1) имеют вид

$$\theta(0) - 1 = \theta(\infty) = 0. \quad (2)$$

Предельная задача (1), (2) приводится к

виду Крокко подстановкой

$$j := \frac{d\theta}{d\zeta} = j(\theta).$$

Тогда

$$\frac{d}{d\theta}(f(\theta)j) + 2\zeta = 0. \quad (1a)$$

Пусть

$$\varphi := \int_0^\theta \zeta(t)dt = \varphi(\theta)$$

— потенциал Крокко; по определению,  $\varphi(0) = 0$ . Тогда

$$\zeta = \frac{d\varphi}{d\theta}, \quad j = \left( \frac{d^2\varphi}{d\zeta^2} \right)^{-1},$$

и вместо (1a) получается уравнение

$$2\varphi \frac{d^2\varphi}{d\theta^2} + f(\theta) = 0. \quad (3)$$

Предельные условия для уравнения (3) имеют вид

$$\varphi(0) = \left( \frac{d\varphi}{d\theta} \right)_{\theta=1} = 0. \quad (4)$$

Мотивировка такой замены — переход от полубесконечного промежутка к компактному.

Итак, пусть

$$\mathfrak{D}(\varphi) = (0, 1), \varphi \in \mathcal{C}^{(2)}(0, 1), f(\theta) \in \mathcal{L}_1(0, 1)$$

и поставлена предельная задача (3) и (4).

**Лемма 1.** *Предельная задача (3), (4) имеет решение тогда и только тогда, если почти всюду  $f(z) > 0$ .*

*Доказательство.* Действительно, в силу (3), (4) выполняется равенство

$$\int_0^1 \left( \frac{d\varphi}{dz} \right)^2 dz = \frac{1}{2} \int_0^1 f(z) dz > 0.$$

Лемма 1 доказана.

Тогда, если  $f(=) 0$  на интервале  $(0, 1)$ , то  $\varphi = 0$ , что очевидно.

**Лемма 2.** *Уравнение предельной задачи (3), (4) порождено гамильтонианом*

$$\mathfrak{H}(\theta; \varphi, \psi) := \frac{\psi^2}{2} - f(z) \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}.$$

*Доказательство.* Уравнение предельной задачи (3), (4) можно записать в виде

(канонической) системы:

$$\frac{d}{d\theta} \begin{Bmatrix} \varphi \\ \psi \end{Bmatrix} = J \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial \psi} \end{Bmatrix} \mathfrak{H},$$

где  $J$  — симплектическая матрица.

Лемма 2 доказана.

**Лемма 3.** *Пусть  $f$  — положительный гомоморфизм из  $(0, 1)$  в  $(0, 1)$ . Тогда решение предельной задачи (1) — это 2-диффеоморфизм из  $\theta \in (0, 1)$  в  $\varphi \in (0, \varphi(1) = \varphi_0)$ .*

*Доказательство.* В силу леммы 1,  $\varphi$  и  $\varphi''$  имеют противоположные знаки почти всюду на промежутке  $0 < \theta < 1$ .

Пусть  $\varphi > 0$  почти всюду на промежутке  $0 < \theta < 1$ ,  $\varphi(0) = 0$  и  $\varphi'(1) = 0$ . Если в точке  $0 < \theta = \theta_0 < 1$  достигается положительный локальный минимум, то существует окрестность точки  $\theta = \theta_0$ , в которой  $\varphi'' > 0$ , что невозможно. Если же в точке  $\theta = \theta_0$  достигается положительный локальный максимум, то в левой окрестности точки  $\theta = 1$  существует множество значений  $\theta$ , таких, что  $\varphi''(\theta) > 0$ . Снова противоречие.

Следовательно, решения уравнения (1) — суть монотонные распределения, либо монотонно возрастающие ( $\varphi > 0$ ,  $\varphi'' < 0$ ), либо монотонно убывающие ( $\varphi < 0$ ,  $\varphi'' > 0$ ). В данной задаче для положительной вещественной полуоси выполняются неравенства

$$\zeta = \frac{d\varphi}{d\theta} > 0, \varphi(1) > \varphi(0) = 0; \\ \varphi(\theta) > 0, \varphi''(\theta) < 0.$$

Лемма 3 доказана.

### Основная теорема и ее следствия

**Основная теорема.** *Вдоль характеристики (вдоль решения) предельной задачи (1) выполняется следующее условие:*

$$S(\varphi, 1) = \int_0^1 \left( \left( \frac{d\varphi}{dz} \right)^2 + f(z) \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} \right) dz \rightarrow \inf \geq 0. \quad (5)$$

*Доказательство.* Оно очевидно: уравнение Крокко совпадает с необходимым условием минимума распределения  $S(z)$ .

Основная теорема доказана.

**Следствие 1.** Для реализации условия минимума (2) достаточно, чтобы

$$\varphi \in \mathcal{W}^1(0, 1).$$

Происходит ослабление топологии решения до \*-слабой. Косвенным подтверждением этого факта ослабления топологии служит равенство из леммы 1.

**Следствие 2.** В силу леммы 1 справедливо выражение

$$S(\varphi, 1) = \int_0^1 f(z) \left( \frac{1}{2} + \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} \right) dz. \quad (6)$$

Применим к правой части (6) неравенство Коши:

$$S(\varphi, 1) \leq \sqrt{\int_0^1 f^2(z) dz} \cdot \sqrt{\int_0^1 \left( \frac{1}{2} + \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} \right)^2 dz} \quad (7)$$

и ослабим условие минимума (5) до минимума правой части неравенства (7).

Если

$$\sqrt{\int_0^1 f^2(z) dz} \cdot \sqrt{\int_0^1 \left( \frac{1}{2} + \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} \right)^2 dz} \rightarrow \inf \geq 0, \quad (5a)$$

т. е. при ограниченном значении коэффициента переноса (речь идет о  $L_2$ -норме), то величина

$$\sqrt{\int_0^1 \left( \frac{1}{2} + \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} \right)^2 dz} \rightarrow \inf \geq 0,$$

т. е.  $\varphi \rightarrow \sqrt{e}\varphi(1) = \sup$ .

Но величина потенциала Крокко связана с потоком плотности тождеством

$$j(\theta)f(\theta) = -2\varphi(\theta),$$

причем в предельной задаче (3), (4)  $j < 0$ .

Итак, при ограниченном значении коэффициента переноса поток плотности максимален.

Теперь пусть ограничена величина потока плотности, т. е. ограничен второй множитель в правой части условия (5a):

$$\sqrt{\int_0^1 \left( \frac{1}{2} + \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} \right)^2 dz} = O(1).$$

Тогда  $\sqrt{\int_0^1 f^2(z) dz} \rightarrow \inf \geq 0$ .

Следовательно, при ограниченном значении потока плотности концентрации коэффициент переноса минимален.

### Видоизменение предельной задачи Крокко

Пусть существует гомеоморфизм  $f = f(j)$ . Иначе говоря, коэффициент переноса зависит от плотности потока концентрации. Уравнение переноса можно записать следующим образом:

$$\frac{d}{d\theta} (f(j)j) + 2\zeta = 0,$$

и, как видно, уравнение (3) и предельные условия (4) не изменятся. Итак,

$$2\varphi \frac{d^2\varphi}{d\theta^2} + f \left( \frac{1}{\varphi''} \right) = 0. \quad (3a)$$

Предполагается (см. лемму 3), что

$$\varphi'' := \frac{d^2\varphi}{d\theta^2} < 0, \varphi > 0, f(j) = f \left( \frac{1}{\varphi''} \right) > 0.$$

**Пример 1.** Рассмотрим случай степенного отображения  $f(j)$ .

Пусть

$$f \left( \frac{1}{\varphi''} \right) = \frac{(-1)^m}{\varphi''^m}.$$

Тогда в уравнении (3) происходит разделение переменных:

$$\zeta \frac{d\zeta}{d\varphi} = -\frac{1}{(2\varphi)^\alpha},$$

и

$$\zeta = \sqrt{\frac{2^{1-\alpha}}{1-\alpha} \varphi_0^{1-\alpha} \left( 1 - \left( \frac{\varphi}{\varphi_0} \right)^{1-\alpha} \right)}, \quad (8)$$

или

$$\frac{d\bar{\varphi}}{d\theta} = \sqrt{\frac{2^{1-\alpha}}{\varphi_0^{1+\alpha}(1-\alpha)} \left( 1 - \bar{\varphi}^{1-\alpha} \right)} \quad (8a)$$

(здесь  $\alpha = (1 + m)^{-1}$ ).

Пусть  $m \neq 0, \alpha \neq 1$ .

Интегрируем (8a) еще раз:

$$\sqrt{\frac{2^{1-\alpha}}{\varphi_0^{1+\alpha}(1-\alpha)}} \theta = \int_0^{\bar{\varphi}} \frac{dt}{\sqrt{1-t^{1-\alpha}}};$$

$$\sqrt{\frac{2^{1-\alpha}(1-\alpha)}{\varphi_0^{1+\alpha}}} \theta = B \left( \bar{\varphi}^{1-\alpha}, \frac{1}{1-\alpha}, \frac{1}{2} \right),$$

где

$$B(z; a, b) := \int_0^z t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt, 0 < z < 1,$$

– неполная В-функция Барнса [15].

При  $\theta = 1$  получаем следующее равенство:

$$\sqrt{\frac{2^{1-\alpha}(1-\alpha)}{\varphi_0^{1+\alpha}}} = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{1}{1-\alpha}\right)}{\Gamma\left(\frac{3-\alpha}{2(1-\alpha)}\right)}; \tag{9}$$

$$\varphi_0 := \varphi_0(\alpha) = \left( \frac{\Gamma\left(\frac{3-\alpha}{2(1-\alpha)}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-\alpha}\right)} \right)^{\frac{2}{1+\alpha}} \times 2^{\frac{1-\alpha}{1+\alpha}} ((1-\alpha)/\pi)^{\frac{1}{1+\alpha}}.$$

Пусть в (9)  $\alpha \rightarrow +0$  ( $m \rightarrow \infty$ ). Тогда  $\varphi_0(0) = 1/2$ .

Теперь пусть в (9)  $\alpha \rightarrow 1-0$  ( $m \rightarrow 0$ ).

Тогда, используя асимптотическую оценку для  $\Gamma(z)$  (формула Стирлинга), получим:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 1-0} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-\alpha}\right)}{\sqrt{1-\alpha} \Gamma\left(\frac{3-\alpha}{2(1-\alpha)}\right)} = 1,$$

откуда следует, что

$$\varphi_0(1) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}.$$

Получается, что  $\varphi_0(\alpha)$  – медленно изменяющаяся функция параметра  $\alpha$ .

Если в формуле (8а)  $\varphi = 0$ , то

$$\zeta = \zeta_0 = \sqrt{\frac{2^{1-\alpha}}{1-\alpha}} \varphi_0^{1-\alpha}, \tag{10}$$

т. е.  $\zeta_0(\alpha)$  – быстро изменяющаяся функция от  $\alpha$ .

Формулы (9), (10) служат для определения констант

$$\varphi_0(\alpha) := \varphi(1; \alpha) \text{ и } \zeta_0(\alpha) := \zeta(0; \alpha).$$

Результаты вычисления указанных констант приведены в таблице.

В частности, ввиду ограниченности  $\varphi_0$ , распределение  $\theta$  сосредоточено на компакте:

Таблица

Результаты вычисления констант для случая степенного отображения  $f(j)$

$m$	$\alpha$	$\varphi_0(\alpha)$	$\zeta_0(\alpha)$
0	1,0	0,5642	$\infty$
0,4	0,7143	0,5523	1,8946
0,5	0,6(6)	0,5497	1,7596
1,0	0,5000	0,5407	1,4421
2,0	0,3(3)	0,5299	1,2415
3,0	0,2500	0,5315	1,1814
4,0	0,2000	0,5195	1,1352
5,0	0,1(6)	0,5145	1,1085
10	0,0909	0,5136	1,0612
100	0,0091	0,5174	1,0183
$\infty$	0,0	0,5000	1,0000

Обозначения:  $m, \alpha$  – параметры;  $\varphi_0(\alpha)$  – граничное значение потенциала Крокко  $\varphi(1)$ ;  $\zeta_0(\alpha)$  – длина носителя (см. формулы (9), (10)).

$$\text{supp} \theta = (0, \zeta_0).$$

Наличие компактных носителей для распределений – отличительная особенность нелинейных предельных задач. Действительно, линейный случай получается, когда  $\alpha = 1$ . Тогда

$$\zeta \frac{d\zeta}{d\varphi} = -\frac{1}{2\varphi}, \quad \zeta = \sqrt{\ln \frac{\varphi_0}{\varphi}},$$

и, интегрируя еще раз, получим известное решение Рэля:

$$\theta = \sqrt{\pi} \varphi_0 \text{erfc} \left( \sqrt{\ln \frac{\varphi_0}{\varphi}} \right) = \sqrt{\pi} \varphi_0 \text{erfc}(\zeta).$$

Очевидно, решение Рэля не имеет компактного носителя для  $\theta$ -распределения.

**Пример 2.** Рассмотрим случай, когда

$$f(j) = 1 + \frac{\varepsilon}{\varphi''},$$

где  $\varepsilon$  – параметр задачи.

Тогда уравнение переноса Крокко принимает вид

$$2\varphi \varphi''^2 + \varphi'' + \varepsilon = 0, \tag{36}$$

причем предельные условия прежние

(см. формулу (4)). Тогда из уравнения (3б) получается, что

$$\varphi'' = -\frac{1}{4\varphi} \pm \sqrt{\frac{1}{16\varphi'^2} - \frac{\varepsilon}{2\varphi}}. \quad (3в)$$

В уравнении (3в) понижается порядок и переменные разделяются подстановкой  $d\varphi / d\theta = \zeta(\varphi)$ , и тогда

$$\zeta^2 = \left(\frac{d\varphi}{d\theta}\right)^2 = \frac{1}{2} \int_{\varphi}^{\varphi_0} \frac{1 \mp \sqrt{1-8\varepsilon\varphi}}{\varphi} d\varphi.$$

Пусть  $\varepsilon = 0$ . Тогда для согласования этого решения с решением Рэля необходимо взять нижний знак, а значит, при любом значении  $\varepsilon < 1 / (8\varphi_0)$ :

$$\zeta^2 = \frac{1}{2} \ln \frac{\varphi_0}{\varphi} + \frac{1}{2} \left( \ln \frac{1 + \sqrt{1-8\varepsilon\varphi}}{1 - \sqrt{1-8\varepsilon\varphi}} - \ln \frac{1 + \sqrt{1-8\varepsilon\varphi_0}}{1 - \sqrt{1-8\varepsilon\varphi_0}} \right).$$

Следовательно,

$$\theta = \int_0^{\varphi} \left\{ 2 / \left[ \ln \frac{\varphi_0}{\varphi} \cdot \frac{1 + \sqrt{1-8\varepsilon\varphi}}{1 - \sqrt{1-8\varepsilon\varphi}} \times \frac{1 - \sqrt{1-8\varepsilon\varphi_0}}{1 + \sqrt{1-8\varepsilon\varphi_0}} \right] \right\}^{1/2} d\varphi. \quad (11)$$

Формула (11) выражает решение предельной задачи Крокко (3), (4) для «квазилинейного» распределения коэффициента

переноса  $f(j)$ .

Легко видеть, что предположение о виде коэффициента  $f = f(j)$  не изменяет канонической (гамильтоновской) структуры уравнения Крокко. Например, уравнение (3в) равносильно системе

$$\frac{d\varphi}{d\theta} = \zeta = \frac{\partial E}{\partial \zeta};$$

$$\frac{d\zeta}{d\theta} = -\frac{1}{4\varphi} \pm \sqrt{\frac{1}{16\varphi'^2} - \frac{\varepsilon}{2\varphi}} = -\frac{\partial E}{\partial \varphi},$$

с гамильтонианом

$$E(\varphi, \zeta) = \frac{\zeta^2}{2} - \int_{\varphi}^{\varphi_0} \frac{1 \mp \sqrt{1-8\varepsilon\varphi}}{4\varphi} d\varphi.$$

Очевидна каноничность системы в случае степенного отображения  $f(j)$ .

### Выводы

Среди многих достоинств метода Крокко следует выделить три его основных преимущества:

решение предельной задачи Крокко ищется на компакте. Более того, дальнейшими исследованиями будет показано, что решения имеют компактный носитель;

уравнение Крокко равносильно канонической системе с 1-инвариантом;

предельная задача Крокко связана с условием минимума положительной величины (распределения). Это позволяет расширить топологию решения уравнения Крокко до \*-слабой.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гимранов Э.Г. Развитие метода Крокко для решения обобщенных уравнений движения газа в каналах ДЛА и ЭУ // Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета. 2007. Т. 9. № 1. С. 2–9.

2. Полянин А.Д. Преобразования типа Мизеса и Крокко: понижение порядка нелинейных уравнений, RF-пары и преобразования Беклунда // Докл. РАН. 2010. Т. 430. № 2. С. 160–165.

3. Полянин А.Д., Аристов С.Н. Системы уравнений гидродинамического типа: точные решения, преобразования, нелинейная устойчивость // Докл. РАН. 2009. Т. 428. № 2. С. 180–185.

4. Павлов В.Г., Якимов Е.И. Переменные Крокко и уравнения пограничного слоя на поверхности при неравномерном внешнем потоке

// Вестник Казанского гос. техн. ун-та им. А.Н. Туполева. 2004. № 2. С. 30–33.

5. Varin V.P. A solution of the Blasius problem // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2013. № 40. С. 1–21.

6. 05.01-19И.56 подобные решения для задачи ламинарного пограничного слоя в жидкости со степенным законом РЖ 19И // Общие вопросы химической технологии. 2005. № 1.

7. Немова Д.В., Емельянова В.А., Мифтахова Ф.Р. Экстремальные задачи расчета свободноконвективных движений в навесных вентилируемых фасадах // Инженерно-строительный журнал. 2013. № 8 (43). С. 46–53.

8. Животов С.Д., Николаев В.С. Крыло максимального качества в сверхзвуковом потоке на режиме вязко-невязкого взаимодействия //



Ученые записки ЦАГИ. 2002. Т. XXXIII. № 1-2. С. 45–53.

9. Башкин В.А., Диканский Е.А. Решение уравнений Прандтля при нулевом градиенте давления на неизотермической поверхности // Ученые записки ЦАГИ. 2000. Т. XXXI. № 3-4. С. 47–59.

10. Дьяченко В.Ф., Воскобойникова О.И., Демидович В.Б., Кочуров А.С., Силаев Д.А. Численные методы в задачах математической физики и задачах теории аппроксимации. Отчет о НИР № 97-01-01007 (Российский фонд фундаментальных исследований).

11. Баренблатт Г.И. Подobie, автомодельность, промежуточная асимптотика. М.: Гидрометеиздат, 1978, 204 с.; М.: УРСС, 2008, 204 с.

12. Отелбаев М. Существование сильных решений уравнений Навье – Стокса // Математический журнал. 2013. Т. 13. № 4 (50). С. 5 –104.

13. Фаиз А. Применение уравнения Крокко – Ванга для решения уравнения Блазиуса // Техническая акустика. 2007. Т. 7. № 7. Электронный ресурс. Режим доступа: <http://cyberleninka.ru/article/n/primenenie-uravneniya-krokko-vanga-k-resheniyu-zadachi-blasiusa#ixzz38ed1AsyD>.

14. Акилов Г.П., Дятлов В.Н. Основы математического анализа. Новосибирск: Наука, 1980. 336 с.

15. Уиттекер Е.Т., Ватсон Дж.Н. Современный анализ. Ч. 2. М.: Физматгиз, 1963. С. 40–44, 56–57.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

**ПЕТРИЧЕНКО Михаил Романович** – доктор технических наук, заведующий кафедрой гидравлики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
fonpetrich@mail.ru

### *Petritchenko M.R.* TYPICAL AND ATYPICAL BOUNDARY PROBLEMS FOR THE CROCCO EQUATION.

The traditional formulation of the boundary Crocco problem involves the dependence of a transfer coefficient on the density distribution of the concentration. In this case the boundary problem for the Crocco equation is associated with the condition of the minimum for a positive distribution, and the equation itself is equivalent to the canonical system of two equations. The possibility of immersion of flow of boundary problem in the field of extremals, monotony and convexity of the Crocco potential have been proved. In a number of physical problems, the distribution of the transfer coefficient depends on the flux density of conservative tracer, that is, on density gradient of concentration distribution. In this case, there are simple solutions of the boundary Crocco problem with a compact supporter. In other words, the solutions are grouped on a set of the finite measure.

CROCCO EQUATION, BOUNDARY PROBLEM, CANONICAL SYSTEM OF EQUATIONS, DISTRIBUTION MINIMUM, FIELD OF EXTREMALS, STREAM.

#### REFERENCES

1. Gimranov E.G. Razvitie metoda Krokko dlya resheniya obobshchennykh uravnenij dvizheniya gaza v kanalah DLA i EU. *Vestnik Ufimskogo gosudarstvennogo aviatsionnogo tekhnicheskogo universiteta*, 2007, Vol. 9. No. 1, pp. 2-9. (rus)

2. Polyaniin A.D. Preobrazovaniya tipa Mizesa i Krokko: ponizhenie poryadka nelinejnykh uravnenij, RF-pary i preobrazovaniya Beklunda. *Doklady Rossiyskoy Akademii nauk*, 2010, Vol. 430, No. 2, pp. 160-165. (rus)

3. Polyaniin A.D., Aristov S.N. Sistemy uravnenij gidrodinamicheskogo tipa: tochnye resheniya, preobrazovaniya, nelinejnaya ustojchivost'. *Doklady Rossiyskoy Akademii nauk*, 2009, Vol. 428, No. 2, pp. 180-185. (rus)

4. Pavlov V.G., Yakimov E.I. Peremennye

Krokko i uravneniya pogranichnogo sloya na poverkhnosti pri neravnomernom vneshnem potoke. *Vestnik Kazanskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta im. A.N. Tupoleva*, 2004, No. 2, pp. 30-33. (rus)

5. Varin V.P. A solution of the Blasius problem. *Preprinty IPM im. M.V. Keldysha*, 2013, No. 40, pp. 1-21. (rus)

6. 05.01-19I.56 podobnye resheniya dlya zadachi laminarnogo pogranichnogo sloya v zhidkosti so stepennym zakonom RZh 19I. *Obshchie voprosy khimicheskoy tekhnologii*, 2005, No. 1. (rus)

7. Nemova D.V., Emel'yanova V.A., Miftakhova F.R. Ekstremal'nye zadachi rascheta svobodnokonvektivnykh dvizhenij v navesnykh ventiliruemykh fasadakh. *Inzhenerno-stroitel'nyj*

*zhurnal*, 2013, No. 8 (43), pp. 46-53. (rus)

8. **Zhivotov S.D., Nikolaev V.S.** Krylo maksimal'nogo kachestva v sverkhzvukovom potoke na rezhime vyazko-nevyazkogo vzaimodejstviya. *Uchenye zapiski TsAGI*, 2002, Vol. 23, No. 1-2, pp. 45-53. (rus)

9. **Bashkin V.A., Dikanskij E.A.** Reshenie uravnenij Prandtlya pri nulevom gradiente davleniya na neizotermicheskoj poverkhnosti. *Uchenye zapiski TsAGI*, 2000, Vol. 31, No. 3-4, pp. 47-59. (rus)

10. **D'yachenko V.F., Voskoboynikova O.I., Demidovich V.B., Kochurov A.S., Silaev D.A.** Chislennye metody v zadachakh matematicheskoy fiziki i zadachakh teorii approksimatsii. Otchet o NIR № 97-01-01007 (Rossijskij fond fundamental'nykh issledovanij). (rus)

11. **Barenblatt G.I.** *Podobie, avtomodel'nost'*,

*promezhutochnaya asimptotika*. Moscow, Gidrometeoizdat, 1978. 204 p. (rus)

12. **Otelbaev M.** Sushchestvovanie sil'nykh reshenij uravnenij Nav'e-Stoksa. *Matematicheskij zhurnal*, 2013, Vol. 13, No. 4 (50), pp. 5-104. (rus)

13. **Faiz A.** Primenenie uravneniya Krokko-Vanga dlya resheniya uravneniya Blaziusa. *Tekhnicheskaya akustika*, 2007, Vol. 7, No. 7. Available at: <http://cyberleninka.ru/article/n/primenenie-uravneniya-krokko-vanga-k-resheniyu-zadachi-blaziusa#ixzz38ed1AsyD>. (rus)

14. **Akilov G.P., Dyatlov V.N.** *Osnovy matematicheskogo analiza*. Novosibirsk: Nauka, 1980. 336 p. (rus)

15. **Uitteker E.T., Watson Dzh.N.** *Sovremennyy analiz, Ch.2*. Moscow, Fizmatgiz, 1963, pp. 40-44, 56-57. (rus)

#### THE AUTHOR

**PETRITCHENKO Mikhail R.**

*St. Petersburg State Polytechnical University*

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

fonpetrich@mail.ru



# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

УДК 533.5

*И.А. Халидов*

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

## ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА С ШЕРОХОВАТОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ С ПОЗИЦИЙ ПОЛИГАУССОВСКОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

На базе полигауссовской модели исследованы свойства случайной шероховатой поверхности в потоке разреженного газа; указанные свойства непосредственно связаны с аэродинамическими характеристиками поверхности. В работе предлагается представлять распределение вероятностей аппликат шероховатости в виде смеси нормальных распределений. Благодаря этому удалось вывести аналитические выражения факториальных моментов числа выходов имитирующего шероховатость случайного поля за определенный уровень траектории частицы газа. Эти аналитические выражения играют ключевую роль при нахождении функции рассеяния атомов газа на поверхности и коэффициентов обмена импульсом и энергией. Рассмотрен также важный частный случай полигауссовских процессов – сферически симметричные случайные процессы, для которых условия удается записать в более простом виде. Для характеристик выбросов за высокий уровень найдены асимптотические оценки, отвечающие случаю слабошероховатой поверхности. Полученные результаты позволяют оценить влияние шероховатости поверхности на характер течения вблизи нее газа; проведено сопоставление с гауссовской моделью шероховатости.

ТЕЧЕНИЕ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ГАЗА С ПОВЕРХНОСТЬЮ, ПОЛИГАУССОВСКАЯ МОДЕЛЬ ШЕРОХОВАТОСТИ.

### Введение

Любая реальная поверхность для падающей на нее частицы газа является неровной, шероховатой, и это ее свойство – один из важнейших факторов, определяющих закон взаимодействия потока разреженного газа с твердой поверхностью. Математическое моделирование шероховатости поверхности широко применяется в связи с разнообразными приложениями, например, в задачах трения, разрушения, обработки материалов и т. п. Этой теме посвящены целые монографии, например, теоретико-вероятностные модели шероховатости описаны в книге [1]. Однако описание шероховатости при ее взаимодействии с течениями разреженного газа отличается специфическими особенностями, отмечен-

ными наиболее полно в монографии [2]. Наиболее существенное отличие состоит в изменении ключевого параметра шероховатости: вместо дисперсии отклонений шероховатости от среднего уровня берется дисперсия тангенса угла наклона относительно этого уровня [3]. В первом случае дисперсия характеризует амплитуду, т. е. размах моделирующего шероховатость случайного поля  $z(x, y)$ , а во втором – наклон шероховатости относительно среднего уровня, определяемый производной  $\partial z / \partial x$  или  $\partial z / \partial y$ .

Впервые построением моделей взаимодействия частиц газа с поверхностью, которые учитывали ее шероховатость, занимались исследователи в лаборатории аэродинамики Санкт-Петербургского госу-

дарственного университета. В дальнейшем их результаты были многократно уточнены, модернизированы и обобщены в работах Р.Н. Мирошина и его учеников [2 – 9].

Форма шероховатой поверхности во всех этих (и связанных с ними) исследованиях моделируется однородным изотропным гауссовским случайным полем [2].

Среди множества достоинств данной модели следует выделить три наиболее кардинальных преимущества:

дифференцируемость реализаций гауссовского поля обеспечивает существование локальной нормали к элементарной площадке; этого свойства лишены многие другие применяемые модели, описанные в литературе, типа набора плоских элементов [10] или же конусообразных углублений [11];

полная свобода выбора корреляционной функции процесса позволяет моделировать широкие классы реальных поверхностей, получаемых при любых способах обработки;

возможность аналитического представления вероятностных характеристик числа пересечений наклонного уровня с помощью реализаций случайного поля – таких, как вероятность отсутствия пересечений и факториальные моменты их числа.

Но все же гауссовская модель применима не всегда. Например, в работе [12] на базе экспериментальных данных приводится обоснование для предпочтения более общей полигауссовской модели шероховатости. В частности, авторы приводят свидетельства негауссовости рельефов из различных источников в литературе и подчеркивают [12]: «Негауссовской статистикой обладают шероховатости со смешанной структурой, образующиеся в результате нескольких последовательных стадий обработки поверхности (при прессовании, притирке, хонинговании) для поверхностей деталей, подвергшихся износу и приработке в процессе эксплуатации и т. д. Другой причиной негауссовости рельефов является наличие в структуре поверхности детерминированной, часто периодической составляющей, что характерно, в частности, для обработки точением, фрезерованием, обкатыванием, электрополированием».

### Постановка задачи

В настоящей работе некоторые результаты, полученные для гауссовских процессов и полей и относящиеся к свойствам процессов и их выходов за некоторый уровень, распространяются на более общий случай полигауссовских процессов с возможностью приложений к задаче о рассеянии атомов разреженного газа на шероховатой поверхности. Без ограничения общности рассматривается не вся трехмерная поверхность, т. е. не полная реализация случайного поля, а лишь ее профиль – реализация только случайного процесса, представляющего собой проекцию поля на плоскость, проходящую через траекторию движения частицы газа и локальную нормаль к поверхности. Тем самым достигается возможность моделировать не случайное поле, а более простой случайный процесс. Такое предположение допустимо, если учесть, что в аэродинамические характеристики в первую очередь входит вероятность отсутствия выбросов случайного поля за наклонный уровень – за траекторию падающей на поверхность частицы газа.

В этих условиях, чтобы сохранить возможность успешного применения модели в прикладных задачах, необходимо наложить два важнейших ограничения на модель случайного процесса:

параметры модели должны быть связаны достаточно простыми аналитическими выражениями с основными статистическими характеристиками процесса, например, с его первыми и вторыми моментами. Данное ограничение необходимо для выработки эффективных методов численного подбора параметров модели с целью аппроксимации характеристик шероховатости, которые получают путем обработки измерений профилограмм. В частности, выполнение этого требования необходимо при сопоставлении результатов численных расчетов с экспериментальными данными;

самой модели должен отвечать простой и эффективный алгоритм численной имитации реализаций процессов и полей, позволяющий использовать модель для расчета средних значений функционалов случай-

ной поверхности при помощи усреднения (методом Монте-Карло) по большому количеству имитированных реализаций.

С этой точки зрения наиболее удобным способом аппроксимации случайных процессов представляется использование смесей вероятностных распределений. Такой путь приводит нас к полигауссовской модели, которая позволяет сколь угодно точно приближать почти любой случайный процесс [13]. Плотность распределения таких процессов в  $n$  точках  $x_1, \dots, x_n$ , отвечающих моментам времени  $t_1, \dots, t_n$ , определяется формулой

$$P_{t_1, \dots, t_n}(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{|R_n(v)|}} \times \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \sigma(v))R_n^{-1}(v)(\mathbf{x} - \sigma(v))^T\right\} dF(v), \quad (1)$$

где  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$  – набор заданных точек;  $\sigma(v)$  и  $R_n(v)$  – векторное математическое ожидание и корреляционная матрица значений процесса в заданных точках;  $|R_n(v)|$  – определитель корреляционной матрицы.

От неубывающей на промежутке  $[0; \infty)$  весовой функции  $F(v)$  в формуле (1) требуется лишь сходимость интеграла – независимо от того, непрерывная это функция (имеет плотность) или же дискретная (ступенчатая).

Алгоритм численного моделирования реализаций полигауссовских процессов, базирующийся на преобразовании гауссовских распределений, описан в работе [12], ориентированной на приложения в таких областях, как рассеяние света на шероховатой поверхности, выращивание тонких пленок в микроэлектронике, диагностика поверхности методами электронной спектроскопии и контактные явления, включая трение и износ изделий в машиностроении. В упомянутой работе показана возможность достаточно точной аппроксимации реальных микрорельефов, полученных в ряде технологических процессов. В частности, моделируются распределения высот шероховатости, которые образуются как при ионной бомбардировке образца стали марки СТ20 атомами азота и аргона, так и при

химическом травлении стали спиртовым раствором азотной кислоты по специальной методике. Последняя применяется при стандартном металлографическом исследовании структуры сталей, а также при различных методах их обработки. Учитывая, что аналогичные технологии применяются и при обработке поверхностей летательных аппаратов, движущихся в верхних слоях атмосферы, уделим основное внимание свойствам полигауссовских процессов, влияющим на моделирование рассеяния атомов разреженного газа на шероховатой поверхности. Наибольший интерес в этом плане представляют так называемые сферически симметричные процессы, представляющие собой важный частный случай полигауссовских [14].

С одной стороны, эти процессы составляют достаточно общий класс, дающий возможность аппроксимировать разнообразные реальные профили шероховатости. С другой стороны, многие характеристики сферически симметричных процессов (требуются, прежде всего, в рассматриваемых нами задачах) могут вычисляться через соответствующие величины для гауссовских процессов, которые можно считать в достаточной мере изученными [2, 9].

### Свойства полигауссовских и сферически симметричных процессов

Случайный процесс называют сферически симметричным порядка  $n$ , если характеристические функции размерности  $n$  зависят только от нормы вектора  $\xi$  аргумента (норма задается корреляционной матрицей  $R_n$  процесса):

$$Ee^{i\xi x} = \varphi(\xi_1, \dots, \xi_n) = \varphi_1(\xi R_n \xi^T), \quad (2)$$

где  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)$  – вектор аргумента  $n$ -мерной характеристической функции, которая отвечает значениям  $x_1, \dots, x_n$  процесса в точках  $t_1, \dots, t_n$ ;  $\xi^T$  – транспонированный вектор;  $E$  – символ математического ожидания.

Корреляционная матрица  $R_n$  положительно определена, поэтому квадратичную форму  $\xi R_n \xi^T$  в аргументе в правой части равенства (2) можно интерпретировать как квадрат  $r^2$  нормы вектора  $\xi$ .

Принимая во внимание условие согласованности Колмогорова, которое для характеристических функций при  $m < n$  записывается в виде

$$\varphi(\xi_1, \dots, \xi_n) = \varphi(\xi_1, \dots, \xi_m, 0, \dots, 0)$$

(здесь число нулей равно  $m - n$ ), видим, что соотношение (2) справедливо и для всех характеристических функций меньших размерностей  $m < n$ , причем функция  $\varphi_1(r)$  остается той же самой. Из соотношения (2) нетрудно вывести, что сферически симметричные процессы – частный случай полигауссовских. Связь между функцией одной переменной  $\varphi_1(r)$ , задающей  $n$ -мерное распределение, и весовой функцией  $F(v)$ , определяющей полигауссовское распределение (1), записывается в форме

$$\varphi_1(r) = \Gamma\left(\frac{n}{2}\right) \int_0^\infty \left(\frac{2}{rv}\right)^{\frac{n}{2}-1} J_{\frac{n}{2}-1}(rv) dF(v), \quad (3)$$

где  $J_k(rv)$  – функция Бесселя первого рода.

Произвольность весовой функции  $F(v)$  в выражении (3) делает класс сферически симметричных процессов почти настолько же общим при моделировании реальных профилей, что и множество полигауссовских процессов.

Однако ряд свойств сферически симметричных процессов показывает их большее сходство с гауссовскими. В числе этих свойств необходимо отметить следующие.

1. Сферически симметричные процессы имеют линейную регрессию [14].

2. Эргодический сферически симметричный процесс непременно имеет нормальное распределение, т. е. весовая функция  $F(v)$  для этого процесса представляет собой единичную ступеньку.

3. Понятия широкой и узкой стационарности эквивалентны для класса сферически симметричных процессов и исключительно лишь для этого класса процессов.

4. Момент любого порядка сферически симметричного процесса  $\zeta(t)$  выражается в виде произведения аналогичного момента гауссовского процесса (с той же корреляционной матрицей) на однократный интеграл с той же весовой функцией:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\zeta^{\alpha_1}(t_1) \cdot \dots \cdot \zeta^{\alpha_k}(t_k)) &= \\ &= \mathbf{E}(\eta^{\alpha_1}(t_1) \cdot \dots \cdot \eta^{\alpha_k}(t_k)) \int_0^\infty v^{\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_k} dF(v). \end{aligned} \quad (4)$$

5. Марковский сферически симметричный процесс – всегда гауссовский.

Данное утверждение вытекает из определения марковского процесса в терминах условных плотностей. Действительно, подставляя в это определение выражения для плотностей (1) и представляя условные плотности через безусловные, приходим путем логарифмирования и дифференцирования по первой компоненте  $x_1$  к равенству вида

$$\begin{aligned} \int_0^\infty v^{-5} \exp\left\{-\frac{y}{2v^2}\right\} dF(v) &= \\ &= K \int_0^\infty v^{-3} \exp\left\{-\frac{y}{2v^2}\right\} dF(v), \end{aligned} \quad (5)$$

где  $K$  – постоянная величина.

Равенство (5) с помощью замены  $w = v^{-2}$  можно привести к соотношению, которое допускает трактовку в виде обращения в нуль преобразования Лапласа от функции

$$(w - K)F'(w^{-1/2}).$$

Данное соотношение может быть реализовано только в том случае, если весовая функция – ступенька, т. е. если процесс гауссовский.

Хотя приведенные пять свойств и не могут быть распространены на весь класс полигауссовских процессов, но все же важные для исследования взаимодействия частиц газа с поверхностью (в частности, для построения локальной нормали к малой площадке на поверхности) свойства гладкости остаются верными и для любых полигауссовских процессов. При этом их доказательство аналогично доказательству для гауссовских процессов.

Эти свойства гладкости можно сформулировать следующим образом.

6. Существует процесс, эквивалентный полигауссовскому процессу  $\zeta(t)$ , выборочные функции которого имеют непрерывные производные с вероятностью единица, при условии, что асимптотическое поведе-

ние корреляционной функции  $r(h)$  процесса  $\zeta(t)$  в окрестности нуля (т. е. при  $h \rightarrow 0$ ) задано соотношением

$$r(h) = 1 - \frac{\lambda_2 h^2}{2} + O(|h|^{2+a}), \quad (6)$$

где константа  $a$  лежит в промежутке  $(0; 2]$ , а  $\lambda_2$  — конечный второй спектральный момент.

При этом дополнительно требуется, чтобы для некоторого положительного  $\delta > 0$  был конечен интеграл

$$\int_0^\infty v^{\frac{2}{a} + \delta} dF(v) < \infty. \quad (7)$$

7. Если асимптотическое поведение корреляционной функции  $r(h)$  полигауссовского процесса  $\zeta(t)$  в окрестности нуля ( $h \rightarrow 0$ ) задано соотношением

$$r(h) = 1 - O(|h|^{2\alpha+a}) \quad (8)$$

(где  $a \in (0; 2]$  и  $\alpha > 0$  — константы), причем для некоторого положительного  $\delta > 0$  конечен интеграл (7), то существует процесс, эквивалентный процессу  $\zeta(t)$ , выборочные функции которого с вероятностью единица удовлетворяют условию Липшица порядка  $\alpha$ :

$$|\zeta(t+h) - \zeta(t)| < C |h|^\alpha.$$

Из формулировок утверждений 6 и 7 можно убрать ограничения на корреляционную функцию  $r(h)$  полигауссовского процесса, поскольку они не являются необходимыми для доказательства. Однако расширение класса корреляционных функций одновременно весьма существенно усложнит ограничение на весовую функцию  $F(v)$ . Это условие примет вид

$$\int_0^\infty \frac{v\sigma(x^{-1})}{\mu(x^{-1})} \exp\left(-\frac{\mu^2(x^{-1})}{4v^2\sigma^2(x^{-1})}\right) dF(v) < \infty, \quad (9)$$

где  $\mu(h) = |h|^\beta$  для некоторого  $\beta > 0$  при  $a \in (0; 2]$ ;  $\mu(h) = |\ln |h||^{-\alpha}$  для некоторого  $\alpha > 1$  при  $a = 2$ ; вид функции  $\sigma(h)$  зависит от того, какое из свойств (6 или 7) рассматривается.

Для свойства дифференцируемости указанная функция имеет вид

$$\sigma^2(h) = 6 + 2r(2h) - 8r(h),$$

а для условия Липшица —

$$\sigma^2(h) = (1 - r(h)) |h|^{-2\alpha}.$$

Таким образом, упростить ограничение (9) можно лишь в том случае, если есть возможность вычислить асимптотику подынтегральной функции в условии (9) при  $v \rightarrow \infty$ .

### Число пересечений уровня

При решении проблемы рассеяния атомов газа на поверхности основной интерес представляет число  $A_u[0; T]$  — количество выходов реализаций случайного процесса или поля за некоторый уровень  $u$  на отрезке  $[0; T]$ . Атомами мы называем здесь все частицы газа, независимо от наличия у них внутренней структуры, так как структура учитывается локальной функцией рассеяния, которая считается заданной. Другими словами, рассмотрение структуры молекул не входит в наш круг задач.

Вообще говоря, высота уровня  $u$  должна зависеть от положения точки вдоль оси абсцисс, поскольку уровень по сути задает форму траектории движения атома газа (см. рисунок).

Хотя в режиме, близком к свободномолекулярному потоку, эту траекторию можно считать состоящей из прямолинейных отрезков, но она везде остается наклонной по отношению к плоскости среднего уровня шероховатости. Для упрощения расчетов угол наклона нередко предполагается малым, поэтому начнем с модельной задачи постоянного уровня, которая наиболее полно изучена для гауссовских процессов и полей.

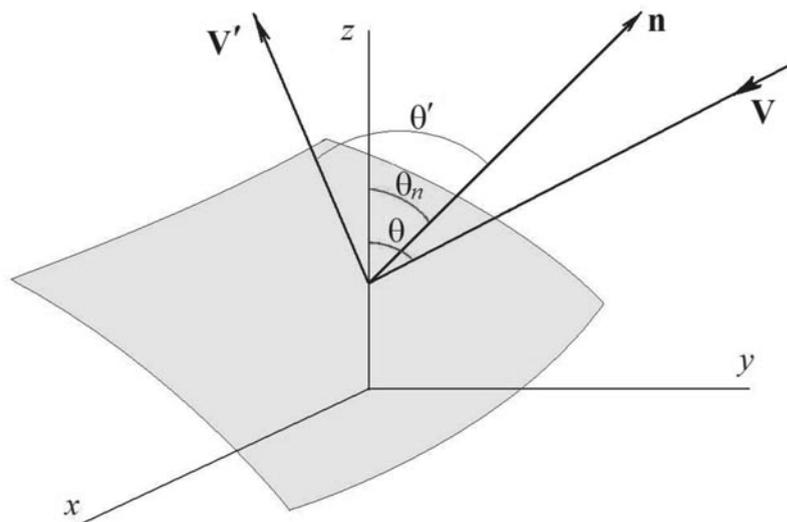
Аэродинамические свойства шероховатой поверхности, обтекаемой разреженным газом, определяются через вероятность отсутствия выбросов за уровень

$$P(A_u[0; T] = 0),$$

или же через факториальные моменты числа выходов

$$N_k(T) = \mathbf{E}(A_u(A_u - 1) \dots (A_u - k + 1)).$$

При этом вероятностные характеристики (в частности, факториальные моменты) случайной величины  $A_u[0; T]$  выражаются в виде многократных интегралов от совмест-



Рассеяние атомов газа на малой площадке шероховатой поверхности с локальной нормалью  $\mathbf{n}$ ;  $\mathbf{V}$ ,  $\mathbf{V}'$  – векторы скорости падающих и вылетающих атомов

ной плотности распределения случайного процесса и его производных в нескольких точках

$$p_{t_1, \dots, t_k}(u_1, \dots, u_k, y_1, \dots, y_k),$$

где  $u_1, \dots, u_k$  – значения случайного процесса;  $y_1, \dots, y_k$  – значения его производных в несовпадающих точках  $t_1, \dots, t_k$ .

Для сферически симметричного процесса совместную плотность распределения процесса и его производных

$$p_{t_1, \dots, t_k}(u_1, \dots, u_k, y_1, \dots, y_k)$$

удается выразить через аналогичную совместную плотность распределения гауссовского процесса и его производных:

$$p_{t_1, \dots, t_n}(u_1, \dots, u_n, y_1, \dots, y_n) = \int_0^\infty g_{t_1, \dots, t_n}^{v^2 r}(u_1, \dots, u_n, y_1, \dots, y_n) dF(v), \quad (10)$$

где  $g_{t_1, \dots, t_n}^{v^2 r}(u_1, \dots, u_n, y_1, \dots, y_n)$  – плотность распределения гауссовского процесса с корреляционной функцией  $v^2 r(h)$  и его производных в несовпадающих точках  $t_1, \dots, t_k$ .

На корреляционную функцию  $r(h)$  при выводе формулы (10) налагается требование: спектр процесса должен содержать непрерывную компоненту.

Доказательство формулы (10) довольно

громоздко, поэтому полностью приводить его не будем, ограничимся лишь кратким изложением его сути. Плотность распределения процесса и его производных в  $k$  точках представляется в виде предела плотности распределения процесса в  $2k$  точках при стремлении к нулю  $k$  приращений по времени значений  $t_1, \dots, t_k$ . Последняя плотность для любого полигауссовского процесса выражается в виде смеси (1) гауссовских распределений. Основную трудность составляет обоснование предельного перехода при стремлении к нулю  $k$  приращений по времени. При наличии непрерывной компоненты в спектре для сферически симметричного процесса обоснование предельного перехода базируется на теореме Лебега и может быть проведено для любой весовой функции  $F(v)$ . Заметим, что доказательство может быть обобщено и на случай произвольных полигауссовских процессов, однако требуются ограничения как на корреляционную функцию  $r(t)$ , так и на весовую функцию  $F(v)$ .

Представление (10) плотности распределения процесса и его производных дает возможность получить выражение для факториальных моментов  $N_k(T, u)$  числа  $A_u[0; T]$  выходов реализаций случайного процесса за уровень  $u$  на отрезке  $[0; T]$ .

Для этого необходимо подставить формулу (10) в выражения факториальных моментов  $N_k(T, u)$  в виде многократных интегралов от совместной плотности распределения случайного процесса и его производных [2], после чего поменять порядок интегрирования. Оценки, обосновывающие законность изменения порядка интегрирования, также достаточно громоздки, поэтому приводить их здесь нецелесообразно. Отметим, что при этом не возникает ограничений в дополнение к тем, которые требовались при выводе соотношения (10).

В результате получаем:

$$N_k(u) = \int_0^\infty N_k^r\left(T, \frac{u}{v}\right) dF(v), \quad (11)$$

где  $N_k^r(T, u/v)$  – факториальные моменты числа выходов реализаций гауссовского случайного процесса с корреляционной функцией  $r(t)$  за уровень  $u/v$  на отрезке  $[0; T]$ .

Представления характеристик полигауссовских и сферически симметричных процессов через соответствующие величины для гауссовских процессов, аналогичные представлению (11), имеют место и для обычных степенных (не факториальных) моментов числа выходов за уровень, так как обычные моменты можно выразить в виде линейной комбинации факториальных моментов.

Кроме того, из выражения (11) вытекает, что распределение числа нулей полигауссовских и сферически симметричных процессов в точности совпадает с распределением числа нулей гауссовских процессов, так как при  $u = 0$  факториальные моменты  $N_k^r(T, u/v)$  перестают зависеть от переменной  $v$  и могут быть вынесены из-под знака интеграла в формуле (11).

Еще одно следствие формулы (11) – выражение для среднего числа  $E(A_u[0; T])$  выбросов рассматриваемых процессов за определенный уровень:

$$\mu = E(A_u[0; T]) = \frac{\sqrt{\lambda_2}}{2\pi} \int_0^\infty e^{-\frac{u^2}{2v^2}} dF(v), \quad (12)$$

которое получается из формулы для среднего числа выбросов гауссовского процесса.

### Асимптотика для пересечений высокого уровня

Распределение числа выбросов за высокий уровень важно для практических приложений, в частности, для решения задачи о рассеянии на шероховатой поверхности, поскольку в силу свойств подобия повышение уровня равносильно пропорциональному снижению среднего квадратического отклонения случайного процесса, моделирующего шероховатость. Иными словами, асимптотика выбросов за высокий уровень отвечает асимптотике на слабо шероховатой поверхности.

Обоснование предельного перехода при стремлении уровня  $u$  к бесконечности требует громоздких оценок при установлении равномерной сходимости. Поэтому приведем лишь итоговые результаты.

Пусть для весовой функции конечен интеграл (7), а корреляционная функция  $r(t)$  удовлетворяет асимптотическим условиям в нуле и на бесконечности:

$$r(t) = 1 - \frac{\lambda_2 t^2}{2} + O(|t|^{2+a}), \quad t \rightarrow 0, \quad (13)$$

$$r(t) = o(\ln^{-1}(t)), \quad t \rightarrow \infty. \quad (14)$$

Пусть высота уровня возрастает, т. е.  $u \rightarrow \infty$  при согласованном увеличении длины отрезка:

$$T = \frac{2\pi\mu}{\sqrt{\lambda_2} f_1(u^2)}, \quad (15)$$

где функция  $f_1$  определена в формуле (15) соотношением

$$f_1(u^2) = \int_0^\infty e^{-\frac{u^2}{2v^2}} dF(v). \quad (16)$$

Тогда для факториальных моментов числа  $A_u[0; T]$  выходов реализаций случайного процесса за высокий уровень ( $u \rightarrow \infty$ ) на отрезке  $[0; T]$  при согласованном увеличении длины отрезка имеет место следующая альтернатива:

либо полигауссовский процесс имеет в смеси гауссовскую компоненту с максимальным значением  $v$ , иными словами, весовая функция  $F(v)$  имеет скачок на правом конце. Это означает, что функция тождественно равна единице, начиная с некото-

рого значения аргумента, а предел слева – меньше единицы. В формульном выражении это имеет вид

$$\begin{cases} F(v)=1 \text{ при } v > v_0; \\ \lim_{v \rightarrow v_0-0} F(v) = 1 - c_1, c_1 > 0. \end{cases} \quad (17)$$

При этом все моменты сходятся к конечным значениям (постоянная  $\mu$  здесь определяется формулой (12)), т. е.

$$\lim_{u \rightarrow \infty} N_k(T, u) = \frac{\mu^k}{c_1^{k-1}}, \quad k = 1, 2, \dots; \quad (18)$$

либо все факториальные моменты, начиная со второго, стремятся к бесконечности в соответствии с выражением (11), т. е. каждый следующий момент стремится к бесконечности быстрее предыдущего.

Таким образом, асимптотика моментов числа выбросов за высокий уровень наминает соответствующую асимптотику для гауссовского процесса только при наличии в смеси  $F(v)$  гауссовской компоненты с максимальным значением  $v_0$ . Во всех остальных случаях асимптотика моментов существенно другая, т. е. и все характеристики числа выбросов полигауссовских процессов должны заметно отличаться от гауссовских.

#### Решение проблемы рассеяния атомов газа на шероховатой поверхности

Полученные выше результаты имеют два аспекта, которые позволяют учесть влияние шероховатости на аэродинамические характеристики поверхности в потоке разреженного газа.

С одной стороны (первый аспект), является возможность вывести асимптотические формулы, которые бы описывали данное влияние на слабошероховатой поверхности. Однако здесь следует иметь в виду, что уже для гауссовских процессов такие асимптотические формулы достаточно громоздки и содержат континуальные интегралы. Последние представляют собой интегралы по множеству реализаций случайного процесса (или случайного поля) и при своем вычислении требуют аппроксимации интегралами очень высокой кратности. Кроме того, реальные поверхности

всегда обладают микрошероховатостью (даже при самой лучшей обработке), которую уже нельзя считать слабой. Поэтому асимптотические исследования не получили широкого распространения.

Главный практический вывод, который можно сделать из полученной альтернативы (см. формулы (17), (18)), состоит в том, что влияние шероховатости для полигауссовской модели оказывается сильнее, чем для чисто гауссовской (так как каждый следующий момент стремится к бесконечности быстрее предыдущего).

С другой стороны (второй аспект), полигауссовская модель может применяться в численных расчетах методами статистического моделирования [9, 15], которые наиболее употребительны в аэродинамике разреженного газа. В этом случае успех во многом зависит от вида функции рассеяния на поверхности и от конкретных свойств газа и поверхности [9]. Полученные результаты позволяют еще на предварительном этапе расчетов подобрать класс процессов так, чтобы он не только аппроксимировал реально наблюдаемые профили шероховатости, но и обладал необходимым набором свойств, чтобы подобрать наилучшим образом численные процедуры моделирования взаимодействия атома газа с неровностями шероховатости.

#### Заключение

Таким образом, рассмотренные в работе классы полигауссовских и сферически симметричных случайных процессов позволяют значительно расширить и обогатить возможности асимптотических и численных исследований, связанных с моделированием шероховатых поверхностей.

Анализ полученных результатов дает возможность сделать следующие выводы.

1. При задании параметров модели следует учитывать ограничения на корреляционную и весовую функции моделирующего процесса (см. формулы (6) – (9)), с тем, чтобы обеспечить выполнение основных свойств случайных процессов, необходимых при моделировании реальной шероховатости.

2. Выражение характеристик числа выходов за уровень (в частности, за траекторию движущегося атома газа) через соот-

ветствующие характеристики гауссовского процесса позволяет применять достаточно хорошо разработанную теорию [2 – 9], которая базируется на моделировании шероховатости гауссовскими процессами и полями.

3. Вклад шероховатости в аэродинамические величины для полигауссовской модели может существенно вырасти, по сравнению с гауссовской моделью, несмотря на то, что

важнейшие свойства полигауссовских процессов близки к аналогичным свойствам гауссовских. Увеличение вклада объясняется тем, что асимптотика числа выбросов за высокий уровень при отсутствии гауссовской компоненты в смеси существенно отличается от гауссовского случая. При этом возрастает влияние на вероятностные характеристики, а они как раз представляют наибольший интерес.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хусу А.П., Витенберг Ю.Р., Пальмов В.А. Шероховатость поверхностей (теоретико-вероятностный подход) : М.: Наука, 1975. 344 с.
2. Мирошин Р.Н. Пересечения кривых гауссовскими процессами. Л.: Изд-во ЛГУ им. А.А. Жданова, 1981. 212 с.
3. Мирошин Р.Н., Халидов И.А. Локальные методы в механике сплошных сред : СПб.: Изд-во С.-Петербургского ун-та, 2002. 304 с.
4. Мирошин Р.Н. Случайные процессы и поля. СПб.: Изд-во С.-Петербургского ун-та, 2003. 304 с.
5. Аксенова О.А., Халидов И.А. Шероховатость поверхности в аэродинамике разреженного газа: фрактальные и статистические модели. СПб.: Изд-во С.-Петербургского ун-та, 2004. 120 с.
6. Мирошин Р.Н. Метод моментов в аэродинамике : СПб.: Изд-во С.-Петербургского ун-та, 2012. 142 с.
7. Мирошин Р.Н. О дисперсии числа нулей некоторых стационарных гауссовских процессов: малые отклонения от простых решений // Вестник С.-Петербургского ун-та, 2006. Сер. 1. Вып. 1. С. 50–59.
8. Мирошин Р.Н. Об одном классе многократных интегралов // Математические заметки. 2003. Т. 73. Вып. 3. С. 390–401.
9. Aksenova O.A., Khalidov I.A. Application of Gaussian random field theory to direct simulation of rarefied gas flow near rough surface // American Institute of Physics. AIP Conf. Proc. 1501: Melville, New York, 2012, pp. 1160-1167; doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4769672>.
10. Borisov S., Ukhov A., Porodnov B. Numerical simulation of gas dynamics conductivity of microchannels with consideration of surface structure // Rarefied Gas Dynamics. AIP Conference Proceedings, Melville, New York, 2009, pp. 712-717.
11. Gimelshein N.E., Lilly T.C., Gimelshein S.F., Ketsdever A.D., Wysong L.J. Surface roughness effects in low Reynolds number nozzle flows // Rarefied Gas Dynamics. Proc. of XV Int. Symp. Novosibirsk, 2007, pp. 695-702.
12. Литвак М.Я., Малогин М.И. Полигауссовские модели негауссовской случайно-шероховатой поверхности // Журнал технической физики. 2012. Т. 82. Вып. 4. С. 99–107.
13. Чабдаров Ш.М., Трофимов А.Т. Полигауссовы представления произвольных помех и прием дискретных сигналов // Радиотехника и электроника. 1975. Т. 20. № 4. С. 734–745.
14. Kung Yao. A representation theorem and its application to spherically-invariant random processes // IEEE Transactions on Information Theory. 1973. Vol. 19, No. 5, pp 600-608.
15. Аксенова О.А. О влиянии вида аппроксимации коэффициентов обмена на поверхности на характер неустойчивости течения разреженного газа в канале // Вестник С.-Петербургского ун-та, 2014. Сер. 1. Т. 1. Вып. 3 (№ 59). С. 410–418.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

**ХАЛИДОВ Искандер Анасович** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры высшей математики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 [iskander.khalidov@yandex.ru](mailto:iskander.khalidov@yandex.ru)

*Khalidov I.A. SALIENT FEATURES OF RAREFIED GAS FLOW INTERACTION WITH ROUGH SURFACE IN THE CONTEXT OF THE POLY-GAUSSIAN MATHEMATICAL MODEL.*

The properties of randomly rough surface in the rarefied gas flow are investigated on the base of the poly-Gaussian model. These properties have much to do with surface aerodynamic characteristics. This paper puts forward the representation of probability distribution for  $z$ -axis of roughness in the form of the mixture of the Gaussian distributions. Owing to this way we succeeded in deriving analytic expressions for factorial moments of the number of outliers upon a specific level of a trajectory of a gas particle. Those analytic expressions play a key role in finding the scattering function of gas atoms on the surface and the momentum exchange coefficients. The important particular case of the poly-Gaussian processes has been considered, namely – spherically-symmetric random processes, permitting to simplify the conditions. The asymptotic evaluations were found for high level crossings characteristics corresponding to the case of weakly-rough surface. The results obtained allowed to evaluate the influence of surface roughness on the type of gas flow near the surface in comparison to the Gaussian model of roughness.

RAREFIED GAS FLOW, GAS-SURFACE INTERACTION, POLY-GAUSSIAN MODEL OF ROUGHNESS.

## REFERENCES

1. **Khusu A.P., Vitenberg Yu.R., Palmov V.A.** *Sherokhovatost poverkhnostey (teoretiko-veroyatnostnyy podkhod)*. Moscow, Nauka, 1975, 344 p. (rus)
2. **Miroshin R.N.** *Peresecheniya krivykh gaussovskimi protsessami*. Leningrad, Izdatelstvo Leningradskogo gosudarstvennogo universiteta im. A.A. Zhdanova, 1981, 212 p. (rus)
3. **Miroshin R.N., Khalidov I.A.** *Lokalnyye metody v mekhanike sploshnykh sred*. St. Peterburg, Izdatelstvo S.-Peterburgskogo universiteta, 2002, 304 p. (rus)
4. **Miroshin R.N.** *Sluchaynyye protsessy i polya*. St. Peterburg, Izdatelstvo S.-Peterburgskogo universiteta, 2003. 304 p. (rus)
5. **Aksenova O.A., Khalidov I.A.** *Sherokhovatost poverkhnosti v aerodinamike razrezhennogo gaza: fraktalnyye i statisticheskiye modeli*. St. Peterburg, Izdatelstvo S.-Peterburgskogo universiteta, 2004, 120 p. (rus)
6. **Miroshin R.N.** *Metod momentov v aerodinamike*. St. Peterburg, Izdatelstvo S.-Peterburgskogo universiteta, 2012, 142 p. (rus)
7. **Miroshin R.N.** O dispersii chisla nuley nekotorykh statsionarnykh gaussovskikh protsessov: malye otkloneniya ot prostykh resheniy. *Vestnik S.-Peterburgskogo Universiteta*, 2006, Ser. 1, No. 1, pp. 50–59. (rus)
8. **Miroshin R.N.** Obodnom klasse mnogokratnykh integralov. *Matematicheskiye zametki*, 2003, Vol. 73, No. 3, pp. 390-401. (rus)
9. **Aksenova O.A., Khalidov I.A.** Application of Gaussian Random Field Theory to Direct Simulation of Rarefied Gas Flow near Rough Surface. *American Institute of Physics. AIP Conf. Proc.* 1501: Melville, New York, 2012, pp. 1160-1167; doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4769672>
10. **Borisov S., Ukhov A., Porodnov B.** Numerical Simulation of Gas Dynamics Conductivity of Microchannels with Consideration of Surface Structure. *Rarefied Gas Dynamics. AIP Conference Proceedings*, Melville, NY, 2009, pp. 712-717.
11. **Gimelshein N.E., Lilly T.C., Gimelshein S.F., Ketsdever A.D., Wysong L.J.** Surface Roughness Effects in Low Reynolds Number Nozzle Flows. *Rarefied Gas Dynamics. Proc. of XV Int. Symp.*, Novosibirsk, 2007. pp. 695-702. (rus)
12. **Litvak M.Ya., Malyugin M.I.** Poligaussovskiy modeli negaussovskoy sluchayno-sherokhovatoy poverkhnosti. *Zhurnal tekhnicheskoy fiziki*, 2012, Vol. 82, No. 4, pp. 99-107. (rus)
13. **Chabdarov Sh.M., Trofimov A.T.** Poligaussovy predstavleniya proizvolnykh pomekh i priyem diskretnykh signalov. *Radiotekhnika i elektronika*, 1975, Vol. 20, No. 4, pp. 734-745. (rus)
14. **Kung Yao.** A Representation Theorem and its Application to Spherically-Invariant Random Processes. *IEEE Transactions on Information Theory*, 1973, Vol. 19, No. 5, pp. 600-608.
15. **Aksenova O.A.** O vliyaniy vida approksimatsii koeffitsiyentov obmena na poverkhnosti na kharakter neustoychivosti techeniya razrezhennogo gaza v kanale. *Vestnik S.-Peterburgskogo universiteta*, 2014, Ser. 1, Vol. 1, No. 3(59), pp. 410-418. (rus)

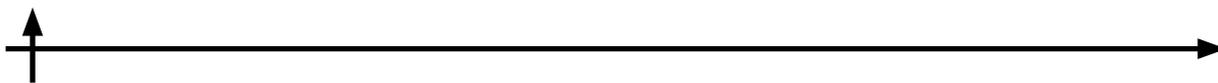
## THE AUTHOR

**KHALIDOV Iskander A.**

*St. Petersburg Polytechnic University*

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

[iskander.khalidov@yandex.ru](mailto:iskander.khalidov@yandex.ru)



## АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Акинцов Н.С. ....	55	Королева Е.Ю. ....	19
Аладов А.В. ....	38	Кумзеров Ю.А. ....	19
Андроникова Д.А. ....	30	Мартынов А.А. ....	55
Арсениев А.Н. ....	89	Минахин Л.С. ....	89
Бурдин Д.А. ....	19	Петриченко М.Р. ....	122
Бурковский Р.Г. ....	30	Побегалов Г.Е. ....	89
Валюхов В.П. ....	38	Половченко С.В. ....	64
Вахрушев С.Б. ....	30	Попрядухин П.В. ....	74, 97
Глушков В.Л. ....	9	Привалов В.Е. ....	64
Голубев А.Г. ....	115	Смирнов А.С. ....	115
Добровольская И.П. ....	74, 97	Сысоева А.А. ....	19
Дресвянина Е.Н. ....	74	Филимонов А.В. ....	30
Дубов В.В. ....	48	Халидов И.А. ....	129
Еркович О.С. ....	9	Цацульников А.Ф. ....	38
Закгейм А.Л. ....	38	Чартий П.В. ....	64
Иванькова Е.М. ....	74, 97	Черняков А.Е. ....	38
Кожанов Д.А. ....	107	Юденко А.Н. ....	74
Копытов Г.Ф. ....	55	Юдин В.Е. ....	74, 97
Кораблев В.В. ....	48	Якунина М.В. ....	89

Научное издание

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ  
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.  
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ  
«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.  
PHYSICS AND MATHEMATICS»  
№ 4 (206) 2014**

Учредитель – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

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* – технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *А.Н. Смирнова*

Директор Издательства Политехнического университета *А.В. Иванов*

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

---

Подписано в печать 29.12.2014. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.  
Печать офсетная. Усл. печ. л. 17,34. Уч.-изд. л. 17,34. Тираж 1000. Заказ

---

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет  
Издательство Политехнического университета  
член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России  
Адрес университета и издательства: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

## УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки»

### 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 г. выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ» (ISSN 1994-2354). Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», издается под сдвоенными международными стандартными сериальными номерами ISSN 1994-2354, (сериальный) ISSN 2304-9782. 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, Астрономия**. Научные направления журнала учитываются ВАК Минобрнауки РФ при защите докторских и кандидатских диссертаций в соответствии с Номенклатурой специальностей научных работников.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базе данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

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).

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор текста осуществляется в редакторе MS Word 2007 – 2010, формул – в редакторе MS Equation или MathType. Таблицы набираются в том же формате, что и основной текст.

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 – Александра Сергеевна  
или по e-mail: [physics@spbstu.ru](mailto:physics@spbstu.ru)**