

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



# НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

---

---

Физико-математические  
науки

---

---

**ТОМ 15, №1**  
**2022**

Санкт-Петербургский политехнический  
университет Петра Великого  
2022

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

## РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

*Боровков А.И.*, проректор по перспективным проектам;  
*Глухих В.А.*, академик РАН;  
*Жуков А.Е.*, чл.-кор. РАН;  
*Индейцев Д.А.*, чл.-кор. РАН;  
*Рудской А.И.*, академик РАН;  
*Сурис Р.А.*, академик РАН.

## РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

*Иванов В.К.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – главный редактор;  
*Фотиади А.Э.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – зам. главного редактора;  
*Капралова В.М.*, канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь;  
*Антонов В.И.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;  
*Безпрозванный И.Б.*, д-р биол. наук, профессор, Юго-Западный медицинский центр  
Техасского университета, Даллас, США;  
*Блинов А.В.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;  
*Донецкий Д.В.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, университет штата Нью-Йорк в Стоуни-Брук, США;  
*Дубов В.В.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;  
*Карасёв П.А.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;  
*Лобода О.С.*, канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия;  
*Малерб Й.Б.*, Dr.Sc. (Physics), профессор, университет Претории, ЮАР;  
*Остряков В.М.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;  
*Привалов В.Е.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;  
*Смирнов Е.М.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;  
*Соловьёв А.В.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, Научно-исследовательский центр мезобионаносистем (MBN),  
Франкфурт-на-Майне, Германия;  
*Таганцев А.К.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, Швейцарский федеральный институт технологий,  
Лозанна, Швейцария;  
*Топтыгин И.Н.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;  
*Тропп Э.А.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;  
*Фирсов Д.А.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;  
*Хейфец А.С.*, Ph.D. (Physics), профессор, Австралийский национальный университет,  
Канберра, Австралия;  
*Черепанов А.С.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия.

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

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

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

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

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

Журнал индексируется в базах данных **Web of Science** (Emerging Sources Citation Index), **Scopus**, а также включен в базы данных «**Российский индекс научного цитирования**» (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте <http://www.elibrary.ru>, и «**Directory of Open Access Journals**» (DOAJ).

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

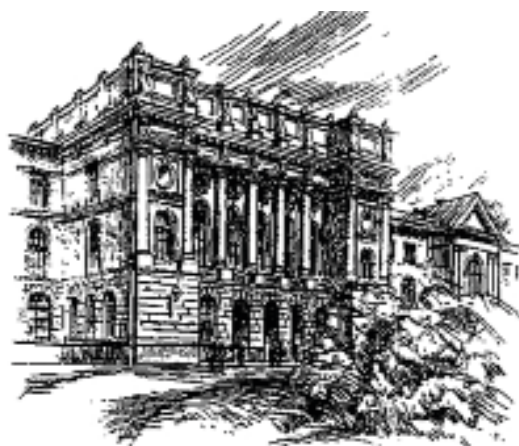
### Адрес редакции и издательства:

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

Тел. редакции (812) 294-22-85.

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

THE MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE  
POLYTECHNICAL UNIVERSITY  
**JOURNAL**

---

---

Physics  
and Mathematics

---

---

**VOLUME 15, No.1,  
2022**

Peter the Great St. Petersburg  
Polytechnic University  
2022

# ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

## JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

*A.I. Borovkov* – vice-rector for perspective projects;  
*V.A. Glukhikh* – full member of RAS;  
*D.A. Indeitsev* – corresponding member of RAS;  
*V.A.I. Rudskoy* – full member of RAS;  
*R.A. Suris* – full member of RAS;  
*A.E. Zhukov* – corresponding member of RAS.

## JOURNAL EDITORIAL BOARD

*V.K. Ivanov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – editor-in-chief;  
*A.E. Fotiadi* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – deputy editor-in-chief;  
*V.M. Kapralova* – Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – executive secretary;  
*V.I. Antonov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;  
*I.B. Bezprozvanny* – Dr. Sci. (biology), prof., The University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX, USA;  
*A.V. Blinov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;  
*A.S. Cherepanov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;  
*D.V. Donetski* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., State University of New York at Stony Brook, NY, USA;  
*V.V. Dubov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;  
*D.A. Firsov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;  
*P.A. Karasev* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;  
*A.S. Kheifets* – Ph.D., prof., Australian National University, Canberra, Australia;  
*O.S. Loboda* – Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;  
*J.B. Malherbe* – Dr. Sci. (physics), prof., University of Pretoria, Republic of South Africa;  
*V.M. Ostryakov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;  
*V.E. Privalov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;  
*E.M. Smirnov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;  
*A.V. Solov'yov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., MBN Research Center, Frankfurt am Main, Germany;  
*A.K. Tagantsev* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;  
*I.N. Toptygin* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;  
*E.A. Tropp* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia.

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

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

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

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

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

The journal is in the **Web of Science** (Emerging Sources Citation Index), **Scopus**, the **Russian Science Citation Index** (RSCI) and the **Directory of Open Access Journals** (DOAJ) databases.

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

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

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

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

Phone: (812) 294-22-85.

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

© Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 2022

## Содержание

### Физика конденсированного состояния

Барышников С. В., Милинский А. Ю., Стукова Е. В., Зеева А. А. *Диэлектрические свойства сегнетоэлектрического композита нитрат калия – нитрат цезия*..... 7

### Математическое моделирование физических процессов

Стабников А. С., Гарбарук А. В. *Алгебраическая модель ламинарно-турбулентного перехода для расчета турбулентных течений на основе метода моделирования отсоединенных вихрей* ..... 16

### Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

Решетов И. В., Редьков А. В., Мелехин В. Г., Журихина В. В., Липовский А. А. *Кристаллизация калиево-титаносиликатного стекла при термической поляризации с использованием рельефного анода*..... 30

### Математическая физика

Аниконов Д. С., Балакина Е. Ю., Коновалова Д. С. *Обратная задача для обобщенного преобразования Радона*..... 41

### Физическая электроника

Мольков С. И., Штыков А. С. *Аномальный разогрев частиц в плазменно-пылевых структурах* 52

### Физическое материаловедение

Илясова Н. В., Кондракова О. В., Кудюкин А. И., Моос Е. Н. *Сравнительный анализ поверхностей разрыва когезионных связей в многослойных системах*..... 62

### Биофизика и медицинская физика

Арсениев А. Н., Панфилов М. А., Побегалов Г. Е., Потысьева А. С., Павлинова П. А., Якунина М. В., Ходорковский М. А. *Характеризация на уровне одиночных молекул параметров транскрипции бактериальной РНК-полимеразы методом акустической силовой спектроскопии*..... 70

Концевая В. Г., Головицкий А. П., Куликов К. Г. *Определение спектральных характеристик светорассеяния и функции распределения по размерам для агрегатов из многослойных частиц* ..... 81

### Радиофизика

Копытов Г. Ф., Кудрявцев Д. И. *Движение заряженной частицы в электромагнитном поле многотональной амплитудно-модулированной волны и постоянном магнитном поле*..... 98

# Contents

## Condensed matter physics

- Baryshnikov S. V., Milinskiy A. Yu., Stukova E. V., Zeeva A. A.** *Dielectric properties of the potassium nitrate – caesium nitrate ferroelectric composite*..... 7

## Simulation of physical processes

- Stabnikov A. S., Garbaruk A. V.** *An algebraic transition model for simulation of turbulent flows based on a Detached Eddy Simulation approach*..... 16

## Atom physics and physics of clusters and nanostructures

- Reshetov I. V., Redkov A. V., Melehin V. G., Zhurikhina V. V., Lipovskii A. A.** *Crystallization of potassium titanate glass under thermal poling using a profiled anode*..... 30

## Mathematical physics

- Anikonov D. S., Balakina E. Yu., Konovalova D. S.** *An inverse problem for generalized Radon transformation*..... 41

## Physical electronics

- Mol'kov S. I., Shtykov A. S.** *Abnormal particle heating in the plasma dust structures*..... 52

## Physical materials technology

- Ilyasova N. V., Kondrakova O. V., Kudryukin A. I., Moos E. N.** *Surfaces of cohesive bonds' fracture in the multilayer systems: A comparative analysis*..... 62

## Biophysics and medical physics

- Arseniev A. N., Panfilov M. A., Pobegalov G. E., Potyseva A. S., Pavlinova P. A., Yakunina M. V., Khodorkovskii M. A.** *Single molecules characterization of transcription of bacterial RNA-polymerase parameters using acoustic force spectroscopy*..... 70

- Kontsevaya V. G., Golovitskii A. P., Kulikov K. G.** *Aggregates of multilayered particles: The spectral characteristics of light scattering and size distribution functions*..... 81

## Radiophysics

- Kopytov G. F., Kudryavtsev D. I.** *The motion of a charged particle in the electromagnetic field of a multitonal amplitude-modulated wave and in the constant magnetic field*..... 98

## Физика конденсированного состояния

Научная статья

УДК 537.226

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15101>

### ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО КОМПОЗИТА НИТРАТ КАЛИЯ – НИТРАТ ЦЕЗИЯ

**С. В. Барышников**<sup>1</sup>, **А. Ю. Милинский**<sup>1</sup>,  
**Е. В. Стукова**<sup>2</sup> ✉, **А. А. Зеева**<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Благовещенский государственный педагогический университет,  
г. Благовещенск, Россия;

<sup>2</sup> Амурский государственный университет, г. Благовещенск, Россия;

✉ [lenast@bk.ru](mailto:lenast@bk.ru)

**Аннотация.** Изготовлены образцы композита  $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{CsNO}_3)_x$ , и для них исследованы температурные зависимости сигнала дифференциального термического анализа, диэлектрической проницаемости и амплитуды третьей гармоники (для определения области существования полярной фазы). Поверхности образцов изучались методом растровой электронной микроскопии. Обнаружено, что увеличение доли  $\text{CsNO}_3$  приводит как к уменьшению коэффициента нелинейности композита, так и к сужению температурной области существования III сегнетоэлектрической фазы нитрата калия. Установлено, что при значениях  $x$  свыше 0,5 нелинейность свойств композита  $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{CsNO}_3)_x$  определяется характеристиками  $\text{CsNO}_3$ .

**Ключевые слова:** композит, сегнетоэлектрик, диэлектрическая проницаемость, коэффициент третьей гармоники, фазовый переход

**Для цитирования:** Барышников С. В., Милинский А. Ю., Стукова Е. В., Зеева А. А. Диэлектрические свойства сегнетоэлектрического композита нитрат калия – нитрат цезия // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 1. С 7–15 . DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15101>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15101>

### DIELECTRIC PROPERTIES OF THE POTASSIUM NITRATE – CAESIUM NITRATE FERROELECTRIC COMPOSITE

**S. V. Baryshnikov**<sup>1</sup>, **A. Yu. Milinskiy**<sup>1</sup>,  
**E. V. Stukova**<sup>2</sup> ✉, **A. A. Zeeva**<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Blagoveshchensk State Pedagogical University, Blagoveshchensk, Russia;

<sup>2</sup> Amur State University, Blagoveshchensk, Russia

✉ [lenast@bk.ru](mailto:lenast@bk.ru)

**Abstract.** Some samples of the  $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{CsNO}_3)_x$  composite with different  $x$  values have been prepared, and their temperature dependences of the differential thermal analysis signal, of the dielectric constant, and the amplitude of the third harmonic (to find an existence domain of the polar phase) were studied. The sample surfaces were investigated by scanning electron microscopy. An increase in the proportion of  $\text{CsNO}_3$  was revealed to lead to a decrease in the coefficient of nonlinearity of the composite and to narrowing of the existence domain's temperature range of the  $\text{KNO}_3$  ferroelectric phase III. Also it was found that the composite properties nonlinearity at  $x$  beyond 0.5 was determined by the  $\text{CsNO}_3$  properties.

**Keywords:** composite, ferroelectric, permittivity, third harmonic coefficient, phase transition

**Citation:** Baryshnikov S. V., Milinskiy A. Yu., Stukova E. V., Zeeva A. A., Dielectric properties of the potassium nitrate – caesium nitrate ferroelectric composite, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (1) (2022) 7–15. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15101>

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

### Введение

Наличие у нитрата калия  $\text{KNO}_3$  прямоугольной петли гистерезиса, низких диэлектрических потерь и относительно высокой спонтанной поляризации дает возможность использовать этот материал для создания элементов энергонезависимой памяти [1]. При этом в нитрате калия полярная фаза стабильна только в ходе процесса охлаждения от 397 до 373 К. Сегнетоэлектрическое состояние этого соединения метастабильно, что позволяет влиять на его температурный интервал путем варьирования различных внешних факторов. Проведенные ранее исследования демонстрируют эту возможность через создание твердых растворов и композитов на основе нитрата калия [2 – 5]. Так, для сегнетоэлектрических композитов  $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{BaTiO}_3)_x$  [2] и  $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{KNbO}_3)_x$  [3] было обнаружено расширение температурного интервала, в котором существует сегнетоэлектрическая фаза нитрата калия, что связано с диполь-дипольным взаимодействием частиц. Помимо этого, на сегнетоэлектрическую фазу в  $\text{KNO}_3$ , находящегося в составе композитов, могут оказывать влияние объемная доля частиц включений, размер этих частиц, их спонтанная поляризация и т. п. Расширение области существования сегнетоэлектрической фазы  $\text{KNO}_3$  также наблюдалось при легировании ионами натрия  $\text{Na}^+$  [4, 5].

В данной работе исследуется влияние частиц включений нитрата цезия  $\text{CsNO}_3$  на формирование сегнетоэлектрического состояния нитрата калия  $\text{KNO}_3$  в составе композита  $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{CsNO}_3)_x$ .

### Образцы и методика эксперимента

Нитрат калия  $\text{KNO}_3$  обладает ромбической структурой  $Pm\bar{3}n$  [6] (фаза II) при температуре около 300 К. В ходе нагрева до 401 К нитрат калия испытывает переход в тригональную структуру  $R\bar{3}m$  (фаза I). Фазы I и II являются параэлектрическими. Сегнетоэлектрическая тригональная фаза III нитрата калия формируется только при охлаждении в интервале 397 – 373 К. Максимальное значение спонтанной поляризации в сегнетоэлектрической фазе равно 8 – 10 мкКл/см<sup>2</sup> [6]. На пределы температурного интервала нахождения нитрата калия в сегнетоэлектрической фазе влияет максимальная температура нагрева и скорость охлаждения [7, 8]. Так, при нагревании поликристаллического образца  $\text{KNO}_3$  до 473 К и скорости охлаждения 1 – 2 К/мин интервал полярной фазы составляет 22 – 24 градуса.

Нитрат цезия  $\text{CsNO}_3$  при температуре около 300 К обладает тригональной симметрией. Атомы цезия образуют псевдокубическую подрешетку с девятью псевдокубами на элементарную ячейку. Кристаллическая структура низкотемпературной фазы была определена как полярная тригональная [9] со спонтанной поляризацией  $P_s$ , равной 1 – 2 мкКл/см<sup>2</sup> (при 410 – 420 К) [10]. Выше температуры Кюри ( $T_C = 427$  К)  $\text{CsNO}_3$  имеет кубическую структуру.



Для получения композитов  $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{CsNO}_3)_x$  нами использовались порошки  $\text{KNO}_3$  и  $\text{CsNO}_3$ . Средний размер частиц в порошках составлял 5 – 10 мкм. Объемное содержание нитрата цезия в композитах составляло  $x = 0, 0,1, 0,2, 0,3$  и  $0,5$ . Порошки нитратов калия и цезия перемешивали в агатовой ступке около 30 мин. Затем из полученных порошков под давлением  $8 \cdot 10^3$  кг/см<sup>2</sup> прессовали образцы в виде дисков диаметром 10 мм и толщиной 1,5 мм.

Для исследования диэлектрических свойств применяли измеритель E7-25. Для нанесения на образцы электродов использовали индий-галлиевую пасту. Температуру определяли при помощи калибратора термопар ТС-6621 с термопарой типа К. Исследование композитов  $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{CsNO}_3)_x$  методом нелинейной диэлектрической спектроскопии проводили по методике, описанной в статьях [11, 12]. Для определения области существования полярной фазы использовали коэффициент третьей гармоники  $\gamma_{3\omega} = U_{3\omega}/U_{\omega}$ .

Для исследований методом дифференциального термического анализа (ДТА) композитов  $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{CsNO}_3)_x$  применяли термоанализатор Linseis STA PT 600. Скорость изменения температуры в процессе измерения сигнала ДТА и диэлектрических свойств составляла примерно 1 К/мин. Температурный интервал исследований охватывал фазовые переходы в  $\text{KNO}_3$  и  $\text{CsNO}_3$ . Перед измерениями для удаления адсорбированной воды образцы прогревали при температуре 420 К в течение 30 мин.

### Экспериментальные результаты и обсуждение

Как следует из данных, полученных методами ДТА и растровой электронной микроскопии (РЭМ), при смешивании компонентов  $\text{KNO}_3$  и  $\text{CsNO}_3$  не образуются твердые растворы. В композите  $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{CsNO}_3)_x$  полярные частицы нитрата цезия группируются и образуют агломераты (рис. 1), а на кривых ДТА наблюдается суперпозиция фазовых переходов в нитратах  $\text{KNO}_3$  и  $\text{CsNO}_3$  (рис. 2).

Экспериментальные результаты исследования температурных зависимостей диэлектрической проницаемости  $\epsilon'(T)$  и коэффициента третьей гармоники  $\gamma_{3\omega}(T)$  для поликристаллического нитрата калия показаны на рис. 3. При охлаждении образца от 453 К, на кривой  $\epsilon'(T)$  наблюдается две аномалии. При  $T = 401$  К нитрат калия  $\text{KNO}_3$  из тригональной параэлектрической фазы I трансформируется в тригональную сегнетоэлектрическую фазу III, и при  $T = 377$  К он переходит из фазы III в параэлектрическую ромбическую фазу II.

Анализ зависимостей  $\gamma_{3\omega}(T)$  и  $\epsilon'(T)$  (см. рис. 3) показывает, что полярная фаза в нитрате калия, возникающая при охлаждении, лежит в температурном интервале 24 К, что соответствует известным литературным данным [6]. Коэффициент третьей гармоники  $\gamma_{3\omega}$  для  $\text{KNO}_3$  имеет значение в максимуме около 2,4 % при напряженности электрического поля  $E = 25$  В/мм и примерно 4,7 % при  $E = 53$  В/мм.

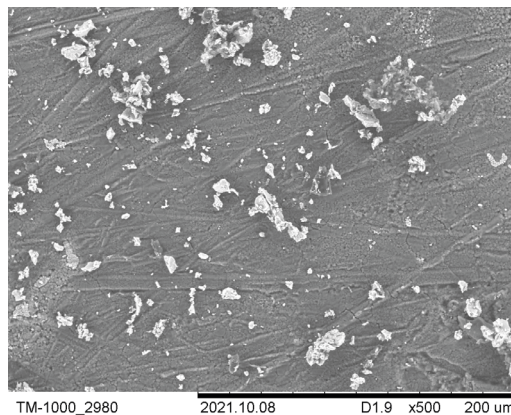


Рис. 1. Микрофотография поверхности композита  $(\text{KNO}_3)_{0,8}/(\text{CsNO}_3)_{0,2}$

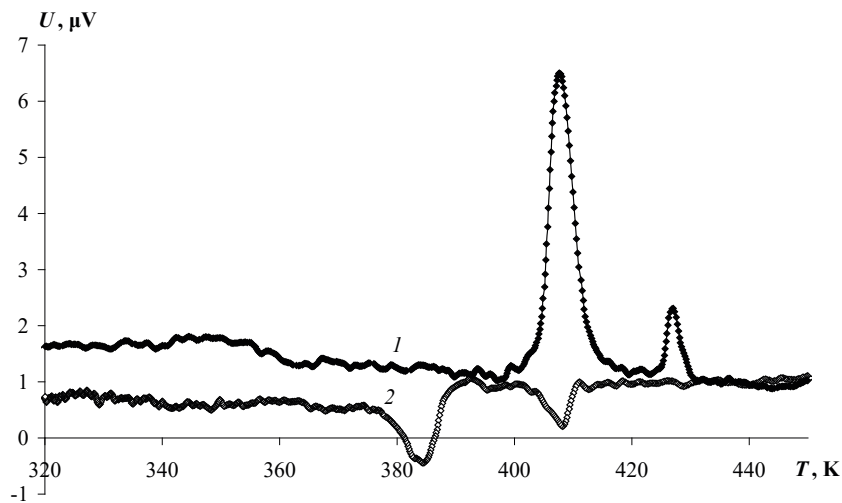


Рис. 2. Сигналы, полученные для композита  $(\text{KNO}_3)_{0,8}/(\text{CsNO}_3)_{0,2}$  методом дифференциального термического анализа (ДТА), при нагреве (1) и охлаждении (2) образца

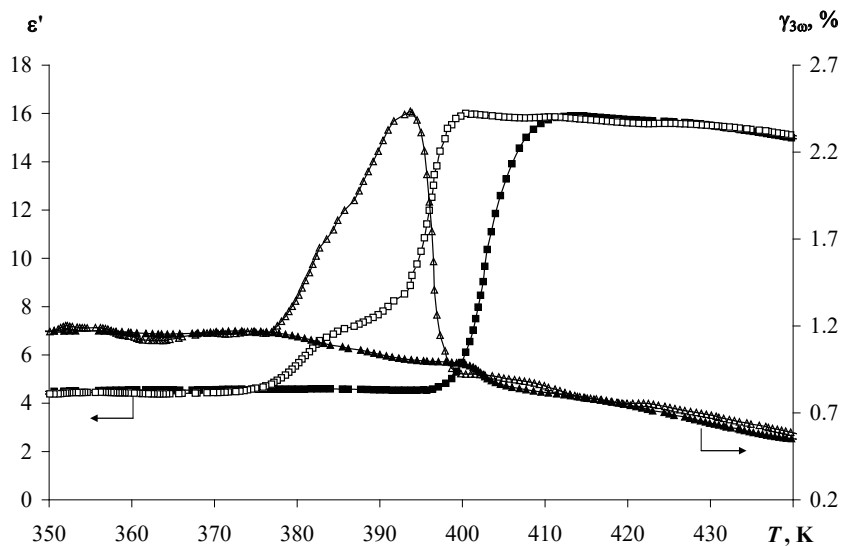


Рис. 3. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости  $\epsilon'$  (на частоте 2 кГц) и коэффициента третьей гармоники  $\gamma_{3\omega}$  (при напряженности электрического поля 25 В/мм) нитрата калия  $\text{KNO}_3$ ;

Данные получены при нагреве (затусованные маркеры) и охлаждении (пустые)

На рис. 4 приведены зависимости  $\epsilon'(T)$  и  $\gamma_{3\omega}(T)$  для нитрата цезия. Анализ этих результатов показал, что сегнетоэлектрическая фаза в нитрате цезия  $\text{CsNO}_3$  наблюдается ниже температуры 427 К, о чем свидетельствует температурная зависимость  $\gamma_{3\omega}(T)$ . Однако при  $E = 25$  В/мм максимальное значение  $\gamma_{3\omega}(T)$  составляет около 1,2 %, что объясняется малым значением спонтанной поляризации соединения  $\text{CsNO}_3$  [10].

Для композитных образцов  $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{CsNO}_3)_x$  с увеличением значения  $x$  наблюдается снижение эффективной диэлектрической проницаемости  $\epsilon'$ , что связано с появлением межслоевой поляризации, и некоторое понижение температуры фазовых переходов (рис. 5). Тангенс угла диэлектрических потерь  $\text{tg}\delta$  в сегнетоэлектрической фазе при  $T = 391$  К на частоте 20 кГц составляет  $\sim 0,11$  для  $\text{KNO}_3$ ;  $\sim 0,35$  для  $(\text{KNO}_3)_{0,9}/(\text{CsNO}_3)_{0,1}$ ;

$\sim 0,60$  для  $(\text{KNO}_3)_{0,7}/(\text{CsNO}_3)_{0,3}$ ;  $\sim 0,51$  для  $(\text{KNO}_3)_{0,5}/(\text{CsNO}_3)_{0,5}$  и  $\sim 0,06$  для чистого  $\text{CsNO}_3$ .

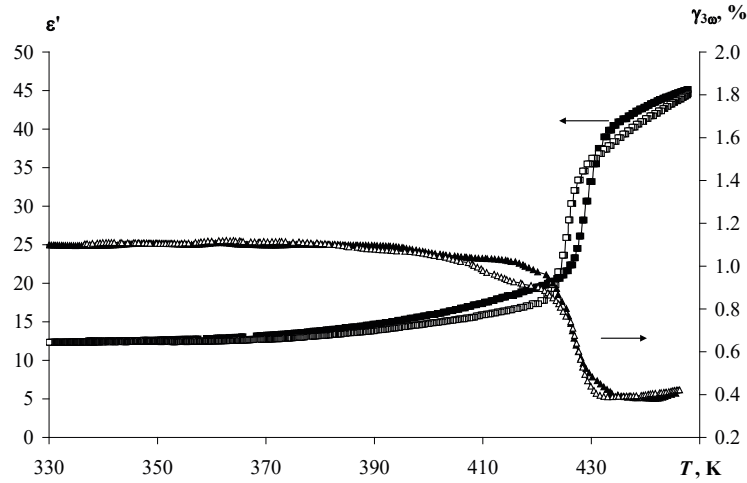


Рис. 4. Зависимости для тех же параметров, как на рис. 3, но для нитрата цезия  $\text{CsNO}_3$

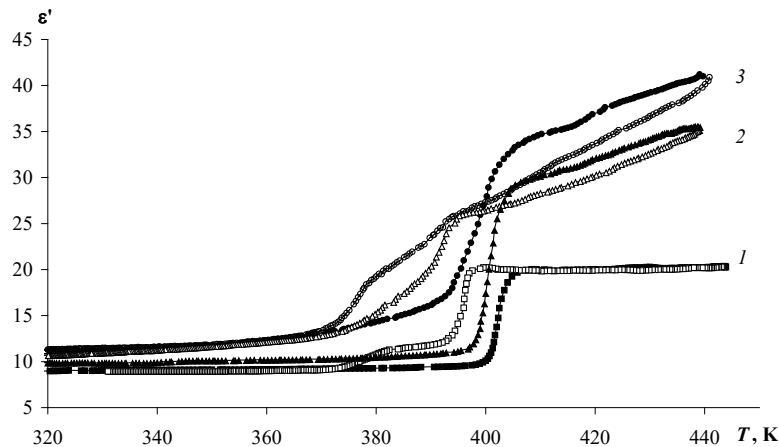


Рис. 5. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости  $\epsilon'$  при нагреве (затушеванные маркеры) и охлаждении (пустые) соединений  $\text{KNO}_3$  (1),  $(\text{KNO}_3)_{0,9}/(\text{CsNO}_3)_{0,1}$  (2) и  $(\text{KNO}_3)_{0,7}/(\text{CsNO}_3)_{0,3}$  (3) на частоте 20 кГц

На рис. 6 показан температурный ход величины  $\gamma_{3\omega}$  у образцов композитных материалов  $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{CsNO}_3)_x$  с различными значениями  $x$  (содержание  $\text{CsNO}_3$ ). Как следует из графиков, с увеличением  $x$  происходит снижение коэффициента третьей гармоники с 4,7 % для чистого  $\text{KNO}_3$  до 0,41% для композита  $(\text{KNO}_3)_{0,7}/(\text{CsNO}_3)_{0,3}$  и сужение температурного интервала сегнетоэлектрической фазы для  $\text{KNO}_3$  с 24 до 12 К соответственно. В случае  $x = 0,5$  (рис. 7) фазовый переход наблюдается при 396 К при нагреве и при 380 К при охлаждении. На кривой  $\gamma_{3\omega}(T)$  сегнетоэлектрическая фаза в нитрате калия при охлаждении уже не фиксируется, а максимумы  $\gamma_{3\omega}$  имеют меньшие значения, чем у чистых соединений  $\text{KNO}_3$  или  $\text{CsNO}_3$ .

Для понимания полученных результатов стоит обратиться к работам [2, 3], где было показано, что добавление в нитрат калия титанатов [2] и ниобатов [3] с большой

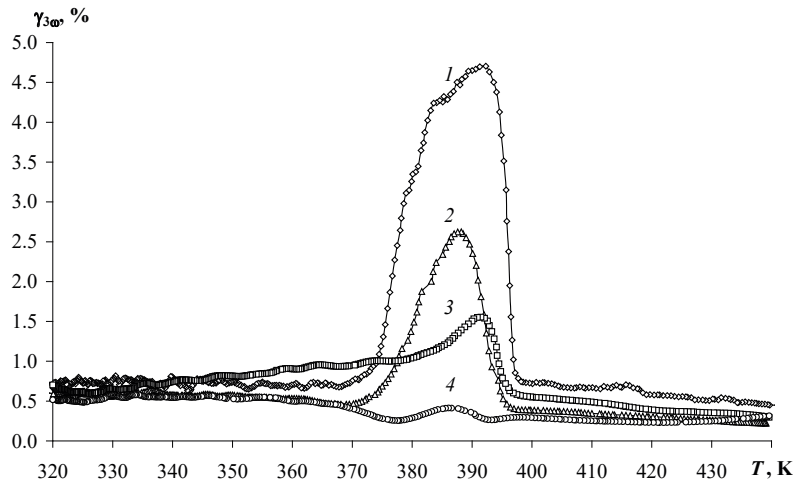


Рис. 6. Температурные зависимости коэффициента третьей гармоники  $\gamma_{3\omega}$  композита  $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{CsNO}_3)_x$  при  $x = 0,0$  (1);  $0,1$  (2);  $0,2$  (3);  $0,3$  (4) при охлаждении; напряженность электрического поля – 25 В/мм

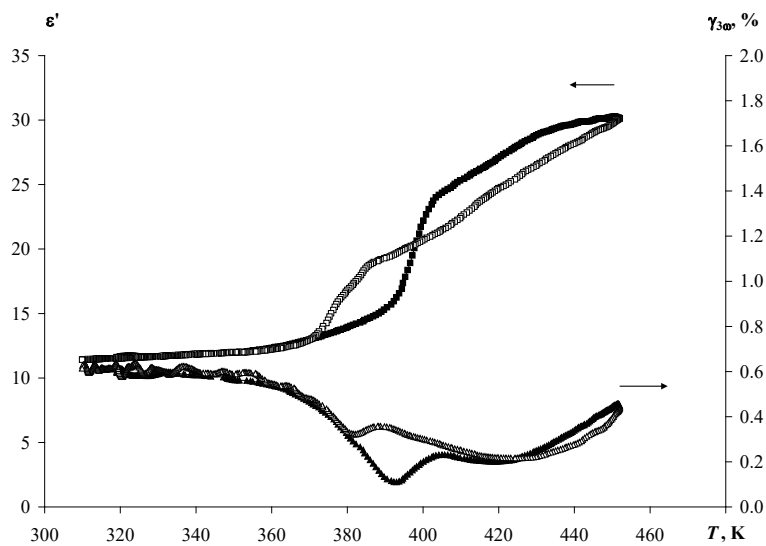


Рис. 7. Температурные зависимости величин  $\epsilon'$  на частоте 20 кГц и  $\gamma_{3\omega}$  при нагреве (затухеванные маркеры) и охлаждении (пустые) композита  $(\text{KNO}_3)_{0,5}/(\text{CsNO}_3)_{0,5}$

спонтанной поляризацией приводит к расширению температурного интервала фазы III, соответствующей сегнетоэлектрическому состоянию. Степень взаимного влияния компонентов в композите зависит от значений спонтанной поляризации, диэлектрической проницаемости, а также от объемного соотношения этих компонентов.

Полученные нами результаты свидетельствуют о том, что при создании композитного материала  $(\text{KNO}_3)_{1-x}/(\text{CsNO}_3)_x$  добавление нитрата цезия, обладающего малой спонтанной поляризацией, к нитрату калия приводит к дестабилизации сегнетоэлектрического состояния последнего. Подобное сужение температурного интервала существования полярного состояния наблюдалось и для твердых растворов  $\text{Rb}_x\text{K}_{1-x}\text{NO}_3$  [15]. В этой работе было показано, что при увеличении содержания ионов рубидия происходило снижение спонтанной поляризации твердого раствора и при достижении доли  $x > 0,5$  сегнетоэлектрическое



состояние пропадало. В работе [14] было обнаружено кооперативное поведение частиц во время фазового перехода III  $\rightarrow$  I для гранулированного и порошкового нитратов калия. Указанное поведение сузило температурный диапазон стабильности фазы III. Отдельные частицы  $\text{KNO}_3$  вели себя как отдельные сегнетоэлектрические домены, причем в каждой частице фазовый переход происходил независимо от ожидаемой температуры Кюри. Для частиц  $\text{KNO}_3$ , находящихся в тесном контакте, была характерна тенденция к кооперативному поведению (как единый большой сегнетоэлектрический домен), в сторону формирования более резких фазовых переходов, свойственных монокристаллам. Добавление же в порошок нитрата калия  $\text{KNO}_3$  порошка карбида кремния SiC (не сегнетоэлектрическое соединение) приводило к исчезновению фазового перехода III  $\rightarrow$  I в порошке  $\text{KNO}_3$ , что объяснялось уменьшением взаимодействия между частицами нитрата калия.

### Заключение

Таким образом, если в композитах на основе нитрата калия, полученных добавлением сегнетоэлектриков с большой спонтанной поляризацией, наблюдается расширение температурного интервала сегнетоэлектрической фазы, то добавление в  $\text{KNO}_3$  сегнетоэлектриков с меньшей, чем у него, спонтанной поляризацией, приводит к дестабилизации его полярного состояния.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Scott J. F.** Ferroelectric memories. Springer Series in Advanced Microelectronics. Vol. 3. No. 26. Berlin: Springer, 2000. 248 p.
2. **Стукова Е. В., Барышников С. В.** Стабилизация сегнетоэлектрической фазы в композитах  $(\text{KNO}_3)_{1-x}-(\text{BaTiO}_3)_x$  // Перспективные материалы. 2011. № 2. С. 28–33.
3. **Стукова Е. В., Барышников С. В.** Диэлектрические исследования сегнетоэлектрических композитов на основе  $(\text{KNO}_3)_{1-x}-(\text{KNbO}_3)_x$  // Перспективные материалы. 2011. № 13. С. 801–805.
4. **Shimada S., Aoki T.** Stabilization of the ferroelectric phase of  $\text{KNO}_3$  by doping with  $\text{Na}^+$ , determined by the acoustic emission method // Chemistry Letters. 1996. Vol. 25. No. 5. Pp. 393–394.
5. **Baryshnikov S. V., Charnaya E. V., Milinskiy A. Yu., Stukova E. V., Tien Cheng, Michel D.** Phase transitions in  $\text{K}_{1-x}\text{Na}_x\text{NO}_3$  embedded into molecular sieves // Journal of Physics: Condensed Matter. 2009. Vol. 21. No. 32. P. 325902.
6. **Chen A., Chernow A.** Nature of ferroelectricity in  $\text{KNO}_3$  // Physical Review. 1967. Vol. 154. No. 2. Pp. 493–505.
7. **Deshpande V. V., Karkhanavala M. D., Rao U. R. K.** Phase transitions in potassium nitrate // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. 1974. Vol. 6. No. 6. Pp. 613–621.
8. **Nimmo J. K., Lucas B. W.** The crystal structures of  $\gamma$ - and  $\beta$ - $\text{KNO}_3$  and the  $\alpha \leftarrow \gamma \leftarrow \beta$  phase transformations // Acta Crystallographica. B. 1976. Vol. B32. Part 7. Pp. 1968–1971.
9. **Lucas B. W.** The structure (neutron) of phase II caesium nitrate at 298 K,  $\text{CsNO}_3$  // Acta Crystallographica. C. 1983. Vol. C39. Part 12. Pp. 1591–1594.
10. **Takagi Y., Kimura S., Takeuchi Y.** Structural phase transition of  $\text{CsNO}_3$  crystal. Spontaneous polarization // Ferroelectrics. 2003. Vol. 284. No. 1. Pp. 129–135.
11. **Ikeda S., Kominami H., Koyama K., Wada Y. J.** Nonlinear dielectric constant and ferroelectric-to-paraelectric phase transition in copolymers of vinylidene fluoride and trifluoroethylene // Applied Physics. 1987. Vol. 62. No. 8. Pp. 3339–3342.
12. **Юдин С. Г., Блинов Л. М., Петухова Н. Н., Палто С. П.** Сегнетоэлектрический фазовый переход в пленках Ленгмюра – Блуджетт фталоцианина меди // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1999. Т. 70. № 9. С. 625–631.
13. **Бурмакин Е. И.** Твердые электролиты с проводимостью по катионам щелочных металлов. М.: Наука, 1992. 264 с.
14. **Westphal M. J.** Cooperative behavior during ferroelectric transitions in  $\text{KNO}_3$  powder // Journal of Applied Physics. 1993. Vol. 74. No. 5. Pp. 3131–3137.
15. **Kawabe U., Yanagi T., Sawada S.** Dielectric and X-ray studies of  $\text{KNO}_3$ -series mixed crystals // Journal of the Physical Society of Japan. 1965. Vol. 20. No. 11. Pp. 2059–2073.

## REFERENCES

1. Scott J. F., Ferroelectric memories; Springer Series in Advanced Microelectronics, Springer, Berlin. 3 (26) (2000).
2. Stukova E. V., Baryshnikov S. V., Stabilization of the ferroelectric phase in  $(\text{KNO}_3)_{1-x}-(\text{BaTiO}_3)_x$  composites, Inorg. Mater. Appl. Res. 2 (5) (2011) 434–438.
3. Stukova E. V., Baryshnikov S. V., Dielektricheskiye issledovaniya segnetoelektricheskikh kompozitov na osnove  $(\text{KNO}_3)_{1-x}-(\text{BaNbO}_3)_x$  [Dielectric research of ferroelectric composites based on  $(\text{KNO}_3)_{1-x}-(\text{BaNbO}_3)_x$ ], Perspektivnyye materialy. (S13) (2011) 801–805 (in Russian).
4. Shimada S., Aoki T., Stabilization of the ferroelectric phase of  $\text{KNO}_3$  by doping with  $\text{Na}^+$ , determined by the acoustic emission method, Chem. Lett. 25 (5) (1996) 393–394.
5. Baryshnikov S. V., Charnaya E. V., Milinskiy A. Yu., et al., Phase transitions in  $\text{K}_{1-x}\text{Na}_x\text{NO}_3$  embedded into molecular sieves, J. Phys. Cond. Mat. 21 (32) (2009) 325902.
6. Chen A., Chernow A., Nature of ferroelectricity in  $\text{KNO}_3$ , Phys. Rev. 154 (2) (1967) 493–505.
7. Deshpande V. V., Karkhanavala M. D., Rao U. R. K., Phase transitions in potassium nitrate, J. Therm. Anal. Calorim. 6 (6) (1974) 613–621.
8. Nimmo J. K., Lucas B. W., The crystal structures of  $\gamma$ - and  $\beta$ - $\text{KNO}_3$  and the  $\alpha \leftarrow \gamma \leftarrow \beta$  phase transformations, Acta Cryst. B. B32 (7) (1976) 1968–1971.
9. Lucas B. W., The structure (neutron) of phase II caesium nitrate at 298 K,  $\text{CsNO}_3$ , Acta Cryst. C. C39 (12) (1983) 1591–1594.
10. Takagi Y., Kimura S., Takeuchi Y., Structural phase transition of  $\text{CsNO}_3$  crystal. Spontaneous polarization, Ferroelectrics. 284 (1) (2003) 129–135.
11. Ikeda S., Kominami H., Koyama K., Wada Y. J., Nonlinear dielectric constant and ferroelectric-to-paraelectric phase transition in copolymers of vinylidene fluoride and trifluoroethylene, Appl. Phys. 62 (8) (1987) 3339–3342.
12. Yudin S. G., Blinov L. M., Petukhova N. N., Palto S. P., Ferroelectric phase transition in Langmuir – Blodgett films of copper phthalocyanine, J. Exp. Theor. Phys. Lett. 70 (9) (1999) 633–640.
13. Burmakin E. I., Tverdyye elektrolity s provodimost'yu po kationam shchelochnykh metallov [Solid electrolytes conducting by alkali metal cations], Nauka, Moscow, 1992 (in Russian).
14. Westphal M. J., Cooperative behavior during ferroelectric transitions in  $\text{KNO}_3$  powder, J. Appl. Phys. 74 (5) (1993) 3131–3137.
15. Kawabe U., Yanagi T., Sawada S., Dielectric and X-ray studies of  $\text{KNO}_3$ -series mixed crystals, J. Phys. Soc. Jap. 20 (11) (1965) 2059–2073.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**БАРЫШНИКОВ Сергей Васильевич** — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физического и математического образования Благовещенского государственного педагогического университета, г. Благовещенск, Россия.

675000, Россия, г. Благовещенск, ул. Ленина, 104

svbar2003@list.ru

ORCID: 0000-0002-3362-8975

**МИЛИНСКИЙ Алексей Юрьевич** — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физического и математического образования Благовещенского государственного педагогического университета, г. Благовещенск, Россия.

675000, Россия, г. Благовещенск, ул. Ленина, 104

a.milinskiy@mail.ru

ORCID: 0000-0001-7525-4396

**СТУКОВА Елена Владимировна** — доктор физико-математических наук, заведующая кафедрой физики Амурского государственного университета, г. Благовещенск, Россия.

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

lenast@bk.ru  
ORCID: 0000-0002-7981-7456

**ЗЕЕВА Анна Анатольевна** – аспирантка кафедры физики Амурского государственного университета, г. Благовещенск, Россия.  
675027, Россия, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21  
anutka\_2010.1997@mail.ru  
ORCID: 0000-0001-7216-3931

## THE AUTHORS

**BARYSHNIKOV Sergey V.**  
*Blagoveshchensk State Pedagogical University*  
104, Lenin St., Blagoveshchensk, 675000, Russia  
svbar2003@list.ru  
ORCID: 0000-0002-3362-8975

**MILINSKIY Alexey Yu.**  
*Blagoveshchensk State Pedagogical University*  
104, Lenin St., Blagoveshchensk, 675000, Russia  
a.milinskiy@mail.ru  
ORCID: 0000-0001-7525-4396

**STUKOVA Elena V.**  
*Amur State University*  
21, Ignatievskoe RTe., Blagoveshchensk, 675027, Russia  
lenast@bk.ru  
ORCID: 0000-0002-7981-7456

**ZEEVA Anna A.**  
*Amur State University*  
21, Ignatievskoe RTe., Blagoveshchensk, 675027, Russia  
anutka\_2010.1997@mail.ru  
ORCID: 0000-0001-7216-3931

*Статья поступила в редакцию 20.12.2021. Одобрена после рецензирования 24.01.2022.  
Принята 24.01.2022.  
Received 20.12.2021. Approved after reviewing 24.01.2022. Accepted 24.01.2022.*

## Математическое моделирование физических процессов

Научная статья

УДК 532.517.4

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15102>

### АЛГЕБРАИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЛАМИНАРНО-ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕХОДА ДЛЯ РАСЧЕТА ТУРБУЛЕНТНЫХ ТЕЧЕНИЙ НА ОСНОВЕ МЕТОДА МОДЕЛИРОВАНИЯ ОТСОЕДИНЕННЫХ ВИХРЕЙ

**А. С. Стабников** ✉, **А. В. Гарбарук**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ [an.stabnikov@gmail.com](mailto:an.stabnikov@gmail.com)

**Аннотация.** Предложен новый глобальный гибридный вихреразрешающий подход DDES SST KD, предназначенный для расчета отрывных течений при наличии перехода в присоединенном пограничном слое. Подход базируется на разработанной авторами модели перехода, основанной на полуэмпирической модели турбулентности SST и алгебраической модели перехода  $k-\omega$  KD. На примере задачи об обтекании цилиндра и сферы в широком диапазоне чисел Рейнольдса продемонстрировано преимущество предложенного подхода над оригинальным методом DDES SST.

**Ключевые слова:** турбулентность, вихреразрешающий метод, RANS/LES, DDES, модель ламинарно-турбулентного перехода, кризис сопротивления

**Финансирование:** Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-31-90046.

**Для цитирования:** Стабников А. С., Гарбарук А. В. Алгебраическая модель ламинарно-турбулентного перехода для расчета турбулентных течений на основе метода моделирования отсоединенных вихрей // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 1. С 16–29. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15102>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15102>

### AN ALGEBRAIC TRANSITION MODEL FOR SIMULATION OF TURBULENT FLOWS BASED ON A DETACHED EDDY SIMULATION APPROACH

**A. S. Stabnikov** ✉, **A. V. Garbaruk**

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

✉ [an.stabnikov@gmail.com](mailto:an.stabnikov@gmail.com)

**Abstract.** A new hybrid RANS/LES method DDES SST KD is proposed, aimed at computations of flows with separation and laminar-turbulent transition in the attached boundary layer. The method is based on a new transition model which uses the SST turbulence model



and  $k$ - $\omega$  KD transition model as a basis. The resulting approach is then tested on a drag crisis problem flows around a circular cylinder and a sphere. The results show that the proposed method is an improvement relative to DDES SST.

**Keywords:** turbulence, hybrid RANS/LES, DDES, laminar-turbulent transition model, drag crisis

**Funding:** The reported study was funded by RFBR, project number 19-31-90046.

**For citation:** Stabnikov A. S., Garbaruk A. V., An algebraic transition model for simulation of turbulent flows based on a Detached Eddy Simulation approach, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (1) (2022) 16–29. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15102>

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

### Введение

С ростом производительности вычислительных ресурсов для расчета турбулентных течений все чаще применяются глобальные гибридные вихреразрешающие подходы, комбинирующие уравнения Навье – Стокса, осредненные по Рейнольдсу (*англ.* Reynolds Averaged Navier – Stokes (RANS)) и метод моделирования крупных вихрей (*англ.* Large Eddy Simulation (LES)). Среди них наиболее успешными являются методы семейства DES (*англ.* Detached Eddy Simulation, метод моделирования отсоединенных вихрей), в рамках которых в RANS-подобластях потока, включающих присоединенные пограничные слои, используется базовая полуэмпирическая модель турбулентности, а в LES-подобластях, в том числе и в зонах рециркуляции потока, – подсеточная модель, построенная на ее основе. При этом переключение между RANS и LES выполняется динамически в процессе решения на основе локальных характеристик потока и расчетной сетки. Признано [1], что среди методов этого семейства для решения прикладных задач наиболее подходящей является модификация DES, получившая название DDES (*англ.* Delayed Detached Eddy Simulation, метод моделирования отсоединенных вихрей с запаздыванием) [2].

Поскольку модель турбулентности SST (Shear Stress Transport) [3] считается одной из лучших, если не лучшей полуэмпирической моделью турбулентности, методы, построенные на ее основе, потенциально более точны, по сравнению с методами, основанными на других моделях. Однако обычно полуэмпирические модели, на основе которых строятся гибридные подходы, в том числе и модель SST, не включают в себя механизмов описания ламинарно-турбулентного перехода в пограничном слое. Это может приводить к снижению точности расчета, поскольку в большинстве течений пограничный слой не является турбулентным на всем своем протяжении. Турбулентному участку, как правило, предшествует ламинарный участок той или иной протяженности, который может значительно влиять на характеристики течения в целом. Это влияние проявляется не только при умеренных, но и при высоких числах Рейнольдса, особенно при наличии отрыва от гладкой поверхности. Классическим примером влияния перехода на отрывные течения служит кризис сопротивления плохообтекаемых тел, подробно описанный Л. Г. Лойцянским [4]. Кризис заключается в том, что при повышении числа Рейнольдса присоединенный пограничный слой турбулизуется до отрыва, а это приводит к смещению точки отрыва и резкому падению коэффициента сопротивления.

Таким образом, точность гибридных подходов в некоторых случаях можно повысить путем использования моделей RANS, способных учитывать ламинарно-турбулентный переход (так называемых моделей перехода), в качестве базовой.

К настоящему времени создано большое количество моделей перехода. Большинство из них базируется на решении дифференциальных уравнений переноса вспомогательных величин, таких как перемежаемость  $\gamma$ , критическое число Рейнольдса  $Re_0$ , ламинарная кинетическая энергия  $k_l$  или других. Следует отметить, что существующие модели перехода еще далеки от совершенства, а наиболее точной среди них считается SST  $\gamma$ - $Re_0$  [5], демон-

стрирующая приемлемую точность предсказания положения перехода для широкого круга течений. В рамках этой модели производится решение четырех дифференциальных уравнений (двух для характеристик турбулентности  $k$  и  $\omega$ , а также двух для вспомогательных величин: перемежаемости  $\gamma$  и критического числа Рейнольдса  $Re_\theta$ ). Хотя модель SST  $\gamma$ - $Re_\theta$  за счет возможности описания перехода различных сценариев превосходит по точности базовую модель SST, ее использование связано с повышением вычислительных затрат, необходимых для получения сошедшегося решения, а иногда сходимости итерационного процесса достичь не удается вовсе [6, 7]. Эти проблемы не являются специфическим недостатком модели  $\gamma$ - $Re_\theta$ , они характерны и для других, менее точных дифференциальных моделей перехода. Следует отметить, что эти недостатки «наследуются» гибридными вихререзающими подходами, основанными на использовании дифференциальных моделей перехода в качестве базовых RANS-моделей. Это, как и в случае RANS, может приводить к вычислительным проблемам, которые выражаются в отсутствии сходимости итераций на шаге по времени и увеличении времени расчета.

В последнее время все больше усилий прикладывается к разработке алгебраических моделей перехода, в рамках которых не решаются дополнительные дифференциальные уравнения для характеристик перехода. Эти модели кажутся весьма перспективными, поскольку их отличает от дифференциальных простота в использовании, лучшая сходимость и сравнительно небольшое количество дополнительных вычислений относительно базовых моделей турбулентности, на основе которых они построены. В связи с этим, весьма многообещающим представляется применение в рамках гибридных подходов алгебраических моделей перехода, что и определило направление данной работы.

В настоящей работе предлагается новый гибридный метод DDES SST KD, в котором в качестве базовой модели применяется комбинация алгебраической модели перехода и уравнений переноса  $k$  и  $\omega$  (такой подход используется впервые). Составными частями предлагаемого метода являются метод DDES в сочетании с линейным подсеточным масштабом, адаптированным к слоям смешения (*англ.* Shear Layer Adapted)  $\Delta$ SLA, позволяющим ускорить появление разрешенных турбулентных структур в оторвавшихся слоях смешения, и модель SST, дополненная алгебраическими соотношениями для определения положения ламинарно-турбулентного перехода из модели  $k$ - $\omega$  KD (Kubacki – Dick) [8]. Поскольку в оригинальной работе [8] соотношения модели KD были построены для применения с моделью турбулентности  $k$ - $\omega$  Wilcox [9], они были существенно переработаны для использования совместно с моделью SST (детали см. ниже в разделе «Формулировка предлагаемого метода»). Преимущества предлагаемого подхода перед оригинальным методом DDES SST демонстрируются на примере расчета задач о кризисе сопротивления при обтекании сферы и круглого цилиндра.

Модель и метод были имплементированы в рамках академического конечно-объемного кода NTS (*англ.* Numerical Turbulence Simulation) [10], использующего для решения несжимаемых уравнений движения метод расщепления разностей векторов потоков Роджерса – Квака [11], основанный на комбинации схемы расщепления разностей векторов газодинамических потоков и метода введения искусственной сжимаемости Яненко – Чорина [12]. Код NTS работает на многоблочных структурированных перекрывающихся сетках (технология Chimera), что позволяет применять схемы повышенного порядка аппроксимации и также предоставляет возможность проводить расчеты течений со сложной геометрией.

При проведении расчетов при помощи гибридных RANS-LES-подходов важную роль играет способ аппроксимации невязких составляющих векторов потоков в уравнениях переноса, определяющий диссипативные свойства схемы, требования к которым различны в разных областях течения: в RANS-подобласти схема должна обеспечивать устойчивость решения, а в LES-подобластях необходимо использовать низкодиссипативные схемы, обеспечивающие разрешение мелкомасштабной турбулентности. В настоящей работе для этой цели использовалась гибридная схема [13], реализующая противопоточную схему 3-го порядка точности в RANS-областях и центрально-разностную схему 4-го порядка точности в LES-областях потока.

### Формулировка предлагаемого метода

**Алгебраическая модель перехода SST KD.** Указанная модель базируется на модифицированных уравнениях переноса турбулентных характеристик модели SST [3]:

$$\begin{cases} \frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial(u_k k)}{\partial x_k} = \gamma P_k + (1-\gamma)P_{sep} - \beta^* \omega k + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ (v + \sigma_k v_t) \frac{\partial k}{\partial x_k} \right], \\ \frac{\partial \omega}{\partial x_k} + \frac{\partial(u_k \omega)}{\partial x_k} = P_k - \beta \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ (v + \sigma_\omega v_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_k} \right] + 2(1-F_1) \frac{\sigma_{\omega 2}}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_k} \frac{\partial \omega}{\partial x_k}, \end{cases} \quad (1)$$

где  $k$ ,  $\text{м}^2 \cdot \text{с}^{-2}$ , – кинетическая энергия турбулентности;  $\omega$ ,  $\text{с}^{-1}$ , – удельная скорость диссипации;  $v$ ,  $\text{м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ , – кинематический коэффициент вязкости;  $v_t$ ,  $\text{м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ , – турбулентная вязкость;  $u_k$ ,  $\text{м} \cdot \text{с}^{-1}$ , – компоненты скорости;  $x_k$ ,  $\text{м}$ , – компоненты координат;  $t$ ,  $\text{с}$ , – время. Пояснение к величинам  $P_k$ ,  $P_{sep}$  будет дано ниже (см. ф-лы (8) и (11)).

Функция  $F_1$  определяется выражением

$$F_1 = \tanh(\arg_1^4), \quad \arg_1 = \min \left[ \max \left( \frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega d_w}, \frac{500v}{\omega d_w^2} \right), \frac{2k\omega}{d_w^2 (\nabla k) \cdot (\nabla \omega)} \right], \quad (2)$$

где  $d_w$  – расстояние до стенки, а константы модели SST имеют следующие значения:

$$\begin{aligned} \sigma_k &= F_1 \sigma_{k1} + (1-F_1) \sigma_{k2}, \quad \sigma_{k1} = 0,85, \quad \sigma_{k2} = 1,0, \\ \sigma_\omega &= F_1 \sigma_{\omega 1} + (1-F_1) \sigma_{\omega 2}, \quad \sigma_{\omega 1} = 0,5, \quad \sigma_{\omega 2} = 0,856, \\ \beta &= F_1 \beta_1 + (1-F_1) \beta_2, \quad \beta_1 = 0,075, \quad \beta_2 = 0,0828, \\ \beta^* &= 0,09, \quad \alpha = \beta / \beta^* - \sigma_\omega k^2 / \sqrt{\beta^*}. \end{aligned} \quad (3)$$

Уравнения (1) имеют три отличия от уравнений оригинальной модели SST, введенные для ее использования совместно с моделью перехода KD, в рамках которой турбулентная вязкость  $v_t$  разделяется на две составляющие: мелкомасштабную  $v_s$  и крупномасштабную  $v_l$ . Таким образом,

$$v_t = v_s + v_l. \quad (4)$$

$$v_s = a_s k_s / \max[a_s \omega, F_2 S], \quad v_l = a_l k_l / \max[a_l \omega, F_2 S];$$

здесь

$$k_s = f_{SS} k; \quad k_l = k - k_s; \quad f_{SS} = \exp \left[ - \left( \frac{C_{SS} v \Omega}{k} \right)^4 \right]; \quad (5)$$

$$C_{SS} = C_S (1,0 + C_A f_W \Psi); \quad f_W = 1 - \tanh \left( \frac{k}{C_W v \omega} \right); \quad \Psi = \tanh \left( \frac{-\Omega(S - \Omega)}{C_\Psi (\beta^* \omega)^2} \right); \quad (6)$$

$$F_2 = \tanh(\arg_2^2), \quad \arg_2 = \max \left( 2\sqrt{k} / (0,09 \omega d_w), 500v / (d_w^2 \omega) \right) \quad (7)$$

( $S$ ,  $\Omega$  – модули тензоров скоростей деформаций и завихренности, соответственно).

Упомянутые выше отличия состоят в следующем.

1. Генерация кинетической энергии турбулентности  $P_k$  рассчитывается при помощи мелкомасштабных вязкости и кинетической энергии:

$$P_k = \min\left(-\overline{u'_i u'_j} \partial U_i / \partial x_j, 10 \cdot \beta^* k \omega\right), \quad (8)$$

$$\overline{u'_i u'_j} = (2/3) k_s \delta_{ij} - 2\nu_s S_{ij}. \quad (9)$$

2. Генерационное слагаемое в уравнении (1) для  $k$  умножается на коэффициент перемежаемости  $\gamma$ :

$$P_k \rightarrow \gamma P_k. \quad (10)$$

3. Для описания перехода к турбулентности в оторвавшемся ламинарном пограничном слое, в уравнение (1) для  $k$  добавляется дополнительное слагаемое  $(1 - \gamma)P_{sep}$ , где величина  $P_{sep}$ , позаимствованная в упрощенном виде из дифференциальной модели [14], рассчитывается по следующим формулам:

$$P_{sep} = C_{sep} F_{sep} \nu S^2; \quad (11)$$

$$F_{sep} = \min\left(\max\left(\frac{R_V}{2,2A_V} - 1, 0, 0, 0\right), 1, 0\right); \quad R_V = \frac{d_w^2 S}{\nu}. \quad (12)$$

Коэффициент перемежаемости, входящий в модель, определяется следующим выражением:

$$\gamma = \min\left(\max\left(\frac{k}{\nu A_\gamma \Omega} - 1, 0, 0, 0\right), 1, 0\right). \quad (13)$$

Основное отличие алгебраических соотношений, используемых в предлагаемом методе, от оригинальной модели KD [8] состоит в изменении критерия в формулах (5) для  $f_{SS}$  и (13) для перемежаемости  $\gamma$ . Кроме того, константы модели были оптимизированы на задачах о переходном пограничном слое с градиентом давления серии ТЗС [15]:

$$\begin{aligned} A_\gamma &= 1,3, \quad C_S = 2,0, \quad C_A = 1,0, \quad C_\psi = 10,0, \quad C_W = 5,0, \\ C_{sep} &= 2,0, \quad A_V = 550,0, \quad a_1 = 0,31, \quad a_2 = 0,45. \end{aligned} \quad (14)$$

Тестирование полученной модели SST KD в режиме RANS на двумерных задачах, в которых существенную роль играет ламинарно-турбулентный переход, показали, что предложенная модель существенно превосходит по точности оригинальную модель  $k$ - $\omega$  KD [8].

**Метод DDES SST KD.** Предложенная алгебраическая модель перехода SST KD вместе с методом DDES [2] послужили основой для метода DDES SST KD, предназначенного для расчета отрывных течений при наличии ламинарно-турбулентного перехода в присоединенном пограничном слое. В предлагаемом методе используется версия DDES, использующая линейный подсеточный масштаб, адаптированный к слоям смешения (DDES  $\Delta$ SLA [16]). Данная модификация подсеточного масштаба направлена на ускорение перехода к развитой трехмерной турбулентности на начальных участках слоев смешения и позволяет существенно повысить точность расчета отрывных течений без увеличения расчетной сетки и, как следствие, вычислительных затрат.

В модель перехода для работы в рамках вихререзающего метода внесена дополнительная модификация, блокирующая использование модели перехода вне пограничного слоя:

$$\gamma = 1,0 \text{ при } F_1 < 0,9, \quad (15)$$

где  $F_1$  – функция модели SST (см. формулу (2)).

**Применение разработанного подхода для предсказания кризиса сопротивления**

**Кризис сопротивления при обтекании цилиндра.** Рассматривается нестационарное поперечное обтекание круглого цилиндра несжимаемой жидкостью в диапазоне значений числа Рейнольдса от  $5,0 \cdot 10^4$  до  $1,2 \cdot 10^6$ ; число построено по диаметру  $D_c$  цилиндра и скорости набегающего потока  $U_0$  ( $Re = D_c U_0 / \nu$ ).

Такой диапазон полностью охватывает кризис сопротивления, который наблюдается в области значений  $1,3 \cdot 10^5 < Re < 5,0 \cdot 10^5$  [17].

Расчетная область представляет собой цилиндр с радиусом  $25D_c$ , где  $D_c$  – диаметр обтекаемого цилиндра, и центром в точке  $(x, y) = (0,0, 0,0)$ . Длина расчетной области в поперечном направлении  $z$  составляет  $L_z = 5 D_c$ , что больше величины  $\pi D_c$ , обычно используемой в таких расчетах (см., например, работы [18, 19]), и не должно негативно влиять на результат.

В связи с тем, что в модели SST кинетическая энергия турбулентности в однородном турбулентном течении убывает (диссипирует), обычно для того, чтобы турбулентные характеристики в окрестности обтекаемого тела соответствовали неким необходимым значениям, граничные условия для уравнений модели турбулентности необходимо скорректировать. Такие значения на входе в расчетную область можно получить из аналитического решения уравнений модели SST в однородном потоке по следующим формулам:

Таблица 1  
Граничные условия для характеристик турбулентности в задаче об обтекании цилиндра

Re, $10^4$	$\nu_t/\nu$	Tu, %
5,0	0,30	0,40
8,0	0,30	0,55
10	0,36	0,60
13	0,45	0,64
17	0,56	0,73
20	0,65	0,77
25	0,79	0,95
30	0,94	1,00
40	1,25	1,02
50	1,55	1,15
70	2,16	1,35
90	2,75	1,55
120	3,65	1,70

Обозначения: Re – число Рейнольдса  $\nu_t$  – турбулентная вязкость,  $\nu$  – кинематический коэффициент вязкости, Tu – интенсивность турбулентности.

$$k = c_2 (\beta x + c_1)^{-\frac{\beta^*}{\beta}}, \quad (16)$$

$$\omega = \frac{1}{\beta x + c_1}, \quad (17)$$

где  $x$  – координата вдоль течения в свободном потоке;  $c_1, c_2$  – константы интегрирования, получаемые из граничных значений; значения констант  $\beta$  и  $\beta^*$  приведены выше.

При достаточно больших продольных размерах расчетной области, уравнения не имеют конечного аналитического решения. В таких случаях характеристики турбулентности «замораживаются» до определенной точки вверх по потоку от тела, затем «отпускаются» и диссипируют до необходимых значений.

В данной задаче для обеспечения интенсивности турбулентности  $Tu = 0,45\%$  ( $Tu = 100[(2/3)k]^{1/2}/U_0$ ) в окрестности среднего сечения цилиндра характеристики турбулентности замораживались до сечения  $x = -2D_c$ , а их входные значения вычислялись по формулам (16), (17) (табл. 1). На выходной границе задавалось постоянное давление, а на поверхности цилиндра использовались условия прилипания и непроницаемости  $u_w = v_w = w_w = 0$ . Для турбулентных характеристик на стенке задавались стандартные для модели SST условия:

$$k_w = 0, \quad \omega_w = 10 \frac{6\nu}{\beta_1 \Delta_1^2},$$

где  $\Delta_1$  – величина первого пристеночного шага сетки.

Наконец, в поперечном направлении использовались периодические граничные условия.

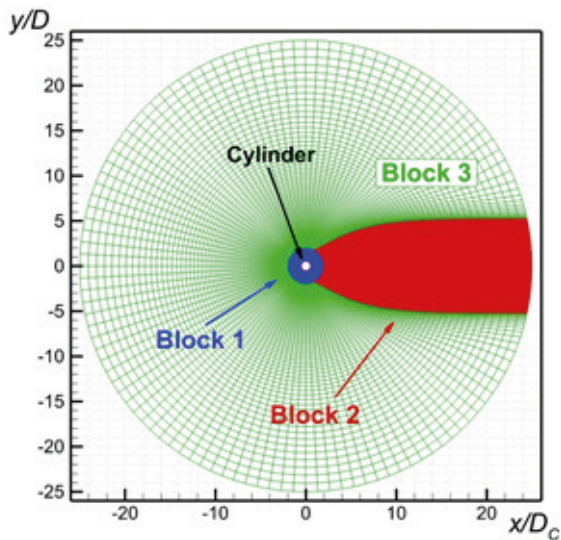


Рис. 1. Три блока расчетных сеток (показаны разными цветами) в задаче об обтекании круглого цилиндра (сечение  $z = 0$ )

Расчетные сетки состояли из трех расчетных блоков (рис. 1). 1-й блок содержал измельченную сетку для расчета высоких градиентов величин вблизи поверхности цилиндра, 2-й был измельчен для расчета следа за цилиндром. На 3-й блок приходилось однородное невозмущенное течение без нестационарных пульсаций, и он содержал самую грубую сетку.

Для расчетов при различных диапазонах чисел Рейнольдса, характеризующихся величиной первого пристеночного шага, всего было построено три сетки: I, II и III (табл. 2).

Шаг по времени  $\Delta t$  был равен  $5 \cdot 10^{-3} \cdot D_c / U_0$ , что обеспечивало значение критерия Куранта – Фридрихса – Леви (CFL), меньшее единицы в отрывной зоне, в следе за цилиндром. Осреднение решения проводилось после установления течения на временных промежутках длительностью порядка  $50 \cdot D_c / U_0$ .

На рис. 2 приведено сравнение полученных расчетных зависимостей коэффициента сопротивления  $C_D = F_x / [(5/2)\rho U_0^2]$  ( $F_x$  – сила сопротивления, действующая на цилиндр,  $\rho$  – плотность) от числа Рейнольдса с экспериментальными данными [20 – 26].

Данное течение наглядно демонстрирует преимущество предложенного гибридного метода над оригинальным подходом DDES SST. Видно, что благодаря использованию модели перехода расчетные значения коэффициента сопротивления оказываются ближе к экспериментальным значениям. Однако полного совпадения с экспериментальными данными достичь не удалось; в частности, снижение расчетного коэффициента сопротивления в окрестности критического числа Рейнольдса происходит существенно медленнее, чем в экспериментальных зависимостях. Причины такого поведения требуют дальнейшего изучения и выходят за рамки данной статьи.

Таблица 2

**Параметры расчетных сеток в задаче об обтекании цилиндра**

№	Диапазон Re, $10^4$	Размер блока			Общее количество ячеек
		1-го	2-го	3-го	
I	5,0 – 20	512×161×60	200×184×256	131×101×52	56, 270, 732
II	25 – 60	512×191×560	200×184×256	131×101×52	64, 872, 332
III	70 – 120	512×221×560	200×184×256	131×101×52	73, 473, 932

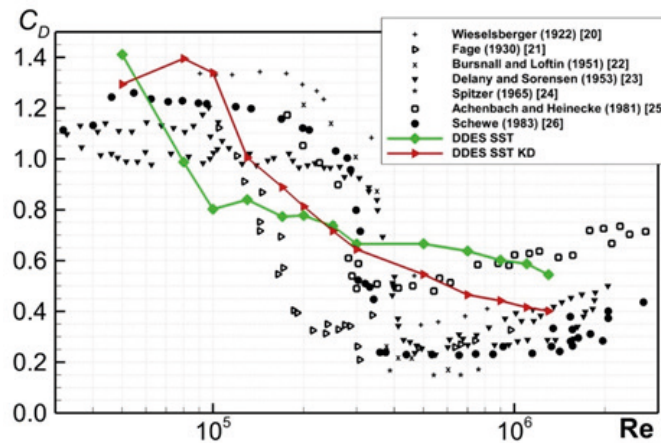


Рис. 2. Сравнение расчетных зависимостей (сплошные линии) коэффициента сопротивления круглого цилиндра от числа Рейнольдса с экспериментальными данными (символы) [20 – 26]

**Кризис сопротивления при обтекании сферы.** Рассматривается нестационарное обтекание сферы несжимаемой жидкостью в диапазоне значений числа Рейнольдса от  $5,0 \cdot 10^4$  до  $4,0 \cdot 10^5$ , построенного по диаметру  $D_s$  сферы и скорости набегающего потока  $U_0$  ( $Re = D_s U_0 / \nu$ ).

Расчетная область представляет собой сферу с радиусом  $20D_s$ . Граничные условия задавались так же, как и при решении задачи об обтекании цилиндра. Единственное отличие состояло в выборе входных значений турбулентных характеристик: они подбирались с условием, обеспечивающим интенсивность турбулентности 0,45 % в окрестности среднего сечения сферы (табл. 3).

Таблица 3

**Граничные условия для характеристик турбулентности в задаче об обтекании сферы**

$Re, 10^4$	$v_t/\nu$	$Tu, \%$
5,0	0,35	1,2
10	0,70	1,2
20	1,40	1,4
40	2,8	1,6
60	4,2	1,7
100	7,0	1,9

Обозначения величин идентичны приведенным в табл. 1

Общее количество ячеек сетки составило около 16 млн. Серия предварительных расчетов, проведенных методами DDES SST и DDES SST KD при  $Re = 1,0 \cdot 10^5$ , показала, что с измельчением сетки в 1,5 раза по каждому направлению (размер этой сетки составляет около 46 млн.) осредненное по времени решение не изменяется.

Шаг по времени был взят равным  $\Delta t = 5 \cdot 10^{-3} D_s / U_0$ , что обеспечивает, как и в задаче о цилиндре, значение числа Куранта  $CFL < 1$  в отрывной зоне за сферой. Дополнительные расчеты показали, что с измельчением шага по времени осредненное решение не меняется. Осреднение решения проводилось после установления течения на временных промежутках длительностью порядка  $50 \cdot D_s / U_0$ .

Расчетная сетка состояла из шести блоков (рис. 3). Блоки с 1-го по 3-й прилегали к поверхности сферы и характеризуются мелкими шагами сетки (на окружность сферы приходилось 514 ячеек), а во внешних блоках (с 4-го по 6-й) шаги сетки были примерно в 3 раза больше. 1-й и 4-й блоки имеют цилиндрическую форму и характеризуются осевой симметрией относительно оси  $x$  (рис. 3, *b*). Остальные сеточные блоки имеют форму усеченной пирамиды и позволяют избежать необоснованного сгущения в окрестности оси симметрии 1-го и 4-го блоков (рис. 4).

Шаги сетки были измельчены к поверхности сферы и в области следа. Как и при решении задачи об обтекании цилиндра, была построена серия сеток для расчетов при различных числах Рейнольдса, отличающихся первым пристенным шагом. Об-

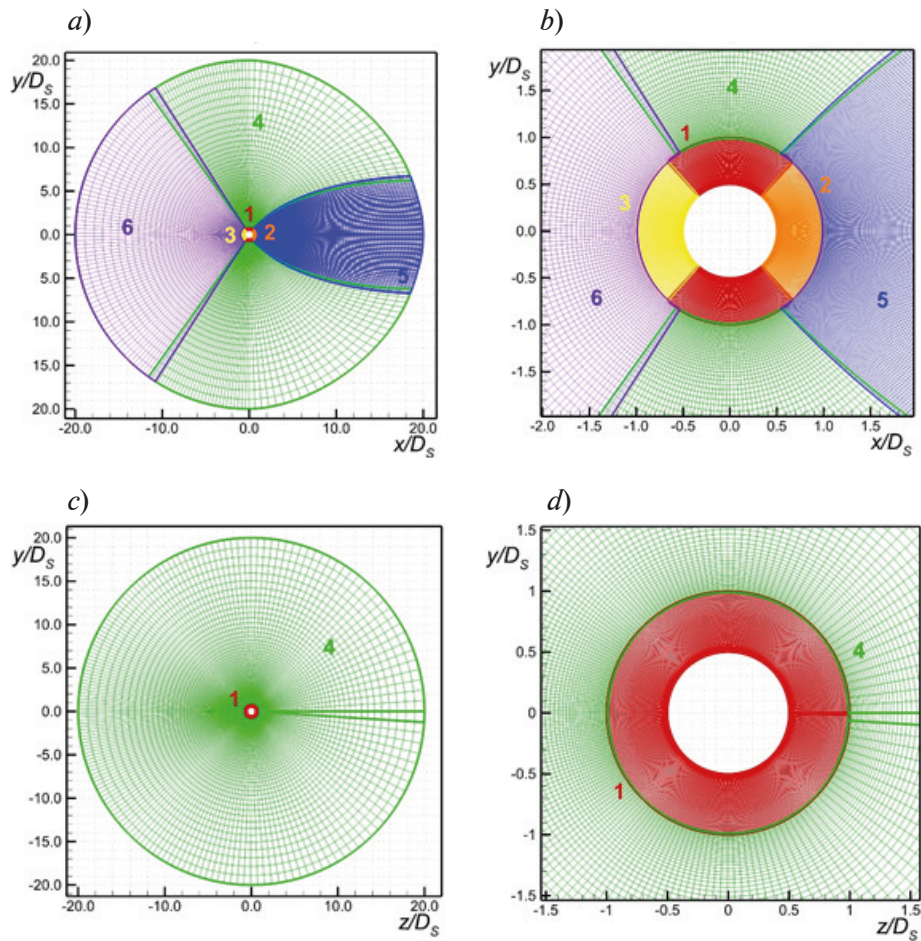


Рис. 3. Блоки расчетных сеток (пронумерованы и показаны разными цветами) в задаче об обтекании сферы. Приведены сечения  $z = 0$  (a, b) и  $x = 0$  (c, d); b, d – увеличенные изображения центральных областей графиков a и c соответственно

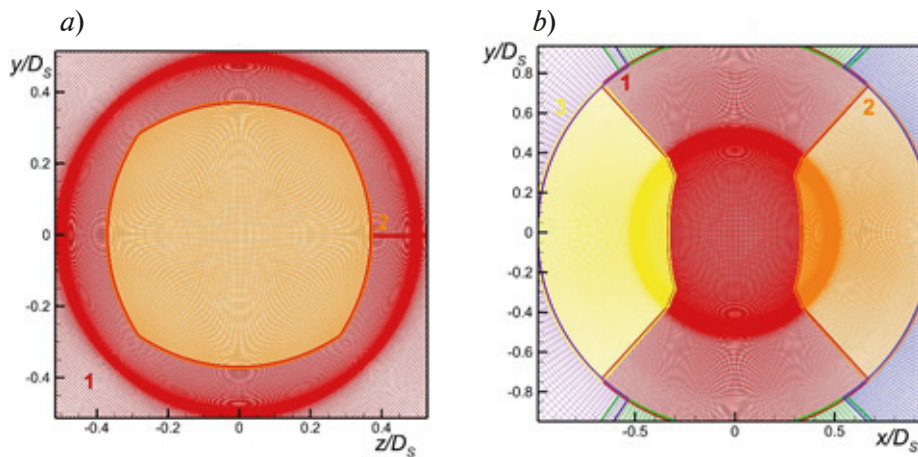


Рис. 4. Расчетные сетки в сечениях  $x = 0$  (a) и  $z = 0$  (b) в задаче об обтекании сферы. Поверхностные сетки спроецированы на соответствующие сечения

На рис. 5 приведено сравнение расчетных зависимостей коэффициента сопротивления  $C_D = F_x / [(1/2)\rho U_0^2 \cdot (1/4)\pi D_s^2]$  от числа Рейнольдса с экспериментальными данными ( $F_x$  – сила сопротивления, действующая на сферу).

Результаты расчетов сравнивались с экспериментальными данными, представленными в работах [27 – 28] и эмпирическими корреляциями [29].



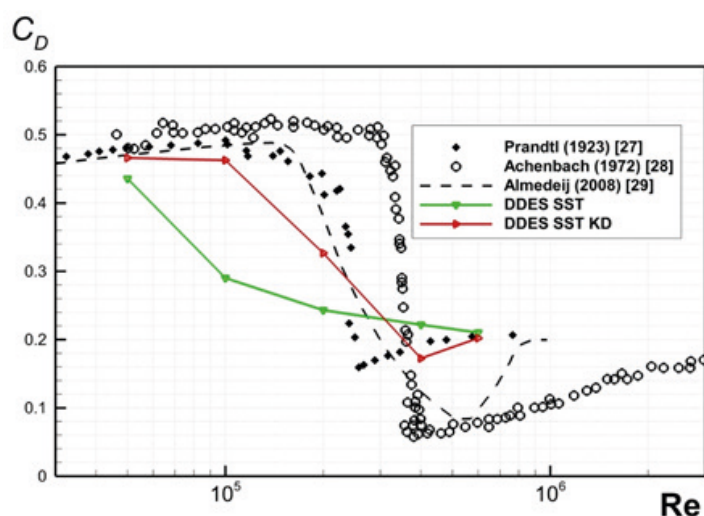


Рис. 5. Сравнение расчетных зависимостей (сплошные линии) коэффициента сопротивления сферы от числа Рейнольдса с экспериментальными данными (символы) [27 – 28] и эмпирическими корреляциями [29]

В первую очередь следует отметить, что использование предлагаемого метода позволяет значительно повысить точность расчета для всех рассмотренных значений числа Рейнольдса. Оригинальный метод DDES SST практически не предсказывает снижения коэффициента сопротивления, связанного с кризисом сопротивления по мере роста числа Рейнольдса в области значений  $1 \cdot 10^5 < Re < 4 \cdot 10^5$ , тогда как предложенный метод позволяет его качественное описание. В то же время наблюдается некое количественное различие результатов расчета по предлагаемому методу с экспериментальными данными, которое проявляется, в первую очередь (как и в задаче об обтекании цилиндра), в более медленном падении расчетного коэффициента сопротивления в окрестности критического значения числа Рейнольдса.

### Заключение

Предложен новый глобальный гибридный вихререзающий подход DDS SST KD, предназначенный для расчета отрывных течений при наличии перехода в присоединенном пограничном слое. Подход базируется на предложенной авторами модели перехода, основанной на полуэмпирической модели турбулентности SST и алгебраической модели перехода  $k-\omega$  KD.

На примерах задач об обтекании цилиндра и сферы в широком диапазоне чисел Рейнольдса продемонстрировано преимущество предложенного подхода над оригинальным методом DDES SST.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Гарбарук А. В.** Современные подходы к моделированию турбулентности. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2016. 233 с.
2. **Spalart P. R., Deck S., Shur M. L., Squires K., Strelets M., Travin A.** A new version of Detached-Eddy Simulation, resistant to ambiguous grid densities // *Theoretical Computational Fluid Dynamics*. 2006. Vol. 20. No. 3. Pp. 181–195.
3. **Menter F. R., Kuntz M., Langtry R.** Ten years of industrial experience with the SST turbulence model // *Heat and Mass Transfer*. 2003. Vol. 4. January. Pp. 1–9.
4. **Лойцянский Л. Г.** Механика жидкости и газа. Москва-Ленинград: Гостехиздат, 1950. 676 с.
5. **Langtry R. B., Menter F. R.** Correlation-based transition modeling for unstructured parallelized computational fluid dynamics codes // *AIAA Journal (American Institute of Aeronautics and Astronautics)*. 2009. Vol. 47. No. 12. Pp. 2894–2906.

6. **Wauters J., Degroote J.** On the study of transitional low-Reynolds number flows over airfoils operating at high angles of attack and their prediction using transitional turbulence models // *Progress in Aerospace Sciences*. 2018. Vol. 103. November. Pp. 52–68.
7. **Lopes R., Eça L., Vaz G.** On the numerical behavior of RANS-based transition models // *Journal of Fluids Engineering*. 2020. Vol. 142. No. 5. P. 051503.
8. **Kubacki S., Dick E.** An algebraic model for bypass transition in turbomachinery boundary layer flows // *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 2016. Vol. 58. April. Pp. 68–83.
9. **Wilcox D. C.** Formulation of the  $k-\omega$  turbulence model revisited // *AIAA Journal*. (American Institute of Aeronautics and Astronautics). 2008. Vol. 46. No. 11. Pp. 2823–2838.
10. **Shur M., Strelets M., Travin A.** High-order implicit multi-block Navier – Stokes code: Ten-years experience of application to RANS/DES/LES/DNS of turbulent flows (invited lecture) // *Proceeding of the 7th Symposium on Overset Composite Grids and Solution Technology*. October 5–7, Huntington Beach, USA. 2004.
11. **Rogers S., Kwak D.** An upwind differencing scheme for the time-accurate incompressible Navier – Stokes equations // *Proceeding of the 6th Applied Aerodynamics Conference*. Williamsburg, USA: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1988, November. Report No. NASA-TM-101051.
12. **Chorin A. J.** A numerical method for solving incompressible viscous flow problems // *Journal of Computational Physics*. 1967. Vol. 2. No. 1. Pp. 12–26.
13. **Travin A., Shur M., Strelets M., Spalart P. R.** Physical and numerical upgrades in the Detached-Eddy Simulation of complex turbulent flows // *Advances in LES of Complex Flows*. Vol. 65. Edited by Friedrich R., Rodi W. Dordrecht: Springer Netherlands, 2002. Pp. 239–254.
14. **Menter F. R., Smirnov P. E., Liu T., Avancha R.** A one-equation local correlation-based transition model // *Flow, Turbulence and Combustion*. 2015. Vol. 95. No. 4. Pp. 583–619.
15. **Savill A. M.** Evaluating turbulence model predictions of transition: An ERCOFTAC special interest group project // *Applied Scientific Research*. 1993. Vol. 51. No. 1–2. Pp. 555–562.
16. **Probst A., Schwamborn D., Garbaruk A., Guseva E., Shur M., Strelets M., Travin A.** Evaluation of grey area mitigation tools within zonal and non-zonal RANS-LES approaches in flows with pressure induced separation // *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 2017. Vol. 68. December. Pp. 237–247.
17. **Smith A. M. O., Gamberoni N.** Transition, pressure gradient and stability theory. Technical Report ES-26388. Santa Monica, California, USA: Douglas Aircraft Company, El Segundo Division, 1956. 59 p.
18. **Pereira F. S., Vaz G., Eça L.** An assessment of scale-resolving simulation models for the flow around a circular cylinder // *Proceeding of the Eighth International Symposium on Turbulence Heat and Mass Transfer (THMT-15)*, September 15–18. Sarajevo, Bosnia and Herzegovina: Begellhouse, 2015. Pp. 295–298.
19. **Pereira F. S., Vaz G., Eça L.** Flow past a circular cylinder: A comparison between RANS and hybrid turbulence models for a low Reynolds number // *Proceeding of the ASME 2015: 34th International Conference on Ocean, Offshore and Arctic Engineering*, May 31 – June 5, 2015, St. John's, Newfoundland, Canada. Vol. 2: CFD and VIV. American Society of Mechanical Engineers, 2015. Paper No. OMAE2015-41235, V002T08A006 (11 p.).
20. **Wieselsberger C.** New data on the laws of fluid resistance. Tech. Rep. Number NACA-TN-84. Work of the US Gov. Public Use Permitted, 1922, March 1. ID 19930080855.pdf.
21. **Fage A.** The drag of circular cylinders and spheres at high values of Reynolds number // *Tech. Rep., Reports & Memoranda*, No. 1370. London: Aeronautical Research Committee, May, 1930. 12 p.
22. **Burns W., Loftin L. K. Jr.** Experimental investigation of the pressure distribution about a yawed circular cylinder in the critical Reynolds number range // *Tech. Rep. NACA-TN-2463*. Washington: National Advisory Committee for Aeronautics (NACA), September, 1951. 34 p.
23. **Delany N., Sorensen N.** Low-speed drag of cylinders of various shapes // *Tech. Rep. NACA TN-3038*, Washington: National Advisory Committee for Aeronautics (NACA), 1953. 36 p.
24. **Spitzer R.** Measurements of unsteady pressures and wake fluctuations for flow over a cylinder at supercritical Reynolds number. Ph.D. thesis, Pasadena (USA): California Institute of Technology, 1965. 93 p.
25. **Achenbach E., Heinecke E.** On vortex shedding from smooth and rough cylinders in the range

of Reynolds numbers  $6 \times 10^3$  to  $5 \times 10^6$  // *Journal of Fluid Mechanics*. 1981. Vol. 109. August. Pp. 239–251.

26. **Schewe G.** On the force fluctuations acting on a circular cylinder in crossflow from subcritical up to transcritical Reynolds numbers // *Journal of Fluid Mechanics*. 1983. Vol. 133. Pp. 265–285.

27. **Prandtl L.** *Ergebnisse der Aerodynamischen Versuchsanstalt zu Göttingen. II. Lieferung. Der induzierte Widerstand von Mehrdeckern*, 1923. S. 9–16.

28. **Achenbach E.** Experiments on the flow past spheres at very high Reynolds numbers // *Journal of Fluid Mechanics*. 1972. Vol. 54. No. 3. Pp. 565–575.

29. **Almedeij J.** Drag coefficient of flow around a sphere: Matching asymptotically the wide trend // *Powder Technology*. 2008. Vol. 186. No. 3. Pp. 218–223.

## REFERENCES

1. **Garbaruk A. V.**, *Sovremennyye podkhody k modelirovaniyu turbulentnosti* [Modern approaches to the turbulence simulation], Polytechnic University Publishing, St. Petersburg, 2016.

2. **Spalart P. R., Deck S., Shur M. L., et al.**, A new version of Detached-Eddy Simulation, resistant to ambiguous grid densities, *Theoret. Comput. Fluid Dynamics*. 20 (3) (2006) 181–195.

3. **Menter F. R., Kuntz M., Langtry R.**, Ten years of industrial experience with the SST turbulence model, *Heat & Mass Transfer*. 2003. Vol. 4 (January) (2003) 1–9.

4. **Loytsyanskiy L.G.**, *Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluids and gas mechanics], Gostechizdat, Moscow-Leningrad, 1950 (in Russian).

5. **Langtry R. B., Menter F. R.**, Correlation-based transition modeling for unstructured parallelized computational fluid dynamics codes, *AIAA Journal*. 47 (12) (2009) 2894–2906.

6. **Wauters J., Degroote J.**, On the study of transitional low-Reynolds number flows over airfoils operating at high angles of attack and their prediction using transitional turbulence models, *Prog. Aerosp. Sci.* 103 (November) (2018) 52–68.

7. **Lopes R., Eça L., Vaz G.**, On the numerical behavior of RANS-based transition models, *J. Fluids Eng.* 142 (5) (2020) 051503.

8. **Kubacki S., Dick E.**, An algebraic model for bypass transition in turbomachinery boundary layer flows, *Int. J. Heat Fluid Flow*. 58 (April) (2016) 68–83.

9. **Wilcox D. C.**, Formulation of the  $k-\omega$  turbulence model revisited, *AIAA Journal*. 46 (11) (2008) 2823–2838.

10. **Shur M., Strelets M., Travin A.**, High-order implicit multi-block Navier – Stokes code: Ten-years experience of application to RANS/DES/LES/DNS of turbulent flows (invited lecture), In: *Proceeding of the 7th Symposium on Overset Composite Grids and Solution Technology*, Oct. 5–7, Huntington Beach, USA, 2004.

11. **Rogers S., Kwak D.**, An upwind differencing scheme for the time-accurate incompressible Navier – Stokes equations, In: *Proceeding of the 6th Applied Aerodynamics Conference*, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Williamsburg, USA, 1988, November, Rep. No. NASA-TM-101051.

12. **Chorin A. J.**, A numerical method for solving incompressible viscous flow problems, *J. Comput. Phys.* 2 (1) (1967) 12–26.

13. **Travin A., Shur M., Strelets M., Spalart P. R.**, Physical and numerical upgrades in the Detached-Eddy Simulation of complex turbulent flows, In book: *Advances in LES of Complex Flows*, Vol. 65. Ed. by Friedrich R., Rodi W., Springer Netherlands, Dordrecht (2002) 239–254.

14. **Menter F. R., Smirnov P. E., Liu T., Avancha R.**, A one-equation local correlation-based transition model, *Flow, Turb. Combust.* 95 (4) (2015) 583–619.

15. **Savill A. M.**, Evaluating turbulence model predictions of transition: An ERCOFTAC special interest group project, *Appl. Sci. Res.* 51 (1–2) (1993) 555–562.

16. **Probst A., Schwaborn D., Garbaruk A., et al.**, Evaluation of grey area mitigation tools within zonal and non-zonal RANS-LES approaches in flows with pressure induced separation, *Int. J. Heat Fluid Flow*. 68 (December) (2017) 237–247.

17. **Smith A. M. O., Gamberoni N.**, *Transition, pressure gradient and stability theory*, Techn. Rep. ES-26388, Douglas Aircraft Company, El Segundo Division, Santa Monica, California, USA, 1956.

18. **Pereira F. S., Vaz G., Eça L.**, An assessment of scale-resolving simulation models for the flow around a circular cylinder, In: *Proc. Eighth Int. Symp. Turbulence, Heat and Mass Transfer*

(ТНМТ-15), Sept. 15–18, Begellhouse, Sarajevo, Bosnia and Herzegovina (2015) 295–298.

19. **Pereira F. S., Vaz G., Eça L.**, Flow past a circular cylinder: A comparison between RANS and hybrid turbulence models for a low Reynolds number, In: Proc. ASME 2015: 34th Int. Conf. Ocean, Offshore & Arctic Eng., May 31–June 5, 2015, St. John's, Newfoundland, Canada. Vol. 2: CFD and VIV, ASME, 2015. P. No. OMAE2015-41235, V002T08A006.

20. **Wieselsberger C.**, New data on the laws of fluid resistance, Tech. Rep. Number NACA-TN-84, NACA, 1922, March 1, ID 19930080855.pdf.

21. **Fage A.**, The drag of circular cylinders and spheres at high values of Reynolds number (Tech. Rep.), Reports & Memoranda, No. 1370, Aeronautical Research Committee, London, May, 1930.

22. **Burns W., Loftin L. K. Jr.**, Experimental investigation of the pressure distribution about a yawed circular cylinder in the critical Reynolds number range, Tech. Rep. NACA-TN-2463, NACA, Washington, September, 1951.

23. **Delany N., Sorensen N.**, Low-speed drag of cylinders of various shapes // Tech. Rep. NACA TN-3038, NACA, Washington, 1953.

24. **Spitzer R.**, Measurements of unsteady pressures and wake fluctuations for flow over a cylinder at supercritical Reynolds number, Ph.D. thesis, California Institute of Technology, Pasadena, USA, 1965.

25. **Achenbach E., Heinecke E.**, On vortex shedding from smooth and rough cylinders in the range of Reynolds numbers  $6 \times 10^3$  to  $5 \times 10^6$ , J. Fluid Mech. 109 (August) (1981) 239–251.

26. **Schewe G.**, On the force fluctuations acting on a circular cylinder in crossflow from subcritical up to transcritical Reynolds numbers, J. Fluid Mech. 133 (1983) 265–285.

27. **Prandtl L.**, Ergebnisse der Aerodynamischen Versuchsanstalt zu Göttingen, II. Lieferung. Der induzierte Widerstand von Mehrdeckern (1923) 9–16.

28. **Achenbach E.**, Experiments on the flow past spheres at very high Reynolds numbers, J. Fluid Mech. 54 (3) (1972) 565–575.

29. **Almedeij J.**, Drag coefficient of flow around a sphere: Matching asymptotically the wide trend, Powder Technol. 186 (3) (2008) 218–223.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**СТАБНИКОВ Андрей Сергеевич** – аспирант высшей школы математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
an.stabnikov@gmail.com  
ORCID: 0000-0001-7011-6197

**ГАРБАРУК Андрей Викторович** – доктор физико-математических наук, доцент высшей школы математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
agarbaruk@mail.ru  
ORCID: 0000-0002-2775-9864

## THE AUTHORS

**STABNIKOV Andrey S.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
an.stabnikov@gmail.com  
ORCID: 0000-0001-7011-6197



**GARBARUK Andrey V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

agarbaruk@cfд.spbstu.ru

ORCID: 0000-0002-2775-9864

*Статья поступила в редакцию 29.09.2021. Одобрена после рецензирования 29.12.2021.  
Принята 10.01.2022.*

*Received 29.09.2021. Approved after reviewing 29.12.2021. Accepted 10.01.2022.*

# Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

Научная статья

УДК 538.9

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15103>

## КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ КАЛИЕВО-ТИТАНОСИЛИКАТНОГО СТЕКЛА ПРИ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕЛЬЕФНОГО АНОДА

И. В. Решетов<sup>1,4</sup> ✉, А. В. Редьков<sup>1,2</sup>, В. Г. Мелехин<sup>3</sup>,  
В. В. Журихина<sup>1,4</sup>, А. А. Липовский<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский академический университет имени  
Ж. И. Алферова РАН, Санкт-Петербург, Россия;

<sup>2</sup> Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия;

<sup>3</sup> Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия;

<sup>4</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Россия

✉ [reshetov\\_iv@spbstu.ru](mailto:reshetov_iv@spbstu.ru)

**Аннотация.** Работа посвящена детальному анализу процесса формирования кристаллических структур в стекле системы  $K_2O-TiO_2-SiO_2$  при полинге с использованием рельефного анода и температуры нагрева ниже температуры стеклования. Кристаллизация стекла при указанных условиях изучена методами комбинационного рассеяния света и механической профилометрии. Обнаружено, что в областях механического контакта электрода со стеклом (выступы профиля на электроде) стекло остается прозрачным без признаков кристаллизации, тогда как в остальных областях, где между электродом и стеклом существует воздушный промежуток, поверхность становится матовой (показано, что это вызвано образованием слоя нанокристаллического анатаза). Между матовой и прозрачной областями, т. е. на краях областей контакта с электродом, формируется переходная область шириной несколько десятков микрон и высотой несколько микрон. Обсуждается механизм образования кристаллической фазы и рельефа.

**Ключевые слова:** стекло, термическая поляризация, профилированный анод, кристаллизация, комбинационное рассеяние света

**Финансирование:** работа выполнена в рамках Государственного задания «Исследование структур микро- и нанопластики, формируемых в аморфных диэлектриках под действием сильных полей» (код темы FSRM -2020-001).

**Для цитирования:** Решетов И. В., Редьков А. В., Мелехин В. Г., Журихина В. В., Липовский А. А. Кристаллизация калиево-титаносиликатного стекла при термической поляризации с использованием рельефного анода // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 1. С 30–40. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15103>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15103>

## CRYSTALLIZATION OF POTASSIUM TITANOSILICATE GLASS UNDER THERMAL POLING USING A PROFILED ANODE

I. V. Reshetov<sup>1,4</sup> ✉, A. V. Redkov<sup>1,2</sup>, V. G. Melehin<sup>3</sup>,V. V. Zhurikhina<sup>1,4</sup>, A. A. Lipovskii<sup>1,4</sup><sup>1</sup> Alferov University, St. Petersburg, Russia;<sup>2</sup> Institute of Problems of Mechanical Engineering of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia;<sup>3</sup> Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia;<sup>4</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia✉ [reshetov\\_iv@spbstu.ru](mailto:reshetov_iv@spbstu.ru)

**Abstract.** This paper is devoted to in-depth study of the crystallization process in the  $K_2O$ - $TiO_2$ - $SiO_2$  glass under thermal poling using a profiled anode and heating temperature below the glass transition temperature. The crystallization was investigated by Raman scattering and mechanical profilometry at the specified conditions. It was found that the glass remained transparent without crystallization signs on the electrode-glass contact surface (profile peaks at the electrode) whereas the glass surface became frosted over other areas where there was an air gap between the electrode and glass (it was shown to be caused by the formation of a nanocrystalline anatase layer). A transition zone a few tens of micrometers wide and a few micrometers high was formed between frosted and transparent glass areas, i. e. at the edges of the electrode-glass contact surface. The mechanism of formation of the crystalline phase and relief was discussed.

**Keywords:** glass, thermal poling, profiled anode, crystallization, Raman scattering

**Funding:** the work was done within the framework of a State assignment “Studies in micro- and nanophotonics structures formed in the amorphous dielectrics under the action of strong fields” (subject code FSRM -2020-001).

**For citation:** Reshetov I. V., Redkov A. V., Melehin V. G., Zhurikhina V. V., Lipovskii A. A., Crystallization of potassium titanosilicate glass under thermal poling using a profiled anode, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (1) (2022) 30–40. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15103>

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

### Введение

Процедуру термической поляризации стекла в электрическом поле обычно называют термическим полингом. Такой полинг заключается в нагреве стеклянной пластинки толщиной около одного миллиметра (помещена между двумя металлическими электродами или другими проводниками первого рода) до температуры, достаточной для активации заметной проводимости, с последующим приложением к электродам постоянного напряжения порядка нескольких сотен вольт. Для обычных щелочных силикатных стекол температура нагрева составляет 250 – 300 °С, что значительно ниже температуры стеклования, равной приблизительно 550 °С. Миграция наиболее подвижных, положительно заряженных катионов (ионы щелочных металлов), индуцированная электрическим полем, с поверхности в объем пластинки приводит к изменению состава и структуры субанодной области стекла и к формированию слоя отрицательного пространственного заряда, в котором формируется сильное электрическое поле [1 – 3].

Как известно, электрическое поле оказывает существенное влияние на термодинамику и кинетику таких процессов, как фазовое расслоение, зародышеобразование и скорость роста нанокристаллов, что может приводить как к усилению, так и к ингибированию процессов кристаллизации [4 – 7], в частности за счет модификации кристаллических мотивов стекла [8]. Известно несколько работ, в которых авторы наблюдали поверхностную кристаллизацию стекол в процессах их полинга и последующей термообработки при температуре выше температуры стеклования: кристаллизация титаната бария  $\text{BaTiO}_3$  в стеклах системы  $\text{BaO-TiO}_2\text{-TeO}_2$  [9], а также кристобалита  $\text{SiO}_2$  [10], моноклинного дикальциевого силиката  $\beta\text{-Ca}_2\text{SiO}_4$  и диопсида  $\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$  в силикатных стеклах [11, 12]. Также была зарегистрирована кристаллизация анатаза  $\text{TiO}_2$  в стекле системы  $\text{K}_2\text{O-TiO}_2\text{-SiO}_2$  при полинге ниже температуры стеклования, но без дополнительной термообработки [13], стандартно используемой для формирования в стеклах кристаллических включений [14].

Целью настоящей работы является детальный анализ процесса формирования кристаллических структур в стекле системы  $\text{K}_2\text{O-TiO}_2\text{-SiO}_2$  при полинге с использованием рельефного анода и температуры нагрева ниже температуры стеклования.

Использование рельефных структурированных электродов для обеспечения локальной кристаллизации стекол при полинге является альтернативой используемой в настоящее время локальной кристаллизации стекол лазерным облучением. В настоящем исследовании для демонстрации локальной кристаллизации в соответствии с поверхностным рельефом электрода-штампа с достаточно сложной структурой была выбрана монета.

Исследование кристаллизации проводили методом спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) с помощью спектрометра, снабженного конфокальным микроскопом; морфологию поверхности стекла изучали с использованием механического профилометра.

### Эксперимент

В эксперименте использовались пластинки толщиной 4 мм из коммерческого стекла марки ЛФ9, имеющего температуру стеклования  $T_g = 485$  °С и состав, представленный в таблице.

Таблица

Состав стекла, использованного в эксперименте

Химический состав, мол. %					
$\text{SiO}_2$	$\text{TiO}_2$	$\text{K}_2\text{O}$	$\text{Al}_2\text{O}_3$	$\text{B}_2\text{O}_3$	$\text{As}_2\text{O}_3$
61,80	16,63	16,33	2,06	3,00	0,18

В качестве анодного электрода использовали монету диаметром 16 мм с высотой рельефа на поверхности рисунка, равной 15 мкм. Полинг длительностью 60 мин проводили на воздухе при постоянном напряжении 850 В и температуре 440 °С. Заряд, прошедший в процессе полинга, составил 3,7 Кл. Возбуждение спектров КРС осуществляли с помощью лазера непрерывного излучения с длиной волны 532 нм, а их регистрацию – с использованием спектрометра Witec Alpha 300R, снабженного конфокальным микроскопом. Морфологию поверхности образца изучали с помощью механического профилометра Ambios XP-1 Stylus Profiler.

### Результаты и их обсуждение

На рис. 1,а представлено оптическое изображение фрагмента отпечатка монеты на стекле, подвергнутом полингу. Отпечаток зеркально воспроизводит рисунок на монете (цифры 2006), при этом в областях контакта со стеклом выступающих элементов рельефа монеты и вовсе вне монеты стекло остается прозрачным, тогда как в остальных областях под монетой поверхность становится матовой.



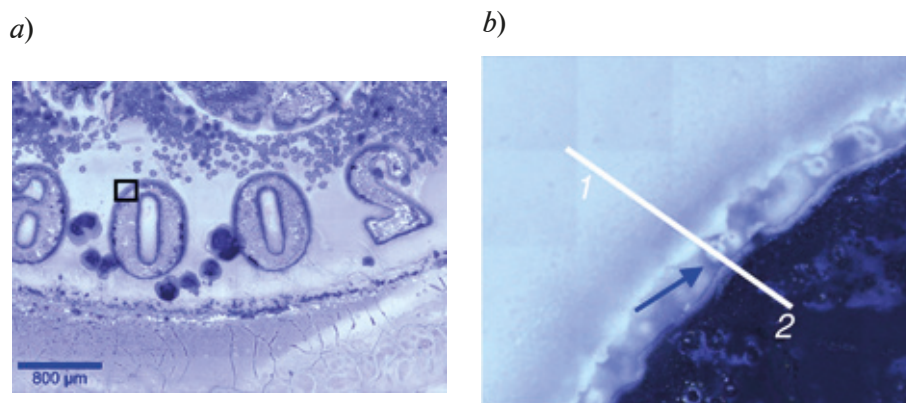


Рис. 1. Оптические изображения фрагментов отпечатка монеты на стекле, подвергнутом полингу; данные представлены в разных масштабах: на рис. 1, *b* – часть поверхности стекла в области цифры 0, выделенной квадратом на рис. 1, *a*. Белая прямая между матовой (1) и прозрачной (2) областями показывает линию сканирования (см. рис. 2 – 4); стрелкой указана переходная область между 1 и 2

На рис. 1, *b* представлен фрагмент поверхности стекла в области цифры 0, выделенной квадратом на рис. 1, *a*. На рис. 1, *b* также видна переходная область с оптическими неоднородностями.

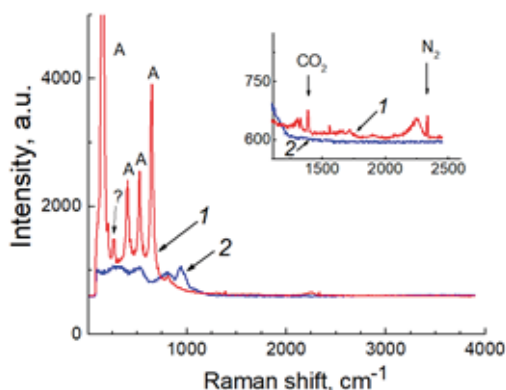


Рис. 2. Спектры КРС, измеренные в матовой (1) и прозрачной (2) областях поляризованного стекла (см. рис. 1, *b*): видны пики нанокристаллического анатаза (A) и линии атмосферных газов (на вставке)

значена вопросительным знаком) и линии атмосферных газов (см. вставку на рис. 2) [16, 17]. Положение линий на частотной шкале, относящихся к нанокристаллическому анатазу, и их ширина зависят от среднего размера нанокристаллов, а также обусловлены механическими напряжениями в стекле [16].

Следует отметить, что монокристаллический анатаз имеет шесть Раман-активных мод,  $\text{cm}^{-1}$  [17]:

$$144 (E_g), 197 (E_g), 399 (B_{1g}), 516 (A_{1g}), 519 (B_{1g}) \text{ и } 639 (E_g).$$

Положение наиболее интенсивной в спектре линии анатаза ( $144 \text{ cm}^{-1}$ ) и ее ширина ( $15 \text{ cm}^{-1}$ ), зависящая от размера структуры, на которой происходит комбинационное

На рис. 2 показаны спектры КРС, измеренные в матовой (1) и прозрачной (2) областях (вне контакта и контактной соответственно, см. рис. 1, *b*).

Спектр 2 на рис. 2 имеет вид, характерный для калиево-титаносиликатных стекол, и содержит следующие широкие полосы,  $\text{cm}^{-1}$ :

$$250 - 350, 450 - 550, 700 - 800, \\ 900 - 1000, 950 - 1050;$$

среди них полосы  $450 - 550, 950 - 1050 \text{ cm}^{-1}$  принадлежат связям Si–O, а остальные – связям Ti–O. При этом полосы  $700 - 800$  и  $900 - 1000 \text{ cm}^{-1}$  связаны соответственно с октаэдрической и тетраэдрической координациями ионов титана [15]. Спектр 1 на рис. 2 содержит несколько узких линий, принадлежащих нанокристаллическому анатазу  $\text{TiO}_2$ , а также одну линию неидентифицированной примесной фазы (обозначена вопросительным знаком)

рассеяние, могут быть использованы для оценки среднего размера нанокристаллов (без учета механических напряжений) [16]. Согласно оценочным данным в работе [16], положению линии, равному  $150 \text{ см}^{-1}$ , при спектральной ширине  $15 \text{ см}^{-1}$ , соответствует средний размер нанокристаллов  $7 - 10 \text{ нм}$ . В нашем случае можно предположить, что размер нанокристаллов лежит примерно в таком же интервале.

Из анализа рис. 3, на котором представлены спектры КРС стекла при сканировании его поверхности вдоль прямой между областями 1 и 2 (см. рис. 1, *b*), следует, что до границы с краем цифры 0 (включая переходную область) имеет место кристаллизация, причем кристаллическая фаза представлена анатазом  $\text{TiO}_2$ ; после же пересечения этой границы стекло не содержит признаков кристаллизации. Отметим, что за пределами монеты кристаллизации стекла не наблюдается. Изучение морфологии поверхности показало, что переходная область образуется по контуру отпечатка каждой из цифр и представляет собой выступы шириной в несколько десятков микрометров и высотой в единицы микрометров.

На рис. 4 в качестве примера представлен профиль поверхности стекла в переходной области на границе цифры 0, полученный с помощью механического профилометра.

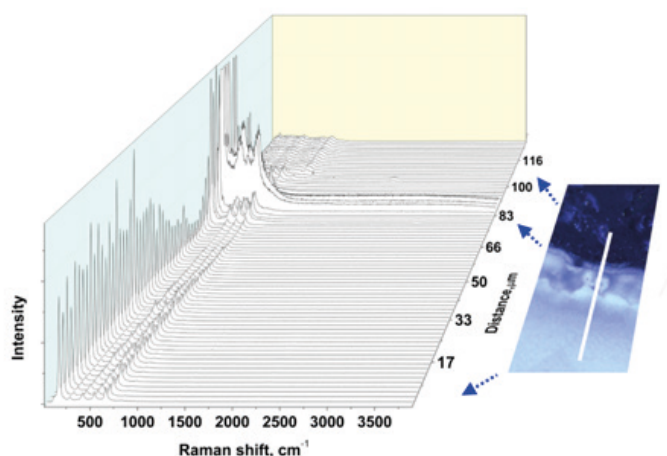


Рис. 3. Набор спектров КРС поляризованного стекла при сканировании его поверхности вдоль прямой между областями 1 и 2 (см. рис. 1, *b*). Показаны шаг и диапазон сканирования

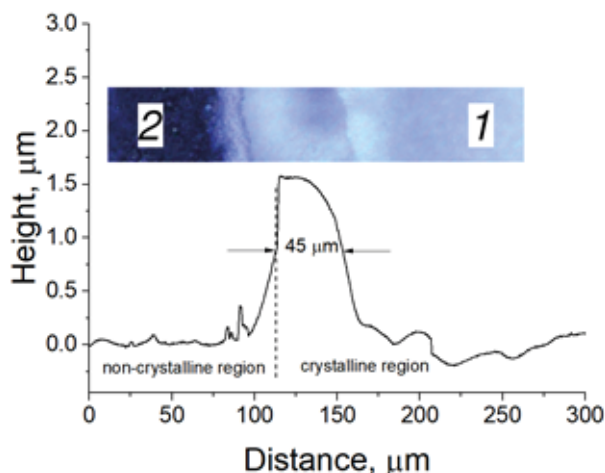


Рис. 4. Профиль поверхности поляризованного стекла в переходной области на границе цифры 0 (см. рис. 1, *b*), полученный с помощью механического профилометра

Видно, что в данном случае переходная область представляет собой выступ шириной около 45 мкм и высотой 1,5 мкм. Нашими опытами установлено, что при термической обработке в таком же режиме и с использованием монеты, но без приложения электрического поля, не образуется ни рельефа, ни кристаллической фазы.

Полученные экспериментальные результаты можно объяснить следующим образом. В процессе полинга электрическое поле оказывается приложенным ко всей области под монетой (электродом), при этом наиболее высокое значение этого поля достигается в области непосредственного контакта электрода со стеклом. Из приповерхностной области щелочные ионы удаляются в глубь стекла, при этом состав стекла изменяется: вместо щелочных ионов, уходящих вглубь под действием электрического поля, в стекло из атмосферы инжектируются ионы гидрония  $\text{H}_3\text{O}^+$ . При этом в области контакта электрода со стеклом проникновение гидрония происходит менее эффективно, чем в области вне контакта. Удаление щелочных ионов из приповерхностного слоя переводит тройную систему  $\text{K}_2\text{O}-\text{TiO}_2-\text{SiO}_2$  из области стеклообразования в область метастабильной ликвации, близкую по составу к двойной системе  $\text{TiO}_2 - \text{SiO}_2$ . Как известно, подликвидусная область в системе  $\text{TiO}_2 - \text{SiO}_2$  занимает практически всю область составов [18] и введение даже небольшого количества оксида титана в силикатную систему вызывает развитие метастабильной ликвации. В пространстве метастабильной ликвации фазовое разделение на оксиды кремния и титана, а также кристаллизация последнего происходят по механизму диффузионного фазового распада, при этом на процесс кристаллизации влияет не только температура, но и молярное соотношение оксидов (чем выше содержание оксида кремния, тем выше необходимая температура) [19, 20].

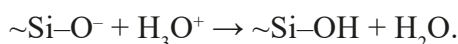
В данном случае к этим двум параметрам (температура и молярное отношение оксидов) добавляется третий: напряженность электрического поля. Как уже отмечалось, электрическое поле может приводить как к усилению, так и ингибированию процессов фазового разделения и кристаллизации [4 – 7]. В системе  $\text{TiO}_2 - \text{SiO}_2$  происходит усиление этих процессов, а также уменьшение вязкости стекла, что может приводить к снижению температуры кристаллизации. По-видимому, кристаллизации предшествует ликвация, поскольку поверхность становится матовой и начинает сильно рассеивать свет. Сильное рассеяние обусловлено большой разницей показателей преломления между фазами оксида кремния  $\text{SiO}_2$  ( $n = 1,46$ ) и анатаза  $\text{TiO}_2$  ( $n = 2,55$ ).

Отметим, что образование анатаза при полинге в данном случае происходит при температуре 440 °С, тогда как при термическом отжиге двухкомпонентных стекол  $\text{TiO}_x - \text{SiO}_{1-x}$  ( $x = 0,20 - 0,65$ ) и сходных по составу пленок ( $x = 0,15 - 0,90$ ) оно имеет место только при температурах выше 600 °С [19, 20]. Возникает вопрос, почему кристаллизация наблюдается на границе стекло – воздух и отсутствует на границе стекло – анод. На наш взгляд, в этом случае ключевую роль играет различие в кинетике диффузии ионов на этих границах, поскольку более свободный вход гидрония на границе стекло – воздух в большей степени снижает температуру стеклования, что способствует процессу кристаллизации. Поэтому в условиях эксперимента стекло не успевает кристаллизироваться ввиду низкой скорости кристаллизации в области контакта с электродом. Наши опыты показали, что если повышать температуру до 460 °С (вместо 440 °С) при тех же самых значениях напряжения и длительности полинга, то кристаллизация распространяется на всю область под монетой; а это подтверждает роль кинетического фактора в процессе кристаллизации.

Перейдем к предположению о механизме формирования выступов на поверхности стекла вблизи границы области его контакта с электродом. Образование выступов указывает на локальное увеличение объема стекла в рассматриваемой области. Эффект увеличения объема стекла наблюдается при замене ионов меньшего радиуса ионами большего радиуса, например, при ионном обмене, когда ионы натрия замещаются ионами калия [21] или при гидротермальной обработке стекла, когда в нем образуются пузырьки пара [22 – 24].

Как было показано в работах [22 – 24], температура стеклования  $T_g$  стекол, подвергнутых гидротермальной обработке, сильно зависит от содержания воды и может снижаться до значения  $0,8T_g$  при 1 – 2 вес.%  $\text{H}_2\text{O}$  и до  $0,5T_g$  при 10 вес.% (температура  $T_g$  в °С). Это, в свою очередь, приводит к уменьшению температуры кристаллизации и понижению вязкости стекла, а также влияет на процесс фазового расслоения пара [25].

При отжиге стекол, приготовленных гидротермальным методом, при температуре выше температуры стеклования в них образуются пузырьки водяного пара (как уже отмечено выше), в результате чего объем стекла существенно увеличивается (вспенивание стекла). Это позволяет использовать гидротермальную обработку для получения пористых стекол (см. работу [26] и ссылки в ней). Образование воды в приповерхностной области стекла может происходить и при полинге. В указанной области отрицательно заряженные не-мостиковые атомы кислорода  $O^-$ , оставшиеся после ухода катионов калия, вступают в реакцию с гидронием  $H_3O^+$  с образованием воды:



Замена катионов калия ионами гидрония не может приводить к увеличению объема стекла ввиду незначительной разницы в их ионных радиусах; однако если температура стеклования уменьшается вследствие увеличения содержания воды при проникновении гидрония и оказывается ниже температуры полинга, то в областях с высоким содержанием гидрония могут создаваться условия для формирования пузырьков пара. Поскольку напряженность электрического поля максимальна на периметре рельефа электрода (краевой эффект), процессы образования пузырьков наиболее эффективны по периметрам цифр. Скорее всего, формирование выступов на стекле можно объяснить образованием пузырьков пара по краям цифр.

Таким образом, значительное снижение температуры кристаллизации стекла с образованием анатаза  $TiO_2$  в приповерхностной области стекла при полинге можно объяснить влияниями электрического поля и воды, образующейся в стекле, на термодинамику и кинетику кристаллизации, а сам процесс охарактеризовать как поверхностную кристаллизацию в электрическом поле.

### Заключение

Проведенные исследования показали, что при полинге стекол  $K_2O-TiO_2-SiO_2$  при температуре ниже температуры стеклования материала исходного состава и с использованием профилированного анода (штампа) на поверхности стекла формируются кристаллические структуры из нанокристаллов анатаза  $TiO_2$ , отражающие рисунок на аноде. На границе между некристаллическими и кристаллическими областями образуются выступы.

Полученные результаты могут представлять интерес для исследователей формирования структур, обладающих фотокаталитическими свойствами, и покрытий с нанокристаллами анатаза на поверхностях титаносиликатных стекол.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Myers R. A., Mukherjee N., Brueck S. R. J. Large second-order nonlinearity in poled fused silica // Optics Letters. 1991. Vol. 16. No. 22. Pp. 1732–1734.
2. Qiu M., Pi F., Orriols G., Bibiche M. Signal damping of second-harmonic generation in poled soda-lime silicate glass // Journal of the Optical Society of America B. 1998. Vol. 15. No. 4. Pp. 1362–1365.
3. Garcia F. C., Carvalho I. C. S., Hering E., Margulis W., Lesche W. Inducing a large second-order optical nonlinearity in soft glasses by poling // Applied Physics Letters. 1998. Vol. 72. No. 25. Pp. 3252–3254.
4. De Vekey R. C., Majumdar A. J. Effect of electric field on phase separation of glass // Nature. 1970. Vol. 225. No. 5228. Pp. 172–173.
5. Kashchiev D. Nucleation in external electric field // Journal of Crystal Growth. 1972. Vols. 13–14. Third International Conference on Crystal Growth. May. Pp. 128–130.
6. Liu W., Liang K. M., Zheng Y. K., Gu S. R., Chen H. The effect of an electric field on the phase separation of glasses // Journal of Physics D: Applied Physics. 1997. Vol. 30. No. 24. Pp. 3366–3370.
7. An H., Fleming S. Electric field enhanced nanocrystal formation in thermally poled optical fibers // Electronics Letters. 2005. Vol. 41. No. 10. Pp. 584–586.
8. Lipovskii A. A., Tagantsev D. K., Tatarintsev B. V., Vetrov A. A. The origin of electrooptical sensitivity of glassy materials: Crystal motifs in glasses // Journal of Non-Crystalline Solids. 2003.

Vol. 318. No. 3. Pp. 268–283.

9. **Narazaki A., Tanaka K., Hirao K.** Poling-induced crystallization of tetragonal BaTiO<sub>3</sub> and enhancement of optical second-harmonic intensity in BaO-TiO<sub>2</sub>-TeO<sub>2</sub> glass system // *Applied Physics Letters*. 1999. Vol. 75. No. 21. Pp. 3399–3401.

10. **An H., Fleming S.** Second-order optical nonlinearity and accompanying near-surface structural modifications in thermally poled soda-lime silicate glasses // *Journal of the Optical Society of America B*. 2006. Vol. 23. No. 11. Pp. 2303–2309.

11. **Redkov A. V., Melehin V. G., Raskhodchikov D. V., Reshetov I. V., Tagantsev D. K., Zhurikhina V. V., Lipovskii A. A.** Modifications of poled silicate glasses under heat treatment // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2019. Vol. 503–504. 15 January. Pp. 279–283.

12. **Dergachev A., Kaasik V., Lipovskii A., Melehin V., Redkov A., Reshetov I., Tagantsev D.** Control of soda-lime glass surface crystallization with thermal poling // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2020. Vol. 533. 1 April. P. 119899.

13. **Lipovskii A. A., Melehin V. G., Redkov A. V., Reshetov I. V., Tagantsev D. K.** Crystallization of K<sub>2</sub>O-TiO<sub>2</sub>-SiO<sub>2</sub> glass below glass transition by poling // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2021. Vol. 571. 1 November. P. 121081.

14. **Malyarevich A. M., Savitsky V. G., Denisov I. A., Prokoshin P. V., Yumashev K. V., Raaben E., Zhilin A. A., Lipovskii A. A.** PbS(Se) quantum dot doped glass applications as laser passive Q-switches // *Physica Status Solidi B*. 2001. Vol. 224. No. 1. Pp. 253–256.

15. **Iwamoto N., Tsunawaki Y., Fuji M., Hatfori T.** Raman spectra of K<sub>2</sub>O-SiO<sub>2</sub> and K<sub>2</sub>O-SiO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> glasses // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 1975. Vol. 18. No. 2. Pp. 303–306.

16. **Swamy V., Kuznetsov A., Dubrovinsky L. S., Caruso R. A., Shchukin G. D., Muddle B. C.** Finite-size and pressure effects on the Raman spectrum of nanocrystalline anatase TiO<sub>2</sub> // *Physical Review B*. 2005. Vol. 71. No. 18. P. 184302.

17. **Ohsaka T., Izumi F., Fujiki Y.** Raman spectrum of anatase TiO<sub>2</sub> // *Journal of Raman Spectroscopy*. 1978. Vol. 7. No. 6. Pp. 321–324.

18. **Кириллова С. А., Альмяшев В. И., Гусаров В. В.** Фазовые соотношения в системе SiO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> // *Журнал неорганической химии*. 2011. Т. 56. № 9. С. 1547–1553.

19. **Best M. F., Condrate R. A.** A Raman study of TiO<sub>2</sub>-SiO<sub>2</sub> glasses prepared by sol-gel processes // *Journal of Materials Science Letters*. 1985. Vol. 4. No. 8. Pp. 994–998.

20. **Sankur H., Gunning W.** Crystallization and diffusion in composite TiO<sub>2</sub> - SiO<sub>2</sub> thin films // *Journal of Applied Physics*. 1989. Vol. 66. No. 10. Pp. 4747–4751.

21. **Kaneko T.** Dilatation of glass by field-assisted ion exchange // *Journal of Materials Science Letters*. 1986. Vol. 5. No. 10. Pp. 1011–1012.

22. **Tomozawa M.** Water in glass // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 1985. Vol. 73. No. 1–3. Pp. 197–204.

23. **Tomozawa M., Takata M., Acocella J., Watson E. B., Takamori T.** Thermal properties of Na<sub>2</sub>O-3SiO<sub>2</sub> glasses with high water content // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 1983. Vol. 56. No. 1–3. Pp. 343–348.

24. **Deubener J., Müller R., Behrens H., Heider J.** Water and the glass transition temperature of silicate melts // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2003. Vol. 330. No. 1–3. Pp. 268–273.

25. **Kreidl N. J., Maklad M. S.** Effect of water content on phase separation in soda-silica glasses // *Journal of the American Ceramic Society*. 1969. Vol. 52. No. 9. Pp. 508–509.

26. **Suzuki M., Maruyama S., Umesaki N., Tanaka T.** Hydroxyl-group identification using O K-Edge XAFS in porous glass fabricated by hydrothermal reaction and low-temperature foaming // *Molecules*. 2019. Vol. 24. No. 19. P. 3488.

## REFERENCES

1. **Myers R. A., Mukherjee N., Brueck S. R. J.,** Large second-order nonlinearity in poled fused silica, *Opt. Lett.* 16 (22) (1991) 1732–1734.

2. **Qiu M., Pi F., Orriols G., Bibiche M.,** Signal damping of second-harmonic generation in poled soda-lime silicate glass, *J. Opt. Soc. Am. B*. 15 (4) (1998) 1362–1365.

3. **Garcia F. C., Carvalho I. C. S., Hering E.,** Inducing a large second-order optical nonlinearity in soft glasses by poling, *Appl. Phys. Lett.* 72 (25) (1998) 3252–3254.

4. **De Vekey R. C., Majumdar A. J.,** Effect of electric field on phase separation of glass, *Nature*.

225 (5228) (1970) 172–173.

5. **Kashchiev D.**, Nucleation in external electric field, *J. Cryst. Growth*. 13–14 (1972), Third International Conference on Crystal Growth (May) 128–130.

6. **Liu W., Liang K. M., Zheng Y. K., et al.**, The effect of an electric field on the phase separation of glasses, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 30 (24) (1997) 3366–3370.

7. **An H., Fleming S.**, Electric field enhanced nanocrystal formation in thermally poled optical fibres, *Electron. Lett.* 41 (10) (2005) 584–586.

8. **Lipovskii A. A., Tagantsev D. K., Tatarintsev B. V., Vetrov A. A.**, The origin of electrooptical sensitivity of glassy materials: Crystal motifs in glasses, *J. Non. Cryst. Solids*. 318 (3) (2003) 268–283.

9. **Narazaki A., Tanaka K., Hirao K.**, Poling-induced crystallization of tetragonal BaTiO<sub>3</sub> and enhancement of optical second-harmonic intensity in BaO-TiO<sub>2</sub>-TeO<sub>2</sub> glass system, *Appl. Phys. Lett.* 75 (21) (1999) 3399–3401.

10. **An H., Fleming S.**, Second-order optical nonlinearity and accompanying near-surface structural modifications in thermally poled soda-lime silicate glasses, *J. Opt. Soc. Am. B*. 23 (11) (2006) 2303–2309.

11. **Redkov A. V., Melehin V. G., Raskhodchikov D. V., et al.**, Modifications of poled silicate glasses under heat treatment, *J. Non. Cryst. Solids*. 503–504 (15 January) (2019) 279–283.

12. **Dergachev A., Kaasik V., Lipovskii A., et al.**, Control of soda-lime glass surface crystallization with thermal poling, *J. Non. Cryst. Solids*. 533 (1 April) (2020) 119899.

13. **Lipovskii A. A., Melehin V. G., Redkov A. V., et al.**, Crystallization of K<sub>2</sub>O-TiO<sub>2</sub>-SiO<sub>2</sub> glass below glass transition by poling, *J. Non. Cryst. Solids*. 571 (1 November) (2021) 121081.

14. **Malyarevich A. M., Savitsky V. G., Denisov I. A., et al.**, PbS(Se) Quantum dot doped glass applications as laser passive Q-switches, *Phys. Status Solidi B*. 224 (1) (2001) 253–256.

15. **Iwamoto N., Tsunawaki Y., Fuji M., Hatfiori T.**, Raman spectra of K<sub>2</sub>O-SiO<sub>2</sub> and K<sub>2</sub>O-SiO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> glasses, *J. Non. Cryst. Solids*. 18 (2) (1975) 303–306.

16. **Swamy V., Kuznetsov A., Dubrovinsky L. S., et al.**, Finite-size and pressure effects on the Raman spectrum of nanocrystalline anatase TiO<sub>2</sub>, *Phys. Rev. B*. 71 (18) (2005) 184302.

17. **Ohsaka T., Izumi F., Fujiki Y.**, Raman spectrum of anatase, TiO<sub>2</sub>, *J. Raman Spectrosc.* 7 (6) (1978) 321–324.

18. **Kirillova S. A., Almjashev V. I., Gusarov V. V.**, Phase relationships in the SiO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> system, *Russ. J. Inorg. Chem.* 56 (9) (2011) 1464–1471.

19. **Best M. F., Condrate R. A.**, A Raman study of TiO<sub>2</sub>-SiO<sub>2</sub> glasses prepared by sol-gel processes, *J. Mater. Sci. Lett.* 4 (8) (1985) 994–998.

20. **Sankur H., Gunning W.**, Crystallization and diffusion in composite TiO<sub>2</sub>-SiO<sub>2</sub> thin films, *J. Appl. Phys.* 66 (10) (1989) 4747–4751.

21. **Kaneko T.**, Dilatation of glass by field-assisted ion exchange, *J. Mater. Sci. Lett.* 5 (10) (1986) 1011–1012.

22. **Tomozawa M.**, Water in glass, *J. Non. Cryst. Solids*. 73 (1–3) (1985) 197–204.

23. **Tomozawa M., Takata M., Acocella J., et al.**, Thermal properties of Na<sub>2</sub>O·3SiO<sub>2</sub> glasses with high water content, *J. Non. Cryst. Solids*. 56 (1–3) (1983) 343–348.

24. **Deubener J., Müller R., Behrens H., Heider J.**, Water and the glass transition temperature of silicate melts, *J. Non. Cryst. Solids*. 330 (1–3) (2003) 268–273.

25. **Kreidl N. J., Maklad M. S.**, Effect of water content on phase separation in soda-silica glasses, *J. Am. Ceram. Soc.* 52 (9) (1969) 508–509.

26. **Suzuki M., Maruyama S., Umesaki N., Tanaka T.**, Hydroxyl-group identification using O K-Edge XAFS in porous glass fabricated by hydrothermal reaction and low-temperature foaming, *Molecules*. 24 (19) (2019) 3488.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**РЕШЕТОВ Илья Валентинович** – инженер Лаборатории оптики гетерогенных структур и оптических материалов Санкт-Петербургского академического университета имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук; инженер научно-образовательного центра «Физика и технология гетерогенных материалов и наногетероструктур» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3  
reshetov\_iv@spbstu.ru  
ORCID: 0000-0002-8661-3654

**РЕДЬКОВ Алексей Викторович** – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института проблем машиноведения РАН; младший научный сотрудник Лаборатории оптики гетерогенных структур и оптических материалов Санкт-Петербургского академического университета имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.

199178, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В. О., 61.  
red-alex@mail.ru  
ORCID: 0000-0002-2748-6966

**МЕЛЕХИН Владимир Герасимович** – доктор физико-математических наук, профессор Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26  
melekhin1952@gmail.com  
ORCID: 0000-0003-3741-3936

**ЖУРИХИНА Валентина Владимировна** – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы фундаментальных физических исследований Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого; профессор кафедры физики и технологии наногетероструктур Санкт-Петербургского академического университета имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
jourikhina@mail.ru  
ORCID: 0000-0003-0685-9409

**ЛИПОВСКИЙ Андрей Александрович** – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики и технологии наногетероструктур Санкт-Петербургского академического университета имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук; профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3  
lipovskii@mail.ru  
ORCID: 0000-0001-9472-9190

## THE AUTHORS

### **RESHETOV Ilya V.**

*Alferov University,  
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
8/3 Khlopina St., St. Petersburg, 194021, Russia  
reshetov\_iv@spbstu.ru  
ORCID: 0000-0002-8661-3654

### **REDKOV Alexey V.**

*Alferov University,  
Institute of Problems of Mechanical Engineering, RAS*  
61 Bolshoi Pr. V. I., St. Petersburg, 199178, Russia  
red-alex@mail.ru  
ORCID: 0000-0002-2748-6966

### **MELEHIN Vladimir G.**

*Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences*  
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia  
melekhin1952@gmail.com  
ORCID: 0000-0003-3741-3936

### **ZHURIKHINA Valentina V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
Alferov University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
jourikhina@mail.ru  
ORCID: 0000-0003-0685-9409

### **LIPOVSKII Andrey A.**

*Alferov University,  
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
8/3 Khlopina St., St. Petersburg, 194021, Russia  
lipovskii@mail.ru  
ORCID: 0000-0001-9472-9190

*Статья поступила в редакцию 26.02.2022. Одобрена после рецензирования 09.03.2022.  
Принята 09.03.2022.*

*Received 26.02.2022. Approved after reviewing 09.03.2022. Accepted 09.03.2022.*



## Математическая физика

Научная статья

УДК 517.958

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15104>

### ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ОБОБЩЕННОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ РАДОНА

**Д. С. Аниконов** ✉, **Е. Ю. Балакина**, **Д. С. Коновалова**

Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, г. Новосибирск, Россия

✉ [anik@math.nsc.ru](mailto:anik@math.nsc.ru)

**Аннотация.** В работе исследуется проблема обращения интегрального преобразования Радона, формула которого при традиционных ограничениях дает значения подынтегральной функции в любой точке. Для случая, когда подобная функция является разрывной и зависит не только от точек трехмерного пространства, но и от параметров, характеризующих плоскость интегрирования, эти интегралы названы обобщенным преобразованием Радона (ОПР). Для задачи обращения ОПР сопоставление количества переменных известных величин и подынтегрального выражения не позволяет полностью найти искомую функцию. В этой статье выбрана лишь часть такой функции, а именно поверхность разрывов подынтегральной функции для ОПР. Предложен алгоритм решения поставленной задачи, который подкреплен конкретным примером.

**Ключевые слова:** обобщенное преобразование Радона, интегральная геометрия, дифференциальное уравнение, разрывная функция

**Для цитирования:** Аниконов Д. С., Балакина Е. Ю., Коновалова Д. С. Обратная задача для обобщенного преобразования Радона // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 1. С 41–51. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15104>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15104>

### AN INVERSE PROBLEM FOR GENERALIZED RADON TRANSFORMATION

**D. S. Anikonov** ✉, **E. Yu. Balakina**, **D. S. Konovalova**

Sobolev Institute of Mathematics, Novosibirsk, Russia

✉ [anik@math.nsc.ru](mailto:anik@math.nsc.ru)

**Abstract.** The paper studies the problem of inverting the integral transformation of Radon, whose formula, under traditional restrictions, gives the integrand values at any point. For the case when such a function is discontinuous and depends not only on the points of 3D space, but also on the parameters characterizing the plane of integration, these integrals have been named the generalized Radon transform (GRT). For the GRT inversion problem, the matching between quantities of known variables and variables of the integrand did not allow us to fully find the desired function. In this paper, only a part of this function was selected, namely, the

discontinuity surface of the integrand for the GRT. An algorithm for solving the problem was put forward, and it was supported by a concrete example.

**Keywords:** generalized Radon transformation, integral geometry, differential equation, discontinuous function

**For citation:** Anikonov D. S., Balakina E. Yu., Konovalova D. S., An inverse problem for generalized Radon transformation, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (1) (2022) 41–51. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15104>

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

### Введение

Проблема, которая рассматривается в настоящей работе, относится к теории интегральной геометрии и заключается в получении информации о подынтегральной функции по некоторому набору интегралов от нее. Такая общая постановка имеет много различных конкретных вариантов. Самыми известными из них можно считать задачи обращения лучевого преобразования и преобразования Радона. Результаты исследования подобных задач, помимо чисто научного интереса, имеют и важное прикладное значение. Наиболее известным примером такого применения может служить математическая часть теории рентгеновской томографии. Отметим в связи с этим, что многие задачи зондирования сводятся именно к проблемам интегральной геометрии.

Не претендуя на полный обзор темы, укажем на работы классиков этого направления, таких как Д. Радон [1], Р. Курант [2], Ф. Йон [3], И. М. Гельфанд [4]. Кроме того, значительный вклад в решение подобных задач внесли труды математической школы М. М. Лаврентьева в связи с исследованием обратных задач математической физики [5].

В настоящее время исследования в этом направлении продолжают, хотя и с меньшей интенсивностью. К примерам такого развития можно отнести, в частности, публикации [6 – 14]. Основная часть достигнутых результатов на эту тему касается определения всего подынтегрального выражения, что требует довольно жестких ограничений, препятствующих широкому применению полученных результатов. Помимо этого, в немаловажных (с прикладной точки зрения) вопросах подынтегральное выражение может зависеть от большого количества переменных, что не позволяет найти полностью это выражение по имеющейся информации. Так, например, обстоит дело в рентгеновской томографии, если в полной мере учитывать эффект рассеяния частиц в зондируемой среде. Поэтому приходится менять постановку задачи, например объявлять искомым объектом только поверхности разрывов подынтегральной функции. Отметим, что в проблемах зондирования информация о такой поверхности дает неплохое представление о строении обследуемой среды. В частности, для рентгеновской томографии эти сведения служат основными характеристиками. Укажем, что такой подход к задачам рентгеновской томографии использовали и ранее, например, в статьях [15 – 17], где интегрирование осуществлялось вдоль одномерных многообразий, в то время как в нашей работе искомым объектом является поверхность разрыва для случая интегрирования по двумерным многообразиям. Нам неизвестны работы других авторов, которые бы исследовали подобные проблемы.

### Определения и постановка задачи

Будем использовать следующие обозначения:  $E^3$  – трехмерное евклидово пространство с системой координат  $Ox_1x_2x_3$ , соответствующей ортонормальному базису  $e_1, e_2, e_3$ ;  $\Omega$  – единичная сфера в  $E^3$ ,

$$\Omega = \{\omega : \omega \in E^3, |\omega| = 1\},$$

$$\omega = \omega(\theta, \gamma) = (\sin \theta \cos \gamma, \sin \theta \sin \gamma, \cos \theta),$$



$\theta, \gamma$  – сферические углы;  $L(x, \omega)$  – луч, исходящий из точки  $x \in E^3$  в направлении  $\omega$ ,  $L(x, \omega) = \{y: y = x + t\omega, t \geq 0\}$ ;  $\text{const}$  – некоторое положительное число;  $\Delta_x$  – оператор Лапласа по переменной  $x$ .

Для любого открытого множества  $T \subset E^3$ ,  $C^k(T)$  – множество ограниченных функций, заданных в  $T$  и непрерывных вместе со всеми своими частными производными до  $k$ -го порядка включительно;  $\partial T$  означает границу множества  $T$ .

Рассмотрим ограниченную область  $G$  в пространстве  $E^3$ , в которой содержатся попарно непересекающиеся области  $G_i$  ( $i = 1, 2, \dots, p$ ), такие, что для их объединения  $G_0$  соблюдается равенство  $\bar{G}_0 = \bar{G}$ . Предполагаем, что каждое множество  $\partial G_i$  ( $i = 1, 2, \dots, p$ ) является непрерывной двумерной поверхностью. Ясно, что  $\partial G_0 = \partial G_1 \cup \dots \cup \partial G_p$ . Будем считать систему множеств  $\{G_i\}$  ( $i = 1, 2, \dots, p$ ) обобщенно выпуклой в следующем смысле: для любой точки  $x \in E^3$  и для всех  $\omega \in \Omega$  луч  $L(x, \omega)$  пересекает границу  $\partial G_0$  множества  $G_0$  не более чем в конечном числе точек. Для удобства обозначений будем считать, что система множеств  $G_i$ , ( $i = 1, 2, \dots, p$ ) дополнена неограниченной областью  $G_{p+1} = E^3 / \bar{G}$ . Назовем точку  $z \in \partial G_0$  контактной, если она является граничной для двух и только двух множеств  $G_i$  и  $G_j$ , причём  $1 \leq j, l \leq p + 1$ . Предполагается, что множество контактных точек плотно в  $\partial G_0$ .

Рассмотрим семейство функций  $F(x, y)$  и  $f(y)$ ,  $x, y \in E^3$ , удовлетворяющих неравенствам:

$$\begin{aligned} |F(x, u) - F(x, v)| &\leq \text{const} |u - v|, \quad x, u, v \in E^3; \\ |f(u) - f(v)| &\leq \text{const} |u - v|, \quad u, v \in G_i. \end{aligned}$$

При этом функция  $F(x, y)$  принадлежит классу  $C^2(E^3 \times E^3)$ , а  $f(y)$  равна нулю вне области  $G$ . Ясно, что такие функции  $f(y)$  имеют конечные предельные значения в точках  $y = z$ ,  $z \in \partial G_i$ , которые будем обозначать как  $[f(z)]_i$ , т. е.  $f(y) \rightarrow [f(z)]_i, y \in G_i, y \rightarrow z$ . Величиной разрыва (скачка) функции  $f(y)$  в контактной точке  $y = z$  назовем разность

$$[f(z)]_{j,l} = [f(z)]_j - [f(z)]_l, \quad z \in \partial G_j, z \in \partial G_l, 1 \leq l < j \leq p + 1.$$

**Определение.** Функция  $I(x, \omega)$ , заданная равенством

$$I(x, \omega)(f) = \int_{(y-x, \omega)=0} F(x, y) f(y) d_y \sigma, \quad x \in E^3, \omega \in \Omega, \tag{1}$$

называется обобщенным преобразованием Радона функции  $f(y)$ .

Поясним, что в формуле (1) поверхностный интеграл первого рода берется по плоскости, перпендикулярной вектору  $\omega$  и проходящей через точку  $x$ .

В случае  $F(x, y) = 1$  множество значений функции  $I(x, \omega)$  и множество значений классического преобразования Радона совпадают. Вообще говоря, известно несколько различных определений обобщенных преобразований Радона. Наша специфика состоит в использовании разрывных подынтегральных функций и их зависимости не только от переменных интегрирования, но и от дополнительных переменных.

В литературе нам не удалось найти аналогов этого определения. Приведем обоснование его корректности. Рассмотрим ортогональное преобразование  $A$  в  $E^3$ , обладающее свойством

$$A\omega = \omega^*, \quad \omega = (\sin \theta \cos \gamma, \sin \theta \sin \gamma, \cos \theta), \quad \omega^* = e_3, \quad \omega^* = (0, 0, 1).$$

Это преобразование можно получить путем последовательного выполнения двух вращений: первое – поворот вокруг оси  $Ox_3$  на угол  $\gamma$ , второе – вокруг оси  $Ox_2$  на угол  $\theta$ .

Нетрудно проверить, что матрица  $\Lambda$  преобразования  $A$  и матрица  $\Lambda^{-1}$  преобразования  $A^{-1}$  имеют следующий вид:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \gamma & \cos \theta \sin \gamma & -\sin \theta \\ -\sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ \sin \theta \cos \gamma & \sin \theta \sin \gamma & \cos \theta \end{pmatrix},$$

$$\Lambda^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \gamma & -\sin \gamma & \sin \theta \cos \gamma \\ \cos \theta \sin \gamma & \cos \gamma & \sin \theta \sin \gamma \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}.$$

Опишем множество векторов  $w$  из сферы  $\Omega$ , ортогональных вектору  $\omega$ . Для этого на горизонтальные векторы  $(\cos \alpha, \sin \alpha, 0)$  подействуем преобразованием  $A^{-1}$ , обладающим свойством  $\omega = A^{-1} \omega^*$ . В результате получим:

$$w(\theta, \gamma, \alpha) = (\cos \theta \cos \gamma \cos \alpha - \sin \gamma \sin \alpha, \cos \theta \sin \gamma \cos \alpha + \cos \gamma \sin \alpha, -\sin \theta \cos \alpha). \quad (2)$$

В плоскости, проходящей через точку  $x$  и перпендикулярной вектору  $\omega$ , введем полярную систему координат  $(r, \alpha)$  с центром в точке  $x$ . Тогда, переходя к интегрированию через полярные координаты, равенство (1) перепишем в следующем виде:

$$I(x, \omega)(f) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} r F(x, x + rw(\theta, \gamma, \alpha)) f(x + rw(\theta, \gamma, \alpha)) dr d\alpha. \quad (3)$$

Рассмотрим функцию

$$g(x, r, \theta, \gamma, \alpha) = r F(x, x + rw(\theta, \gamma, \alpha)) f(x + rw(\theta, \gamma, \alpha)),$$

которая при любых фиксированных значениях  $x, \theta, \gamma$  имеет не более чем конечное число разрывов по переменной  $r$  при любом заданном значении  $\alpha$ , что гарантируется условием обобщенной выпуклости. Таким образом, подынтегральное выражение в равенстве (3) оказывается непрерывным почти всюду в области интегрирования, что обеспечивает существование интеграла. Его ограниченность следует из ограниченности области  $G$  и функций  $F, f$ . Проводя изложенные рассуждения в обратном порядке, т. е. от равенства (3) к равенству (1), убеждаемся в корректности определения обобщенного преобразования Радона.

Теперь докажем непрерывность функции  $I(x, \omega)(f)$ . Фиксируем произвольную точку  $(x, \omega)$ , и пусть  $\{x_k, \omega_k\}$ ,  $\omega_k = \omega(\theta_k, \gamma_k)$  — это последовательность точек, сходящаяся к  $(x, \omega)$ .

Рассмотрим функции

$$\begin{aligned} \chi_k(r, \alpha) &= r F(x_k, x_k + rw(\theta_k, \gamma_k, \alpha)) f(x_k + rw(\theta_k, \gamma_k, \alpha)), \\ \chi(r, \alpha) &= r F(x, x + rw(\theta, \gamma, \alpha)) f(x + rw(\theta, \gamma, \alpha)). \end{aligned}$$

Используя снова условие обобщенной выпуклости, убеждаемся в том, что  $\chi_k(r, \alpha)$  стремится к функции  $\chi(r, \alpha)$  для почти всех  $r, \alpha$ . Следовательно, по теореме Лебега, допустим предельный переход под знаком интеграла, т. е.

$$I(x_k, \omega_k)(f) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \chi_k(r, \alpha) dr d\alpha \rightarrow \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \chi(r, \alpha) dr d\alpha = I(x, \omega)(f),$$

что и означает непрерывность функции  $I(x, \omega)(f)$ .

Сформулируем следующую проблему интегральной геометрии.

**Задача о неизвестной границе.** Из уравнения (1) найти множество  $\partial G_\omega$ , если известны только значения функции

$$I(x, \omega)(f), \quad x \in E^3, \omega \in \Omega.$$



Как можно видеть, в этой задаче задано семейство интегралов, а требуется найти множество возможных точек разрывов неизвестной подынтегральной функции. Такая постановка задачи является развитием предыдущих исследований авторов настоящей статьи; отличие заключается в размерности множества интегрирования и в том, что в данном случае область  $G$  не предполагается известной. Отметим, что тематика поиска неизвестных границ довольно обширна и касается различных областей математики. Самой ранней постановкой, возможно, является известная задача Стефана.

### Построение алгоритма решения задачи

Рассмотрим следующую функцию:

$$J(x, \omega, p)(f) = \int_{(y, \omega)=p} F(x, y) f(y) d_y \sigma, \quad x \in E^3, \omega \in \Omega, -\infty < p < +\infty. \quad (4)$$

Здесь интеграл берется по плоскости, ортогональной вектору  $\omega$  и имеющей отклонение  $p$  от начала координат. Если  $F(x, y) = 1$ , то  $J(x, \omega, p)(f)$  не зависит от  $x$  и совпадает с традиционным преобразованием Радона, которое будем обозначать как  $R(\omega, p)(f)$ . Нетрудно видеть, что связь между функциями  $I(x, \omega)(f)$  и  $J(x, \omega, p)(f)$  осуществляется равенством

$$J(x, \omega, x \cdot \omega)(f) = I(x, \omega)(f),$$

т. е. они совпадают, если положить  $p = x \cdot \omega$ .

Отсюда следует, что функции  $J(x, \omega, p)(f)$ ,  $R(\omega, p)(f)$  непрерывны, поскольку непрерывна функция  $I(x, \omega)(f)$ . Также заметим, что непрерывным оказывается и любое преобразование  $R(\omega, p)(h)$ , если функция  $h(y)$  удовлетворяет тем же условиям, что и функция  $f(y)$ , т. е.

$$|h(u) - h(v)| \leq \text{const} |u - v|, \quad u, v \in G_i, \quad i = 1, 2, \dots, p, \quad h(y) = 0, \quad y \in G_{p+1}.$$

Докажем одно полезное свойство для преобразования Радона от функции  $h(y)$ . При этом мы используем небольшой фрагмент доказательства некоторого утверждения из монографии [3], который мы обобщаем на случай разрывной подынтегральной функции  $h(y)$ .

Рассмотрим интеграл

$$H(x) = \int_G \int_{\Omega} h(y) |(y - x, \omega)| d\omega dy.$$

Нам понадобятся следующие известные, легко проверяемые равенства:

$$\Delta_x |y - x| = 2|y - x|^{-1}, \quad \int_{\Omega} |\xi \cdot \omega| d\omega = 2\pi |\xi|, \quad \xi \in E^3, \quad (5)$$

$$\Delta_x \int_G \frac{h(y)}{|y - x|} dy = -4\pi h(x).$$

Используя первые две формулы в (5) для преобразования интеграла  $H(x)$ , получим:

$$\Delta_x H(x) = 4\pi \int_G \frac{h(y)}{|y - x|} dy. \quad (6)$$

Это же выражение можно выразить через преобразования Радона, если изменить порядок интегрирования и использовать теорему Фубини:

$$H(x) = \int_{\Omega} \int_G h(y) |(y - x, \omega)| dy d\omega = \int_{\Omega} \int_{-\infty}^{+\infty} |p| \int_{(y-x)\cdot\omega=p} h(y) d_y \sigma dp d\omega = \int_{\Omega} \int_{-\infty}^{+\infty} |p| R(\omega, p + x \cdot \omega)(h) dp d\omega.$$

Рассмотрим выражение

$$\Delta_x H(x) = \int_{\Omega} \Delta_x \int_{-\infty}^{+\infty} |p| R(\omega, p + x \cdot \omega)(h) dp d\omega. \quad (7)$$

В равенстве (7) преобразуем внутренний интеграл, используя свойство  $R(\omega, p)(h) = R(-\omega, -p)(h)$ :

$$\begin{aligned} & \Delta_x \int_{-\infty}^{+\infty} |p| R(\omega, p + x \cdot \omega)(h) dp = \\ & = \Delta_x \left[ \int_{x \cdot \omega}^{+\infty} (p - x \cdot \omega) R(\omega, p + x \cdot \omega)(h) dp - \int_{-\infty}^{x \cdot \omega} (p - x \cdot \omega) R(\omega, p + x \cdot \omega)(h) dp \right] = \\ & = 2R(\omega, x \cdot \omega)(h). \end{aligned} \quad (8)$$

Отсюда следует, что

$$\Delta_x H(x) = 2 \int_{\Omega} R(\omega, x \cdot \omega)(h) d\omega.$$

Сопоставляя полученное равенство с равенством (6), выводим формулу

$$\int_{\Omega} R(\omega, x \cdot \omega)(h) d\omega = 2\pi \int_G \frac{h(y)}{|y-x|} dy. \quad (9)$$

Отметим, что в равенстве (9) интегрирование осуществляется по переменным  $y, \omega$ , а переменная  $x$  при этом неизменна. Это позволяет считать здесь  $x$  параметром, что расширяет возможности применения формулы (9). А именно, при фиксированном значении  $x$  можно рассматривать произведение  $F(x, y)f(h)$  как некоторую функцию  $h(y)$  и считать, что

$$R(\omega, x \cdot \omega)(h) = I(x, \omega)(f).$$

Тогда из равенства (9) следует:

$$\int_{\Omega} I(x, \omega)(f) d\omega = 2\pi \int_G \frac{F(x, y)f(y)}{|y-x|} dy. \quad (10)$$

Применяя к равенству (10) оператор Лапласа, получим:

$$\begin{aligned} & \Delta_x \int_{\Omega} I(x, \omega)(f) d\omega = \\ & = 2\pi \Delta_x \int_G \frac{F(x, x)f(y)}{|y-x|} dy + 2\pi \Delta_x \int_G \frac{(F(x, y) - F(x, x))f(y)}{|y-x|} dy. \end{aligned} \quad (11)$$

Для преобразования первого слагаемого в правой части равенства (11) выделим интеграл, в котором дифференцируется только знаменатель  $|y-x|^{-1}$  и, используя для него последнее равенство в соотношениях (5), получим представление:

$$2\pi \Delta_x \int_G \frac{F(x, x)f(y)}{|y-x|} dy = -8\pi^2 F(x, x)f(x) + \Phi_1(x).$$

Здесь функция  $\Phi_1(x)$  является линейной комбинацией интегралов по переменной  $y$  от функций вида



$$\beta(x, y) f(y) |y - x|^{-\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, \quad \beta(x, y) \in C^0(E^3 \times E^3),$$

т. е. интегралов типа потенциала со слабой особенностью.

Из общих свойств таких интегралов следует непрерывность и ограниченность  $\Phi_1(x)$ . Легко видеть, что, благодаря неравенству

$$|F(x, u) - F(x, v)| \leq \text{const} |u - v|, \quad x, u, v \in E^3,$$

и второе слагаемое в правой части равенства (11), обозначаемое через  $\Phi_2(x)$ , тоже представляет собой комбинацию интегралов типа потенциала со слабой особенностью и также является непрерывной ограниченной функцией.

Итогом приведенных рассуждений является следующая формула:

$$\Delta_x \int_{\Omega} I(x, \omega)(f) d\omega = -8\pi^2 F(x, x) f(x) + \Phi(x), \quad (12)$$

где  $\Phi(x) = \Phi_1(x) + \Phi_2(x)$ .

Равенство (12) служит основой для построения алгоритма решения поставленной задачи, который состоит в выполнении следующих действий.

*Шаг 1.* Интегрирование известной функции  $I(x, \omega)$  по  $\omega \in \Omega$ .

*Шаг 2.* Применение оператора Лапласа  $\Delta_x$  к полученному выражению.

*Шаг 3.* Анализ функции  $\Delta_x \int_{\Omega} I(x, \omega)(f) d\omega$  и указание точек ее разрыва, которые со-

впадают с точками разрыва функции  $f(x)$ .

**Комментарий к представленному алгоритму.** Левая часть равенства (12) известна из постановки задачи, а правая имеет разрывы первого рода только в контактных точках  $z \in \partial G_0$  при условии, что  $F(x, x) \neq 0, x \in E^3, [f(z)]_{j,i} \neq 0$ , которое мы считаем выполненным. Таким образом находится множество всех контактных точек в  $\partial G_0$  и, в силу его плотности в  $\partial G_0$ , определяется и все это множество.

Заметим, что для случая  $F(x, y) = 1, f(y) \in C^1(E^3)$  формула (12) совпадает с известной формулой обращения классического преобразования Радона [3]. Поэтому полученный нами результат можно считать развитием указанного результата. Сравнивая полученный нами алгоритм с другими, отметим, что во всех известных нам формулах обращения преобразования Радона подынтегральные функции предполагаются гладкими для возможности их дифференцирования. Если попытаться применить подобные алгоритмы к разрывным функциям, подразумевая, например, дифференцирование в обобщенном смысле, то в результате появятся новые слагаемые типа  $\delta$ -функции, которые сделают дальнейший анализ проблемы неопределенно трудным.

### Конкретный пример иллюстративного характера

Рассмотрим случай, когда рассматриваемый объект – это шар единичного радиуса (1,0) с центром в начале координат, содержащий неоднородность, а именно – шар радиуса 0,5 также с центром в начале координат. Таким образом,

$$G = \{x \in E^3 : |x| < 1\}, \quad G = \overline{G_1} \cup G_2,$$

$$G_1 = \{x \in E^3 : |x| < 0,5\}, \quad G_2 = \{x \in E^3 : 0,5 < |x| < 1\}.$$

Для упрощения будем предполагать, что  $F(x, y) = 1$ , а функция  $f$  кусочно-постоянная:

$$f(x) = \begin{cases} f_1, & |x| < 0,5, \\ f_2, & 0,5 < |x| < 1. \end{cases}$$

Видно, что выполнены все требования этой задачи, включая условие обобщенной выпуклости для поверхности разрывов.

Тогда интеграл по плоскости, т. е.  $I(x, \omega)$ , принимает следующий вид:

$$\int_{(y-x, \omega)=0} f(y) d_y \sigma = \begin{cases} \pi f_1(0, 25 - (\omega \cdot x)^2) + 0,75\pi f_2, & |\omega \cdot x| < 0,5, \\ \pi f_2(1 - (\omega \cdot x)^2), & 0,5 < |\omega \cdot x| < 1. \end{cases}$$

Далее проинтегрируем его по единичной сфере. Для этого перейдем к сферической системе координат и разобьем интегрирование на две части, в одной из которых плоскости пересекают области  $G_1$  и  $G_2$ , а во второй – только множество  $G_2$ . В результате получим равенство

$$\int_{\Omega} I(x, \omega) d\omega = \begin{cases} 4\pi^2(0,25f_1 + 0,75f_2 - \frac{f_1|x|^2}{3}), & |x| < 0,5, \\ 4\pi^2\left(f_2 - \frac{f_2|x|^2}{3} + \frac{2(f_1 - f_2)}{3|x|}\right), & 0,5 < |x| < 1. \end{cases}$$

Вычислим лапласиан от этого интеграла:

$$\Delta_x \int_{\Omega} I(x, \omega) d\omega = \begin{cases} -8\pi^2 f_1, & |x| < 0,5, \\ -8\pi^2 f_2, & 0,5 < |x| < 1. \end{cases} \quad (13)$$

Видно, что последнее выражение представляет собой разрывную функцию, если  $f_1 \neq f_2$ , а искомая поверхность – это сфера радиусом 0,5 с центром в начале координат.

Полученный ответ соответствует выводам общей теории, что косвенно подтверждает правильность наших рассуждений.

### Заключение

Проведенное исследование имеет теоретический характер, представляя собой принципиальную возможность нахождения неизвестной границы, что может быть полезным инструментом в теории зондирования сред физическими сигналами. Предполагается, что дальнейшие вопросы, связанные с численной реализацией алгоритма, будут рассмотрены авторами позже. При этом, если ориентироваться на возможные приложения, важно использовать как можно более слабые ограничения. Исходя из этого, мы допустили случай разрывной подынтегральной функции в обобщенном преобразовании Радона и ее зависимость от многих переменных. К сожалению, мы пока вынуждены ограничить наши утверждения условием обобщенной выпуклости для поверхностей разрывов. Возможным развитием полученных результатов будет дальнейшее ослабление ограничений и повышение эффективности разрабатываемого алгоритма.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хелгасон С. Преобразование Радона. Пер. с англ. М.: Мир, 1983. 152 с.
2. Курант Р. Уравнения с частными производными. Пер. с англ. М.: Мир, 1964. 832 с.
3. Йон Ф. Плоские волны и сферические средние в применении к дифференциальным уравнениям с частными производными. М.: Изд-во иностранной литературы, 1958. 160 с.
4. Гельфанд И. М., Граев М. И., Виленкин Н. Я. Интегральная геометрия и связанные с ней вопросы теории представлений. М.: Физматгиз, 1962. 656 с.
5. Лаврентьев М. М., Савельев Л. Я. Теория операторов и некорректные задачи. 2-е изд., перераб. и доп. Новосибирск: Изд-во Института математики, 2010. 912 с.
6. Коганов А. В. Задача интегральной геометрии с мероиндукцией // Компьютерные исследования и моделирование. 2011. Т. 3. № 1. С. 31–37.
7. Kalnin T. G., Ivonin D. A., Abrosimov K. N., Grachev E. A., Sorokina N. V. Analysis of tomographic images of the soil pore space structure by integral geometry methods // Eurasian Soil Science. 2021. Vol. 54. No. 9. Pp. 1400–1409.
8. Ляхов Л. Н., Лапшина М. Г., Рошупкин С. А. Теорема о носителе для  $K_\nu$ -преобразования Радона – Киприянова // Материалы Воронежской зимней математической школы «Современные методы теории функций и смежные проблемы». 28 января – 2 февраля 2019 г. Ч. 2.





Итоги науки и техники. Сер. Соврем. мат. и ее прил. Темат. обз. 2019. Т. 171. С. 118–124.

9. **Темиргалиев Н., Абикенова Ш. К., Ажгалиев Ш. У., Таугынбаева Г. Е.** Преобразование Радона в схеме  $K(N)D$ -исследований и теории квази-Монте-Карло // Известия вузов. Математика. 2020. № 3. С. 98–104.

10. **Баев А. В.** Использование преобразования Радона для решения обратной задачи рассеяния в плоской слоистой акустической среде // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2018. Т. 58. № 4. С. 550–560.

11. **Симонов Е. Н., Прохоров А. В., Акинцева А. В.** Математическое моделирование реконструкции объемных изображений в рентгеновской компьютерной томографии с применением голографических методов // Вестник Южно-Уральского гос. ун-та. Сер. Математическое моделирование и программирование. 2019. Т. 12. № 3. С. 102–114.

12. **Derevtsov E. Yu., Volkov Yu. S., Schuster T.** Differential equations and uniqueness theorems for the generalized attenuated ray transforms of tensor fields // Numerical computations: Theory and algorithms. Part II. Sergeyev Ya. D., Kvasov D. E. (Eds.). Lecture Notes in Computer Science. 2020. Vol. 11974. Pp. 97–111.

13. **Светов И. Е.** Метод приближенного обращения для операторов преобразования Радона функций и нормального преобразования Радона векторных и симметричных 2-тензорных полей в  $R^3$  // Сибирские электронные математические известия. 2020. Т. 17. С. 1073–1087.

14. **Polyakova A. P.** Singular value decomposition of a normal Radon transform operator acting on 3D symmetric 2-tensor fields // Siberian Electronic Mathematical Reports. 2021. Vol. 18. No. 2. Pp. 1572–1595.

15. **Anikonov D. S., Prokhorov I. V., Kovtanyuk A. E.** Investigation of scattering and absorbing media by methods of X-ray tomography // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 1993. Vol. 1. No. 4. Pp. 259–281.

16. **Вайнберг Э. И., Казак И. А., Файнгойз М. Л.** Рентгеновская вычислительная томография по методу обратного проецирования с фильтрацией двойным дифференцированием // Дефектоскопия. 1985. № 2. С. 31–39.

17. **Деревцов Е. Ю., Мальцева С. В., Светов И. Е.** Определение разрывов функции, заданной в области с рефракцией, по ее экспоненциальному лучевому преобразованию // Сибирский журнал промышленной математики. 2018. Т. 21. № 4. С. 51–74.

## REFERENCES

1. **Helgason S.**, The Radon transform, 2<sup>nd</sup> edition, (Progress in mathematics. Vol. 5), Springer Science, Cambridge, USA, 1927.

2. **Courant R.**, Partial differential equations, Interscience, France, 1962.

3. **John F.**, Plane waves and spherical means applied to partial differential equations, Springer, New York, 1981.

4. **Gelfand I. M., Grayev M. I., Vilenkin N. Ya.**, Integral geometry and representation theory (Generalized Functions, Vol. 5), Translated by Saletan E. J., Elsevier Inc. All, 1966.

5. **Lavrent'ev M. M., Savel'ev L. Ya.**, Operator theory and ill-posed problems: Posed problems (Inverse and ill-posed problems), Brill Academic Publishers, Leyden, Netherlands, 2006.

6. **Koganov A. V.**, The task of integral geometry with measure induction, Computer Research and Modeling. 3 (1) (2011) 31–37 (in Russian).

7. **Kalnin T. G., Ivonin D. A., Abrosimov K. N., et al.**, Analysis of tomographic images of the soil pore space structure by integral geometry methods, Eurasian Soil Sci. 54 (9) (2021) 1400–1409.

8. **Lyakhov L. N., Lapshina M. G., Roshchupkin S. A.**, Support theorem for the Radon – Kipriyanov  $K_\gamma$  - transform, Itogi Nauki i Tekhn. Ser. Sovrem. Mat. Pril. Temat. Obz. 171 (2019) 118–124 (in Russian).

9. **Temirgaliyev N., Abikeno Sh. K., Azhgaliyev Sh. U., Taugynbayeva G. E.**, The Radon transform in the scheme  $C(N)D$ -investigations and the quasi-Monte Carlo theory, Russian Math. (Iz. VUZ). 64 (3) (2020) 87–92.

10. **Bayev A. V.**, Radon transform for solving an inverse scattering problem in a planar layered acoustic medium, Comput. Math. Math. Phys. 58 (4) (2018) 537–547.

11. **Simonov E. N., Prokhorov A. V., Akintseva A. V.**, Mathematical modelling of reconstruction of volumetric images in X-ray computed tomography using holographic methods, Vestnik YuUrGU. Ser.

Mat. Model. Progr. 12 (3) (2019) 102–114 (in Russian).

12. **Derevtsov E. Yu., Volkov Yu. S., Schuster T.**, Differential equations and uniqueness theorems for the generalized attenuated ray transforms of tensor fields, In book: Numerical computations: Theory and algorithms, Part II. Sergeyev Ya. D., Kvasov D. E. (Eds.); Lecture Notes in Computer Science. 11974 (2020) 97–111.

13. **Svetov I. E.**, The method of approximate inverse for the Radon transform operator acting on vector and symmetric 2-tensor fields in  $R^3$ , Siberian Electronic Mathematical Reports. 17 (2020) 1073–1087 (in Russian).

14. **Polyakova A. P.**, Singular value decomposition of a normal Radon transform operator acting on 3D symmetric 2-tensor fields, Siberian Electronic Mathematical Reports. 18 (2) (2021) 1572–1595.

15. **Anikonov D. S., Prokhorov I. V., Kovtanyuk A. E.**, Investigation of scattering and absorbing media by methods of X-ray tomography, J. Inv. Ill-Posed Probl. 1 (4) (1993) 259–281.

16. **Vainberg E. I., Kazak I. A., Faingoiz M. L.**, X-ray computerized back projection tomography with filtration by double differentiation. Procedure and information features, Soviet J. Nondest. Test. 21 (2) (1985) 106–113.

17. **Derevtsov E. Y., Maltseva S. V., Svetov I. E.**, Determination of discontinuities of a function in a domain with refraction from its attenuated ray transform, J. Appl. Ind. Math. 12 (4) (2018) 619–641.

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**АНИКОНОВ Дмитрий Сергеевич** – доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией условно-корректных задач Института математики имени С. Л. Соболева СО РАН, г. Новосибирск, Россия.

630090, Россия, г. Новосибирск, ул. Коптюга, 4

anik@math.nsc.ru

ORCID: 0000-0003-4056-0988

**БАЛАКИНА Екатерина Юрьевна** – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории условно-корректных задач Института математики имени С. Л. Соболева СО РАН, г. Новосибирск, Россия.

630090, Россия, г. Новосибирск, ул. Коптюга, 4

balakina@math.nsc.ru

ORCID: 0000-0002-5696-4525

**КОНОВАЛОВА Дина Сергеевна** – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории условно-корректных задач Института математики имени С. Л. Соболева СО РАН, г. Новосибирск, Россия.

630090, Россия, г. Новосибирск, ул. Коптюга, 4

dsk@math.nsc.ru

ORCID: 0000-0003-1200-4116

### THE AUTHORS

**ANIKONOV Dmitry S.**

*Sobolev Institute of Mathematics*

4 Acad. Koptyug Ave., Novosibirsk, 630090, Russia

anik@math.nsc.ru

ORCID: 0000-0003-4056-0988

**BALAKINA Ekaterina Yu.**

*Sobolev Institute of Mathematics*

4 Acad. Koptyug Ave., Novosibirsk, 630090, Russia

balakina@math.nsc.ru

ORCID: 0000-0002-5696-4525



**KONOVALOVA Dina S.**

*Sobolev Institute of Mathematics*

4 Acad. Koptug Ave., Novosibirsk, 630090, Russia

dsk@math.nsc.ru

ORCID: 0000-0003-1200-4116

*Статья поступила в редакцию 04.03.2022. Одобрена после рецензирования 16.03.2022.  
Принята 16.03.2022.*

*Received 04.03.2022. Approved after reviewing 16.03.2022. Accepted 16.03.2022.*

## Физическая электроника

Научная статья

УДК 533.9.01

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15105>

### **АНОМАЛЬНЫЙ РАЗОГРЕВ ЧАСТИЦ В ПЛАЗМЕННО-ПЫЛЕВЫХ СТРУКТУРАХ**

**С. И. Мольков** ✉, **А. С. Штыков**

Петрозаводский государственный университет, г. Петрозаводск, Россия

✉ [tandem@onego.ru](mailto:tandem@onego.ru)

**Аннотация.** С целью объяснения природы аномального разогрева пылевых частиц в плазменно-пылевых структурах (ППС) на основе инертных газов, в работе исследуются экспериментально и теоретически кинетические характеристики ППС. Для инжектирования пылевого компонента применялся контейнер с частицами полидисперсных материалов разной природы (оксид алюминия и цинк). Визуализация и мониторинг поведения ППС, а также измерение параметров плазмы осуществлялись с помощью специально созданного программно-аппаратного комплекса. Экспериментально определены скорости и температуры различных пылевых частиц в зависимости от условий разряда. Анализ полученных результатов позволил выявить особенности процессов и предложить объяснение механизма разогрева и диссипации энергии частиц в упорядоченной и хаотической ППС.

**Ключевые слова:** плазменно-пылевая структура, аномальный разогрев, свободномолекулярный режим, среднеквадратичное смещение

**Для цитирования:** Мольков С. И., Штыков А. С. Аномальный разогрев частиц в плазменно-пылевых структурах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 1. С 52–61. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15105>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15105>

### **ABNORMAL PARTICLE HEATING IN THE PLASMA DUST STRUCTURES**

**S. I. Mol'kov** ✉, **A. S. Shtykov**

Petrozavodsk State University, Petrozavodsk, Russia

✉ [tandem@onego.ru](mailto:tandem@onego.ru)

**Abstract.** In order to explain the nature of abnormal particle heating in the plasma dust structures (PDS) based on helium-group gases, kinetic characteristics of PDS have been studied experimentally and theoretically. To inject the dust component, a container with particles of dispersed materials of different nature was used. The visualization and monitoring of PDS behavior as well as measuring of plasma parameters were carried out via specially designed hardware and software complex. The rates and temperatures of dust particles depending on the discharge conditions were determined experimentally. An analysis of the obtained results made it possible to reveal the process peculiarities and to put forward the explanation of mechanism of heating and dissipation of particle energy in the ordered and chaotic PDSs.



**Keywords:** plasma dust structure, abnormal particle heating, free-molecular condition, RMS-bias

**For citation:** Mol'kov S. I., Shtykov A. S., Abnormal particle heating in the plasma dust structures, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (1) (2022) 52–61. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15105>

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

## Введение

Пылевая плазма может служить примером открытой неравновесной системы, в которой происходит процесс самоорганизации с образованием диссипативных структур [1]. Массивные пылевые частицы в слабоионизованной плазме эффективно рассеивают свою кинетическую энергию за счет столкновений с нейтральными атомами с частотой  $\nu_{da}$ , поэтому предполагается, что они находятся в равновесии с атомной компонентой и их температура  $T_d$  равна температуре атомов  $T_a$  ( $T_a = 300 \text{ К} = 0,026 \text{ эВ}$ ). Реально в эксперименте средняя скорость частиц  $v_d$  достигает значения примерно  $0,5 \text{ мм/с}$  при массе  $m \approx 0,1 \text{ мкг}$ . При этом кинетическая энергия частицы пылевой компоненты составляет около  $10 \text{ аДж}$  ( $10^{-17} \text{ Дж}$ ), что соответствует температуре порядка  $10^3 T_a$ . Природу аномального разогрева пылевой компоненты связывают со стохастическими флуктуациями их заряда [2, 3]. Оценки значений  $T_d$  по формулам, приведенным в монографии [4], не соответствуют нашим экспериментальным данным (см. результаты, приведенные далее), поэтому истинную природу разогрева пылевых частиц в плазменно-пылевых структурах (ППС) нельзя считать окончательно установленной.

Цель настоящей работы – выявить особенности поведения плазменно-пылевых структур и на этой основе предложить объяснение природы аномального разогрева пылевых частиц в таких структурах.

## Описание эксперимента

Для проведения эксперимента была использована установка «плазменный кристалл», описание которой приведено в нашей статье [5]. Стеклообразная разрядная трубка радиусом  $1,5 \text{ см}$ , в которой индуцировалась плазма тлеющего разряда и формировалась ППС, заполнялась рабочим газом (гелий, неон или аргон) под давлением от  $0,15$  до  $3,0 \text{ Торр}$  при токе разряда  $0,1 - 3,0 \text{ мА}$ . Для инжектирования пылевого компонента применялся контейнер с частицами полидисперсных материалов разной природы:

- оксида алюминия  $\text{Al}_2\text{O}_3$  со средним радиусом  $a \approx 23 \text{ мкм}$  и массой  $m \approx 0,20 \text{ мкг}$ ;
- полидисперсного цинка  $\text{Zn}$  со средним радиусом  $a \approx 28 \text{ мкм}$  и  $m \approx 0,65 \text{ мкг}$ ;
- той же природы ( $\text{Zn}$ ), но  $a \approx 8 \text{ мкм}$  и  $m \approx 0,015 \text{ мкг}$ .

Визуализация пылевой структуры осуществлялась с помощью импульсного полупроводникового лазера DTL-316 (рабочая длина волны  $\lambda = 532 \text{ нм}$ ) и набора линз, формирующих «лазерный нож»; в рассеянном свете такого «ножа» возможно наблюдение ППС.

В состав программно-аппаратного комплекса для видеоизображений входила скоростная видеокамера «Hispec 1», а также программное обеспечение «Hispec Control Software»; система обеспечивала получение данных в течение  $1 \text{ мин}$  с разными скоростями (от  $25$  до  $1500 \text{ кадр/с}$ ) в режиме реального времени. Экспериментальную установку собирали с учетом возможности одновременной регистрации электрических характеристик плазмы и давления плазмообразующего газа. Для измерения параметров плазмы (температура электронов, концентрация заряженных частиц) использовали автоматизированный комплекс для регистрации зондовых характеристик.

На рис. 1 представлены траектории движения частиц цинка для разряда в атмосфере неона под давлением  $p = 1 \text{ Торр}$ , при токе разряда  $I = 1,5 \text{ мА}$  и на разных скоростях съемки скоростной камерой.

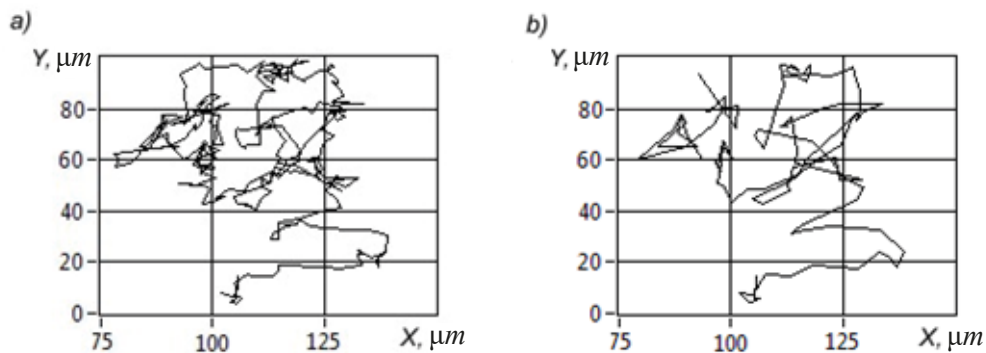


Рис. 1. Траектории движения пылевых частиц цинка в атмосфере неона, полученные на двух скоростях съемки, кадр/с: 1500 (а) и 250 (b); давление  $p = 1$  Торр, ток разряда  $I = 1,5$  мА

Скорость частицы определяется отношением расстояния между двумя положениями частицы к интервалу времени, равному обратной частоте кадров видеосъемки  $n$ . Ошибка в определении скорости сначала уменьшается с ростом частоты кадров  $n$ , а затем начинает нарастать по мере того, как расстояние, проходимое частицей между кадрами, становится сравнимым с ее размером. Оптимальный диапазон частот съемки скоростной камерой был определен экспериментальным путем и составил 250 – 500 кадр/с [5]; основанием послужили результаты измерений скоростей частиц для ППС в «жидком» фазовом состоянии, включающем частицы, левитирующие в плазме аргона, неона или гелия. При этом доверительный интервал для средней скорости  $v_d$ , определяемой по серии измерений, составил 90 %.

На рис. 2 представлены типичные зависимости средней скорости частиц оксида алюминия от тока разряда в атмосфере неона при различных давлениях.

Анализ полученных экспериментальных данных для средней скорости частиц  $v_d$  и связанной со скоростью температурой  $T_d = m_d v_d^2 / 3k$  ( $k$  – постоянная Больцмана) показывает, что они слабо зависят от тока и определяются давлением. Кроме скорости перемещения частиц, в эксперименте определяли расстояния между ними  $r_d$  в зависимости от условий разряда. В рассмотренном диапазоне разрядных условий справедливы

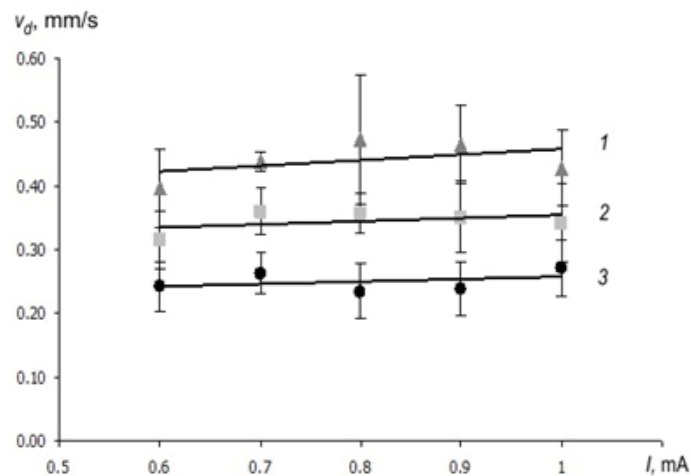


Рис. 2. Экспериментальные зависимости средней скорости перемещения частиц  $Al_2O_3$  в атмосфере неона от тока разряда при различных давлениях неона  $p$ , Торр: 0,3 (1), 0,6 (2) и 0,9 (3)



следующие приближенные формулы:

$$v_d \approx v_0 \sqrt{\frac{p_0}{p}}, \quad T_d \approx T_0 \frac{p_0}{p} = \frac{m_d v_0^2}{3k} \frac{p_0}{p}, \quad r_d \approx r_0 (1 + \mu I) \sqrt{\frac{p}{p_0}}, \quad (1)$$

где  $v_0$ , мм/с, – скорость при  $p = p_0 = 0,3$  Торр;  $T_0$ , К, – соответствующая температура;  $I$ , мА, – ток.

Величины  $v_0$ ,  $r_0$  и постоянная  $\mu$  зависят от рода газа и характеристик частиц. Так например, для ППС Ne – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> они имеют следующие значения:

$$v_0 = 0,44 \text{ мм/с}, \quad T_0 = 9,4 \cdot 10^5 \text{ К}, \quad r_0 = 130 \text{ мкм}, \quad \mu = 0,38.$$

Давление определяет эффективную температуру электронов  $T_e$ , а ток разряда – их концентрацию  $n_0$ . Чем легче плазмообразующий газ, тем меньше величина  $r_d$ . Например, при  $p = 0,6$  Торр наблюдается следующая зависимость:

Газ	$r_d$ , мкм
Ar	330
Ne	200
He	140

Это, возможно, связано с различием в температурах электронов  $T_e$  при одинаковых давлениях и токах. В частности, при  $I = 1$  мА,  $pR = 0,9$  Торр·см ( $R$ , см, – радиус трубки) наблюдается такая зависимость:

Газ	$T_e$ , эВ
Ar	1,4
Ne	2,8
He	3,7

В самом деле, согласно формуле (10) (см. далее), отношение зарядов  $|Z_d|$  частиц одинакового размера для различных газов Ar : Ne : He определяется как 1,0 : 2,0 : 2,6, что хорошо коррелирует с отношением обратных расстояний  $(r_d)^{-1}$  между частицами: 1,0 : 1,7 : 2,3.

Распределение по проекциям скорости по горизонтальной оси ( $Ox$ ) и по вертикальной оси ( $Oy$ ), определенное как для отдельной пылевой частицы, так и для их ансамбля, соответствует нормальному распределению, что согласуется с результатами, полученными в работе [6].

### Определение скорости и температуры пылевых частиц

Функция распределения (ФР) по компонентам скорости пылевых частиц аппроксимируется ФР Максвелла [7]:

$$f(v_i) = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \exp(-\beta v_i^2), \quad (2)$$

где  $\beta = m_d / 2kT_{di}$  ( $T_{di}$  – температуры пылевых частиц в вертикальной ( $i = y$ ) и горизонтальной ( $i = x$ ) плоскостях;  $m_d$  – масса пылевых частиц).

Тогда для  $T_{di}$  (К) получаем выражение

$$T_{di} = \frac{m_d}{(2 \ln 2)k} \left( \frac{\Delta v_i}{2} \right)^2, \quad (3)$$

или

$$T_{di} [\text{К}] = 1,3 \cdot 10^{16} m_d \Delta v_i^2,$$

где  $\Delta v_i$  – ширина ФР по уровню 0,5;  $m_d$  в кг, а  $\Delta v_i$  – в мм/с.

Из анализа экспериментальных данных, например, для разряда в аргоне с пылевыми частицами  $Al_2O_3$  массой  $m_d = 0,2$  мкг, при  $p = 0,6$  Торр,  $I = 0,6$  мА, получаем, что  $\Delta v_x = 0,35$  мм/с,  $\Delta v_y = 0,53$  мм/с. Расчет по формуле (2) дает значения температуры по осям  $x$  и  $y$ :

$$T_{dx} \approx 3,2 \cdot 10^5 \text{ К} \approx 27 \text{ эВ}; T_{dy} \approx 7,3 \cdot 10^5 \text{ К} \approx 63 \text{ эВ}.$$

Таким образом, ФР пылевых частиц является анизотропной.

Хаотическая скорость пылевой компоненты  $v_d$  связана с температурой пылевых частиц как

$$m_d v_d^2 / 2 = 3 T_d / 2,$$

где  $T_d = (2 T_{dx} + T_{dy}) / 3$ .

Тогда температура  $T_d$  (К) пылевых частиц следует выражению

$$T_d = 2,4 \cdot 10^{16} m_d v_d^2, \quad (4)$$

где  $m_d$  в кг, а  $v_d$  – в мм/с.

#### Уравнение баланса энергии и температуры пылевых частиц

Для определения механизма разогрева пылевых частиц до температур порядка десятков электронвольт и последующего охлаждения необходимо рассмотреть уравнение движения частиц:

$$m_d \frac{d\mathbf{u}}{dt} = eZ_d \mathbf{E} - m_d v_{da} \mathbf{u} + \mathbf{f}_r, \quad (5)$$

где  $eZ_d$  – заряд пылевой частицы;  $\mathbf{u}$  – мгновенная скорость частицы;  $v_{da}$  – частота передачи импульса при столкновении частицы с атомами;  $\mathbf{E}$  – локальная напряженность электрического поля;  $\mathbf{f}_r$  – случайная сила Ланжевена, вызванная столкновениями с атомами, ионами и электронами.

Частота передачи импульса  $v_{da}$  с учетом того, что число Кнудсена  $Kn = \lambda_a / a \gg 1$  ( $\lambda_a$  – длина свободного пробега атома,  $a$  – радиус частицы), для свободномолекулярного режима выражается следующим образом [4]:

$$v_{da} = \frac{8\sqrt{2\pi}\gamma a^2 n_a T_a}{3 m_d v_{T_a}}, \quad (6)$$

или

$$v_{da} = 1,16 \cdot 10^{-11} a^2 (p/m_d) (m_a/T_a)^{1/2},$$

где  $a$ , мкм, – радиус пылевой частицы;  $p$ , Торр, – давление,  $m_d$ , кг, – масса пылевой частицы,  $m_a$ , а. е. м., – масса атома плазмообразующего газа;  $v_{T_a} = \sqrt{T_a/m_a}$  – тепловая скорость атомов;  $\gamma$  – коэффициент, зависящий от характера аккомодации атомов при столкновении с пылевой частицей,  $1 < \gamma < 1,39$  (в расчетной формуле  $\gamma = 1,2$ ).

Домножая уравнение (5) на  $\mathbf{u}$  и усредняя его по ансамблю пылевых частиц в пределах единицы объема, получаем:

$$n_d \frac{d}{dt} \frac{m_d \langle u^2 \rangle}{2} = \langle \mathbf{j}_d \mathbf{E} \rangle - 2v_{da} n_d \frac{m_d \langle u^2 \rangle}{2} + n_d \langle \mathbf{u} \mathbf{f}_r \rangle, \quad (7)$$

где последний член после усреднения заменяем нулем (в силу отсутствия корреляции между  $\mathbf{f}_r$  и  $\mathbf{u}$ );  $\mathbf{j}_d$  – плотность тока пылевых частиц;  $\mathbf{E}$  – локальная напряженность электрического поля вблизи частицы;  $n_d$  – концентрация пылевых частиц;  $\langle \mathbf{j}_d \mathbf{E} \rangle = W_d$  – плот-





ность мощности, выделяемой в разряде и идущей на разогрев пылевых частиц при условии усреднения не только по ансамблю, но и по времени, так как величины  $\mathbf{j}_d$  и  $\mathbf{E}$  колеблются вблизи средних значений.

Учитывая, что  $\langle u^2 \rangle = v_d^2$  а также связь температуры и скорости пылевых частиц, получаем уравнение для температуры пылевых частиц:

$$\frac{dT_d}{dt} + 2v_{da}T_d = \frac{2W_d}{3n_d k}. \quad (8)$$

Решая данное уравнение с начальным условием  $T_d = T_a$ , получаем временную зависимость ( $t$  – время) для температуры пылевых частиц:

$$T_d = T_a \exp(-2v_{da}t) + \frac{W_d}{3n_d v_{da} k} [1 - \exp(-2v_{da}t)]. \quad (9)$$

Разогрев пылевой компоненты происходит за характерное время  $\tau \approx (2v_{da})^{-1}$  до температуры, определяемой множителем  $W_d / 3n_d v_{da} k$ . При учете выражения (1) зависимость  $W_d$  от давления принимает вид  $W_d \sim 1/p^{3/2}$ , что приблизительно соответствует экспериментальным данным (см. таблицу). Величину  $W_d$  можно оценить, если использовать значе-

Таблица

**Полученные экспериментальные и расчетные характеристики плазменно-пылевой структуры Ne – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>**

Параметр	Значение при давлении $p$ , Торр			Расчетная формула (либо эксперимент)
	0,3	0,6	0,9	
$T_e$ , эВ	3,4	2,8	2,5	Эксперимент, расчет (см. [10])
$v_d$ , мм/с	0,44	0,35	0,25	Эксперимент
$T_d$ , 10 <sup>3</sup> К	940	590	300	$T_d = 3m_d v_d^2 / k$
	270	193	155	Расчет (см. [4])
$r_d$ , мкм	160	225	280	Эксперимент
$n_d$ , 10 <sup>5</sup> см <sup>-3</sup>	2,44	0,88	0,46	$n_d = 10^{12} / r_d^3$
$\Gamma$	≈ 100	≈ 120	≈ 180	$\Gamma = (eZ_d)^2 / r_d T_d$ (для оценки)
$W_d$ , 10 <sup>-11</sup> Вт·см <sup>-3</sup>	2,28	1,03	0,41	$W_d = 3n_d v_{da} k T_d$
$r_c$ , мкм	22,0	17,5	12,5	$r_c = \sqrt{3kT_d / \alpha}$
$E_d$ , В/см	3,67	2,92	2,09	$E_d = \alpha r_c / e Z_d $
$j_d$ , 10 <sup>-11</sup> А·см <sup>-2</sup>	0,62	0,35	0,196	$j_d = W_d / E_d$
$r_c / r_d$	0,14	0,08	0,045	Критерий Линдемана

Обозначения:  $T_e$ ,  $T_d$  – эффективная температура электронов и температура пылевых частиц (ПЧ), соответственно;  $v_d$ ,  $r_d$  – средняя скорость ПЧ и расстояние между ними;  $n_d$  – концентрация ПЧ;  $r_c$  – среднеквадратичное смещение ПЧ из положения равновесия в условной кристаллической решетке;  $\Gamma$  – параметр неидеальности системы;  $W_d$  – плотность мощности, выделяемой в разряде и идущей на разогрев пылевых частиц;  $E_d$  – усредненная напряженность электрического поля;  $j_d$  – плотность тока ПЧ;  $m_d$ ,  $eZ_d$  – масса и заряд ПЧ;  $v_{da}$  – частота столкновений ПЧ с нейтральными атомами;  $\alpha$  – коэффициент упругости;  $k$  – постоянная Больцмана.

Примечание. Для всех данных ток разряда  $I = 0,6$  мА.

ния экспериментально измеренных температур. В нашем случае она зависит от давления и силы тока и составляет величину порядка  $W_d \sim 10^{-11}$  Вт/см<sup>3</sup>, что значительно меньше плотности мощности, рассеиваемой в разряде ( $10^{-5}$  Вт/см<sup>3</sup>). Источник разогрева пылевых частиц  $W_d = \langle \mathbf{j}_d \mathbf{E} \rangle$  связан с их температурой  $T_d$  соотношением  $W_d = 3n_d v_{da} kT_d$ . Диссипация энергии пылевых частиц происходит при торможении за счет столкновения с атомами газа.

В таблице представлены полученные нами экспериментальные и расчетные результаты для ППС Ne–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> при различных давлениях и токе разряда  $I = 0,6$  мА. Приведенные характеристики ППС необходимы для обоснования предлагаемых выводов. Заряд частицы, измеряемый в элементарных зарядах, определяется балансом потоков ионов и электронов плазмы с учетом эмиссионных процессов на поверхности [8]:

$$|Z_d| = \frac{4\pi\epsilon_0 a}{e^2} T_e \eta_W (\tau_e) = 694 a T_e \eta_W (\tau_e), \quad (10)$$

где  $\tau_e$  – нормированная электронная температура ( $\tau_e = T_e / T_d$ );  $\eta_W$  – безразмерный потенциал частицы, зависящий от  $\tau_e$ ; величина  $a$  в мкм,  $T_e$  – в эВ.

С ростом температуры  $T_e$  потенциал  $\eta_W$  падает, так что  $\eta_W T_e \approx \text{const}$  [9].

Расчет значения  $Z_d$  с учетом неопределенности свойств поверхности частицы (степень шероховатости, виды эмиссии) дает  $|Z_d| = (3 \pm 0,6) 10^4$  (в элементарных единицах заряда).

При описании ППС используем параметр неидеальности системы  $\Gamma$ , равный отношению энергии электростатического взаимодействия частиц к их кинетической энергии, т. е.  $\Gamma = (eZ_d)^2 / r_d T_d$ . При  $p = 0,3$  Торр получаем значение  $\Gamma \approx 100$ ; при этом визуальное регистрируется плавление нижней части ППС. Критический параметр неидеальности  $\Gamma_c$ , соответствующий фазовому равновесию при  $r_d / \lambda_D \approx 1$ , составляет  $\Gamma_c = 106$  [1] ( $\lambda_D$  – дебаевский радиус экранирования). При  $\Gamma < \Gamma_c$  плазменно-пылевая система представляет собой жидкость; при повышении давления плавление прекращается, а величина  $\Gamma$  становится выше  $\Gamma_c$  (см. соответствующую строку таблицы) и ППС формируется как кристалл (в нашем случае это фаза с объемноцентрированной кубической решеткой (*bcc*)).

В таблице приведены среди прочих параметров значения  $T_d$ , найденные нами расчетным путем с использованием формул, приведенных в работе [4]; они существенно отличаются от наших результатов (приведены строкой выше). Таким образом, мощность источника разогрева пылевых частиц, связанного с флуктуацией их заряда, которая вызвана дискретностью тока зарядки [4], оказывается явно недостаточной для наблюдаемого разогрева частиц.

Рассмотрим величину  $W_d = \langle \mathbf{j}_d \mathbf{E} \rangle$ . Плотность тока пылевых частиц  $j_d$  обусловлена элементарными токами  $eZ_d v_d / r_d$  вблизи узлов кристаллической решетки. Проводя усреднение в пределах единицы объема, получаем оценку максимальной характерной плотности тока пылевых частиц:  $j_d^{\max} \sim eZ_d n_d v_d$ . Минимальная напряженность поля, соответствующая величине  $W_d$ , равна  $E_d^{\max} \sim W_d / j_d^{\max}$ .

Более точное значение напряженности поля вблизи узла кристаллической решетки можно оценить, если использовать частоту электростатических колебаний  $\omega_E$ . Для частиц различного материала и размера в разряде неона при  $\omega_E \sim 1/\sqrt{m_d} \sim 10 - 80$  с<sup>-1</sup>, и тогда коэффициент упругости  $\alpha = \omega_E^2 m_d \sim (8 \pm 2) 10^{-8}$  кг/с<sup>2</sup>. Упругая сила, действующая на частицу, позволяет оценить напряженность поля по формуле  $E_r = \alpha r / e |Z_d|$ , где  $r$  – радиальная координата.

Потенциал  $\phi$  на расстоянии  $r$  от частицы определяется выражением:

$$\phi = - \int E_r dr = \alpha r^2 / 2e |Z_d|.$$

Предполагая термодинамическое равновесие пылевой компоненты и используя теорему о равномерном распределении кинетической энергии по степеням свободы, имеем:

$$e |Z_d| \langle \phi \rangle = \alpha \langle r^2 \rangle / 2 = 3kT_d / 2, \quad (11)$$



или

$$r_c = \sqrt{\langle r^2 \rangle} = \sqrt{3kT_d/\alpha}. \quad (11)$$

Так, при  $T_d = 9,4 \cdot 10^5$  К получаем  $r_c = 22$  мкм, что соответствует наблюдаемым отклонениям частиц от положения равновесия (см. рис. 1). Из выражения (11) становится понятным физический смысл величины  $r_c$ : это среднеквадратичное смещение частицы из положения равновесия в условной кристаллической решетке. В таблице приведены значения  $r_c$  и соответствующие усредненные величины  $E_d = ar_c / e |Z_d|$  и  $j_d = W_d / E_d$ , обеспечивающие требуемое значение  $W_d$ . Согласно критерию плавления кристалла Линдемана [4],  $r_c / r_d \geq 0,15$ , что близко к нашим результатам:  $r_c / r_d = 0,14$ .

Таким образом, источник разогрева пылевых частиц лишь частично связан с флуктуацией их заряда, обусловленной дискретностью тока зарядки [2]. Данная пылевая частица в узле кристаллической решетки выводится из положения равновесия за счет случайных столкновений с атомами газа и благодаря силовому воздействию ближайших пылевых частиц, находящихся в непрерывном броуновском движении. При смещении из узла решетки потенциальная энергия возрастает в среднем на величину  $ar_c^2 / 2$ , которая преобразуется в кинетическую энергию направленного движения  $3kT_d / 2$ .

### Заключение

В работе исследованы кинетические характеристики пламенно-пылевых структур (ППС) как экспериментально с помощью высокоскоростной видеосъемки, так и теоретически. Определены скорости и температуры пылевых частиц в зависимости от условий разряда. Получено неплохое соответствие между теоретическими и экспериментальными результатами. Предложен сценарий механизма разогрева и диссипации энергии частиц в упорядоченной и хаотической пламенно-пылевой структуре.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Фортов В. Е., Храпак А. Г., Храпак С. А., Молотков В. И., Петров О. Ф.** Пылевая плазма // Успехи физических наук. 2004. Т. 174. № 5. С. 494–544.
2. **Morfill G. E., Thomas H.** Plasma crystal // Journal of Vacuum Science & Technology. A. 1996. Vol. 14. No. 2. Pp. 490–495.
3. **Ваулина О. С., Нефедов А. П., Петров О. Ф., Храпак С. А.** Роль стохастических флуктуаций заряда макрочастиц в пылевой плазме // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1999. Т. 115. № 6. С. 2067–2079.
4. **Ваулина О. С., Петров О. Ф., Фортов В. Е., Храпак А. Г., Храпак С. А.** Пылевая плазма: эксперимент и теория. М.: Физматлит, 2009, 315 с.
5. **Штыков А. С.** Измерение значений кинетических характеристик пламенно-пылевых систем с помощью высокоскоростной видеосъемки // Ученые записки Петрозаводского государственного университета. Серия: Естественные и технические науки. 2015. № 6 (151). С. 121–123.
6. **Жариков Н. Е., Пискунов А. А., Подрядчиков С. Ф., Семенов А. В., Хахаев А. Д., Щербина А. И.** Модификация свойств пламенно-пылевых структур и микрочастиц в комплексной плазме // Ученые записки Петрозаводского государственного университета. Серия: Естественные и технические науки. 2010. № 6 (111). С. 99–108.
7. **Биберман Л. М., Воробьев В. С., Якубов И. Т.** Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М.: Наука, 1982, 376 с.
8. **Мольков С. И., Савин В. Н.** Механизмы зарядки пылевых частиц в плазме с учетом эмиссионных процессов // Физика плазмы. 2017. Т. 43. № 2. С. 193–202.
9. **Савин В. Н., Мольков С. И.** Учет влияния эмиссионных процессов на заряд микро- и наночастиц в пылевой плазме для технологических приложений // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2016. № 3(248) С. 78–87.
10. **Прохорова Е. И., Платонов А. А., Мольков С. И., Игнахин В. С., Назаров А. И.** Влияние материала и степени шероховатости поверхности зонда на зондовые характеристики // Физика плазмы. 2020. Т. 46. № 5. С. 435–440.

## REFERENCES

1. Fortov V. E., Khrapak A. G., Khrapak S. A., et al., Dusty plasmas, *Physics-Uspekhi*. 47 (5) (2004) 447–492.
2. Morfill G. E., Thomas H., Plasma crystal, *J. Vacuum Sci. & Technol. A*. 14 (2) (1996) 490–495.
3. Vaulina O. S., Nefedov A. P., Petrov O. F., Khrapak S. A., Role of stochastic fluctuations in the charge on macroscopic particles in dusty plasmas, *JETP*. 88 (6) (1999) 1130–1136.
4. Vaulina O. S., Petrov O. F., Fortov V. E., et al., Pylevaya plazma: eksperiment i teoriya [Dusty plasmas: Experiment and theory], Fizmatlit, Moscow, 2009 (in Russian).
5. Shtykov A. S., The measuring of the kinetic characteristics values of dusty plasma using the high-speed video camera, *Proceedings of Petrozavodsk State University. Natural & Engineering Sciences*. (6 (151)) (2015) 121–123 (in Russian).
6. Zharikov N. E., Piskunov A. A., Podryadchikov S. F., et al., Dusty structure and microparticle properties modification in complex plasma, *Proceedings of Petrozavodsk State University. Natural & Engineering Sciences*. (6 (111)) (2010) 99–108 (in Russian).
7. Biberman, L. M., Vorob'ev V. S., Yakubov I. T., *Kinetika neravnovesnoy nizkotemperaturnoy plazmy* [Kinetics of nonequilibrium low temperature plasma], Nauka, Moscow, 1982 (in Russian).
8. Mol'kov S. I., Savin V. N., Mechanisms of dust grain charging in plasma with allowance for electron emission processes, *Plasma Physics Reports*. 43 (2) (2017) 202–212.
9. Savin V. N., Mol'kov S. I., The effect of electron emission processes on micro- and nanoparticle charges in the dusty plasma: the accounting for engineering, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. (3(248)) (2016) 78–87 (in Russian).
10. Prokhorova E. I., Platonov A. A., Mol'kov S. I., et al., The effect of material and roughness of the probe surface on probe characteristics, *Plasma Physics Reports*. 46 (5) (2020) 521–526.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**МОЛЬКОВ Сергей Иванович** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры электроники и электроэнергетики Петрозаводского государственного университета, г. Петрозаводск, Россия.

185910, Россия, г. Петрозаводск, пр. Ленина, 33.

tandem@onego.ru, molkov@petysu.ru

ORCID: 0000-0002-2792-0320

**ШТЫКОВ Алексей Сергеевич** – старший преподаватель кафедры информационно-измерительных систем и физической электроники Петрозаводского государственного университета, г. Петрозаводск, Россия.

185910, Россия, г. Петрозаводск, пр. Ленина, 33.

shtykoff@petsu.ru

ORCID: 0000-0003-4693-8881

## THE AUTHORS

**MOL'KOV Sergey I.**

*Petrozavodsk State University*

33, Lenin Ave., Petrozavodsk, 185910, Russia

tandem@onego.ru, molkov@petysu.ru

ORCID: 0000-0002-2792-0320

**SHTYKOV Aleksey S.**

*Petrozavodsk State University*

33, Lenin Ave., Petrozavodsk, 185910, Russia

shtykoff@petsu.ru

ORCID: 0000-0003-4693-8881



*Статья поступила в редакцию 13.12.2021. Одобрена после рецензирования 07.02.2022.  
Принята 08.02.2022.*

*Received 13.12.2021. Approved after reviewing 07.02.2022. Accepted 08.02.2022.*

Научная статья

УДК 620.22

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15106>

## СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПОВЕРХНОСТЕЙ РАЗРЫВА КОГЕЗИОННЫХ СВЯЗЕЙ В МНОГОСЛОЙНЫХ СИСТЕМАХ

**Н. В. Илясова**<sup>1</sup> ✉, **О. В. Кондракова**<sup>1</sup>,  
**А. И. Кудюкин**<sup>2</sup>, **Е. Н. Моос**<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Рязанский государственный медицинский университет имени академика И. П. Павлова, г. Рязань, Россия;

<sup>2</sup> Рязанский государственный университет имени С. А. Есенина, г. Рязань, Россия

✉ [ilyasowa-natalya@mail.ru](mailto:ilyasowa-natalya@mail.ru)

**Аннотация.** Проведены исследования поверхности разрыва на модельном объекте – инородном материале, который связывает компонент с костной тканью. В процессе работы использованы металлические и керамические брекет-системы. Фиксирование брекетов проведено в идентичных условиях с использованием одинаковых материалов по стандартному прямому методу фиксации. Участки поверхности костной ткани исследовали при снятии брекета, с помощью метода атомно-силовой микроскопии (АСМ). Благодаря применению опции «анализ», имеющейся у сканирующего зондового микроскопа, шероховатость исследуемых поверхностей была переведена в цифровую характеристику. Установлено, что среднее значение шероховатости поверхности разрыва (при снятии) для металлической брекет-системы составило 241 нм, а для керамической – 156 нм, что указывает на более чем полуторократное различие. Полученный результат может быть полезен в практической медицине при выборе брекет-системы.

**Ключевые слова:** брекет, костная ткань, поверхность разрыва, атомно-силовая микроскопия, поверхностное профилирование, растровое изображение

**Для цитирования:** Илясова Н. В., Кондракова О. В., Кудюкин А. И., Моос Е. Н. Сравнительный анализ поверхностей разрыва когезионных связей в многослойных системах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 1. С 62–69. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15106>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15106>

## SURFACES OF COHESIVE BONDS' FRACTURE IN THE MULTILAYER SYSTEMS: A COMPARATIVE ANALYSIS

**N. V. Ilyasova**<sup>1</sup> ✉, **O. V. Kondrakova**<sup>1</sup>,  
**A. I. Kudyukin**<sup>2</sup>, **E. N. Moos**<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Ryazan State Medical University, Ryazan, Russia;

<sup>2</sup> Ryazan State University named for S. A. Yesenin, Ryazan, Russia

✉ [ilyasowa-natalya@mail.ru](mailto:ilyasowa-natalya@mail.ru)



**Abstract.** Studies of the fracturing surfaces on foreign material as a model object that binds a component to bone tissue have been carried out. Metal and ceramic brackets were used during operation. Brackets were fixed using the same materials under the identical conditions, according to the standard direct fixing procedure. Areas of the bone surfaces were investigated (when brackets removed) with the aid of scanning atomic force microscopy (AFM). The studied roughness was digitized owing to the ‘analysis’ microscope option. As a result, the average value of the fracture surface roughness was found (when removed) to be 241 nm for the metal bracket systems and 156 nm for the ceramic ones. Ultimately, the difference was more than one and a half. This is useful in practical medicine when choosing a bracket system.

**Keywords:** bracket system, bone tissue, discontinuity surface, atomic force microscopy, surface profiling

**For citation:** Ilyasowa N. V., Kondrakova O. V., Kudyukin A. I., Moos E. N., Surfaces of cohesive bonds’ fracture in the multilayer systems: A comparative analysis, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (1) (2022) 62–69. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15106>

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

### Введение

Проблема физического материаловедения играет ключевую роль в медицинской отрасли. Известно, что существует проблема совместимости тканей живого организма с чужеродными материалами, например, при протезировании костей и суставов [1 – 7], фиксации брекет-систем. Данный аспект важен в связи с созданием многослойной структуры, основу которой представляет костная ткань, связующее вещество и металл или керамика. В настоящее время ортодонтическое лечение представлено большим выбором конструкций, в частности, для коррекции прикуса, выравнивания положения зубов применяют как съемные, так и несъемные ортодонтические аппараты [8 – 11]. Известно, что среди несъемных конструкций на стоматологическом рынке применяется эджуайз-техника (брекет-система). При их снятии существует риск повреждения зубной эмали, что может привести к появлению на ней трещин. Интерес практических врачей-ортодонтосов состоит в исследовании прочности соединения и наличия остатков клея под ортодонтическими конструкциями; последнее может оказывать негативное влияние при потреблении пациентом каких-либо химических реагентов [12].

Однако авторам настоящей статьи неизвестны работы, касающиеся топологии поверхности разрыва, которая должна служить в качестве оценивающего параметра. Данный аспект проблемы позволяет прогнозировать эффективность тех или иных технологических приемов.

Цель данного исследования – выявить особенности поверхностей разрыва металлических и керамических брекетов.

### Объекты и методы исследования

Характер разрыва поверхностей исследовали для двух брекет-систем, созданных одной компанией-производителем (3M Unitek, США): металлические Victory Series™ и керамические Clarity™. На малой выборке были подготовлены биопрепараты человеческих зубов, не пораженных кариесом и удаленных по ортодонтическим (ретинированные, дистопированные) и пародонтологическим показаниям.

Подготовку биопрепаратов осуществляли следующим образом. Поверхности всех зубов промывали в проточной воде, очищали от зубного налета при помощи циркулярных щеточек и полировочной пасты (Detartrine, Septodont). Подготовленные биопрепараты до проведения исследования хранили в физиологическом растворе (0,9%-ый раствор хлорида натрия). Фиксацию брекетов выполняли в соответствии с общепринятым

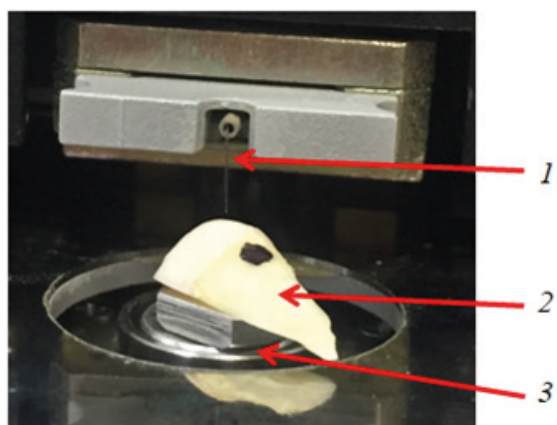


Рис. 1. Закрепленный образец зуба (2) на предметном столике (3) сканера и кантилевер (1) сканирующего зондового микроскопа

течение 10 с). На одном зубе зафиксировали одновременно оба брекета (металлический и керамический). Через 7 дней производили снятие системы с помощью атравматичных специальных щипцов. Затем с помощью поверхностного профилирования методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) исследовали участки поверхности каждого зуба. На рис. 1 показан образец зуба 2, закрепленный на предметном столике 3. При движении кантилевера 1 по исследуемой поверхности разрыва фиксируется ее профиль, из которого формируется растровое изображение.

У сканирующего зондового микроскопа есть опция «анализ», которая позволила перевести шероховатость исследуемой поверхности в цифровую характеристику.

### Результаты исследования и их обсуждение

Результаты вышеописанной измерительной процедуры представлены на рис. 2 – 4. По окончании сканирования поверхностей разрыва связующей системы многослойной структуры (зубная эмаль – клеящая система – брекеты) был проведен сравнительный анализ растровых изображений по двум ортогональным направлениям. На всех указанных иллюстрациях показаны линии сканирования кантилевера, вдоль которых измерялась шероховатость.

Сканирование велось по линиям 1 – 6, которые указаны на рис. 2, *a, b* и 3, *a, b*. Выявлены перепады высот порядка 200 нм вдоль одного профиля. В частности, при сканировании вдоль выбранного направления профиля 1 установлено, что при значении координаты  $x = 0,036$  происходит скачок по высоте  $y$  в диапазоне значений 0,63 – 0,84 (рис. 2, *c*). При сканировании вдоль профиля 4 наблюдался скачок по высоте  $y$  в диапазоне значений 0,16 – 0,43 при значении координаты  $x = 0,037$  (рис. 3, *c*).

Далее, на рис. 4, *a, b* представлены рельефы поверхностей (в декартовой системе координат), полученные после снятия металлического (4, *a*) и керамического (4, *b*) брекетов.

В таблице приведены значения средней шероховатости поверхности разрыва от металлических и керамических брекетов. На рис. 5 представлена диаграмма значений средней шероховатости поверхности зуба, которая показывает значительные вариации данной характеристики. Мы наблюдали неровности (пики и впадины) от 575,8 до –836,0 нм.

Сравнительный анализ результатов, представленных в таблице, показывает, что значения средней шероховатости поверхностей разрыва зубной эмали лежат в диапазоне от 143,4 до 212,0 нм у керамических брекетов и в диапазоне от 180,4 до 253,6 нм у металлических. Интегральный же результат средней шероховатости поверхности разрыва составил еще большую разницу: в диапазоне 74,79 – 212,0 нм у керамических и 143,4 – 391,6 нм у металлических. При одинаковом выборе материала и метода фиксации, металлическая брекет-система при снятии приводит к появлению неровности, значения

протоколом. Образцы зубов протравливали 37%-ым гелем ортофосфорной кислоты (ТРАВЕКС-37, Омега) в течение 30 с, затем удаляли гель с обрабатываемого участка путем обильного орошения воды и просушивали до полусухого меловидного состояния эмали.

На зубную эмаль и на основание брекета наносили праймер TRANSBOND XT (3M Unitek). Праймер активировали полимеризационной светодиодной лампой, излучающей на длинах волн 400 – 500 нм (УФ диапазон), в течение 40 с. Затем на основание брекета наносили светоотверждаемый адгезив TRANSBOND XT (3M Unitek) и фиксировали брекеты на поверхности зуба, предварительно убрав избыток материала. Затем этот брекеты отверждали при экспозиции светом на мезиальной, а затем на дистальной стороне брекета (в обоих случаях в



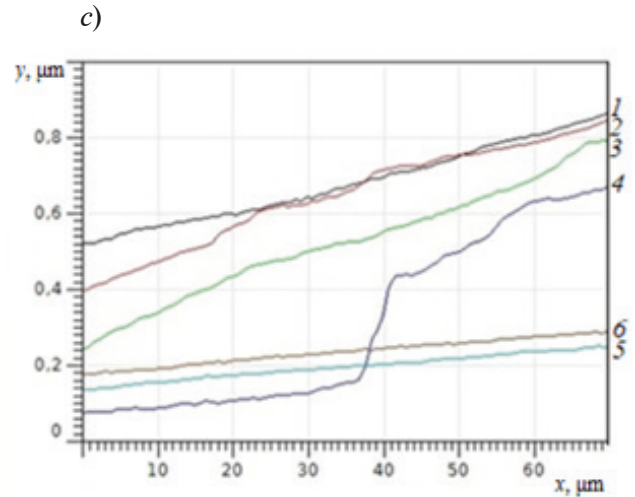
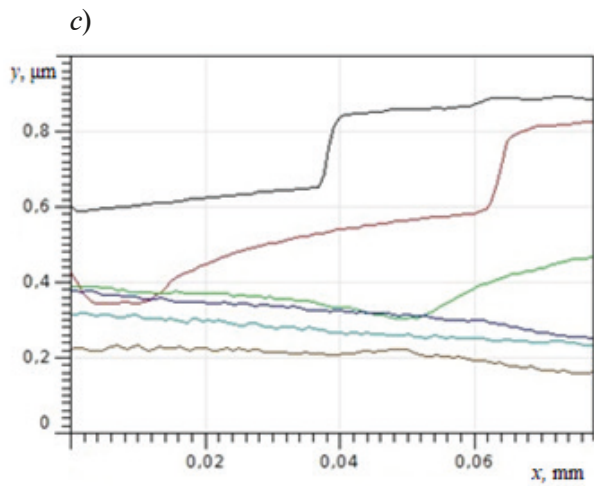
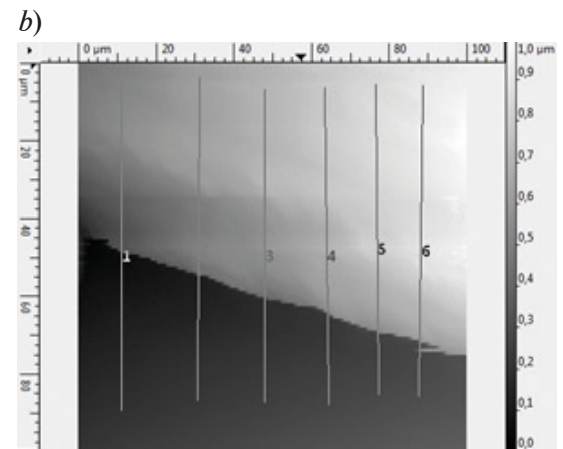
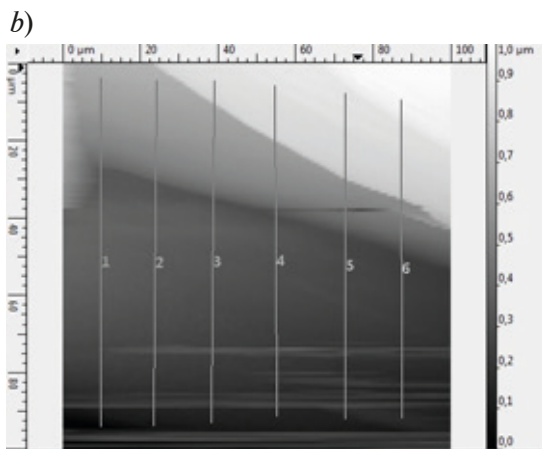
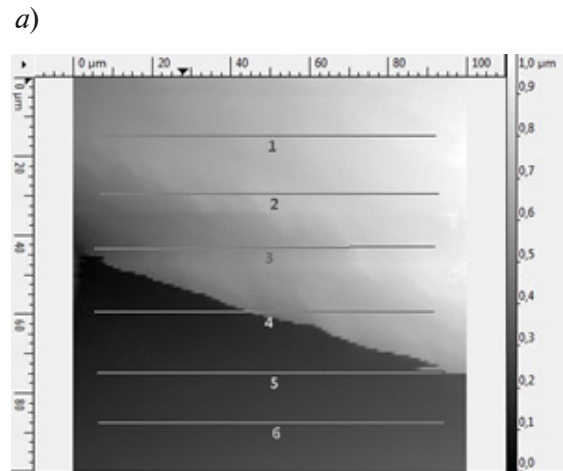
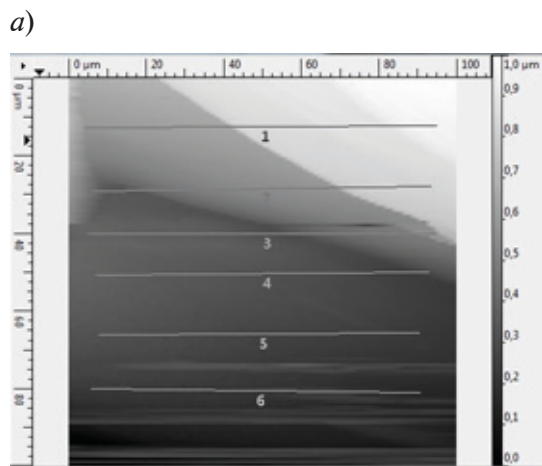


Рис. 2. Зависимости высоты рельефа от координаты сканирования по двум ортогональным направлениям (a, b) и график сканирования поверхности после снятия керамического брекета (c)

Рис. 3. То же, что на рис. 2, но для металлического брекета

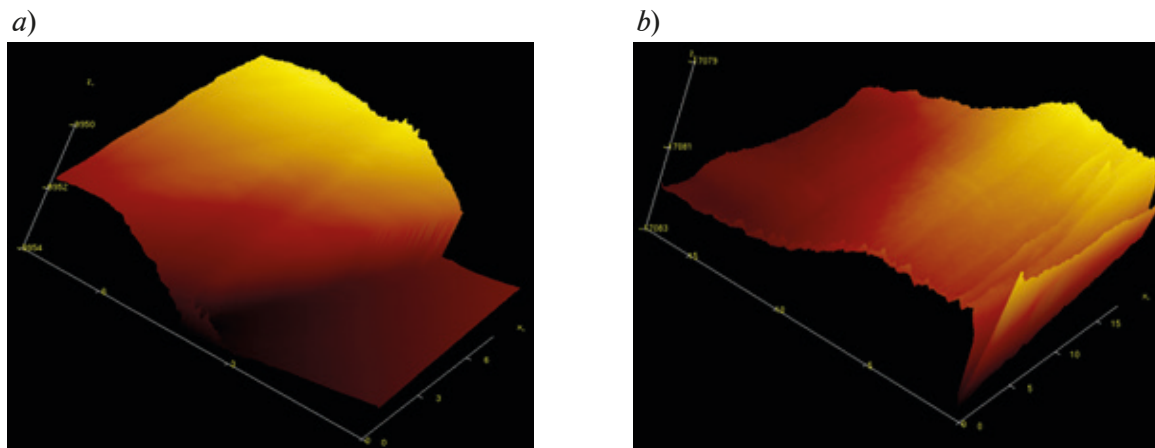


Рис. 4. Растровые 3D-изображения поверхностей, полученные после снятия металлического (a) и керамического (b) брекетов

Таблица

**Результаты измерения средней шероховатости поверхности разрыва при снятии двух типов брекетов**

Номер образца	Средняя шероховатость поверхности, нм	
	Металлический брекеты	Керамический брекеты
1	253,6	212,0
2	232,8	155,8
3	255,7	140,0
4	391,6	74,79
5	180,5	138,2
6	228,9	190,9
7	180,4	143,4

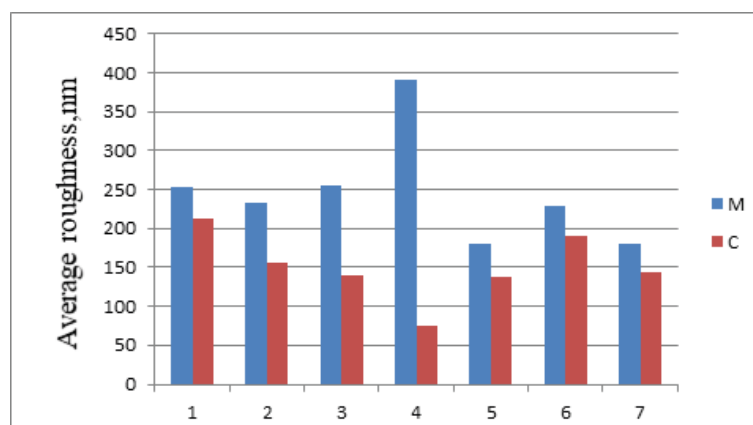


Рис. 5. Диаграмма значений средней шероховатости поверхностей зубов после снятия металлической (М) и керамической (С) брекет-систем. По горизонтальной оси отложены номера образцов (см. таблицу)



которой превышают таковую для керамической более чем в полтора раза. Развитость шероховатости, выраженная в числах, указывает на то, насколько прочным будет процесс сцепления в трехслойных композициях.

### Заключение

Различие используемых конструкций и материалов, последовательность операций и приемов фиксации брекетов как на подготовительных, так и на основных этапах процедуры позволяет построить и предложить совершенствование технологического процесса, осуществляемого в стоматологической практике. Полученные в работе и представленные в статье результаты могут принести пользу в практической медицине при выборе брекет-системы.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Синани И. Л., Шурик А. Г., Осоргин Ю. К., Бушуев В. М. Углерод-углеродные материалы для ортопедии и травматологии // Российский журнал биомеханики. 2012. Т. 16. № 2. С. 74–82.
2. Гаврюшенко Н. С., Батраков С. Ю., Баламетов С. Г. Сравнительная характеристика механико-прочностных свойств углеродного наноструктурного имплантата и нативной кости // Вестник Смоленской государственной медицинской академии. 2020. Т. 19. № 1. С. 108–115.
3. Федосеев А. В., Литвинов А. А., Чекушин А. А., Филоненко П. С., Аль Мансур А. Ю., Юрчикова Е. Е. Качество жизни пациентов после тотального цементного и бесцементного эндопротезирования тазобедренного сустава // Российский медико-биологический вестник имени академика И. П. Павлова. 2014. Т. 22. № 4. С. 121–125.
4. Шевцов В., Мушкин А., Сергеев К., Скрябин В., Шатохин В., Эргашев О. Углерод: новые грани его использования в медицине // Медицинская газета. № 86 от 19 ноября 2014. С. 7–10.
5. Назаров Е. А., Рябова М. Н. Применение отечественных имплантатов в эндопротезировании тазобедренного сустава // Российский медико-биологический вестник имени академика И. П. Павлова. 2007. Т. 15. № 2. С. 13–20.
6. Кузьманин С. А., Назаров Е. А., Веснов И. Г. Экспериментальное исследование сил сцепления композиционного материала из фосфата кальция и германия с костью // Российский медико-биологический вестник имени академика И. П. Павлова. 2016. Т. 24. № 2. С. 92–100.
7. Рябова М. Н., Назаров Е. А., Зубов А. А., Подъяблонская И. А. Тотальное эндопротезирование тазобедренного сустава при двухстороннем анкилозе // Наука молодых (Eruditio Juvenium). 2017. № 2. С. 265–270.
8. Chetan P., Tandon P., Singh G. K., Nagar A., Prasad V., Chugh V. K. Dynamics of a smile in different age groups // The Angle Orthodontist. 2013. Vol. 83. No. 1. Pp. 90–96.
9. Sarver D. M. Interactions of hard tissues, soft tissues, and growth over time, and their impact on orthodontic diagnosis and treatment planning // American Journal of Orthodontics & Dentofacial Orthopedics. 2015. Vol. 148. No. 3. Pp. 380–386.
10. Pitts T. R. Bracket positioning for smile arc protection // Journal of Clinical Orthodontics. 2017. Vol. 51. No. 3. Pp. 142–156.
11. Proffit W., Fields H., Larson B., Sarver D. Contemporary orthodontics. 6th ed. Philadelphia, USA: Elsevier, 2018. 160 p.
12. Pulgaonkar R., Chitra P. Stereomicroscopic analysis of microleakage, evaluation of shear bond strengths and adhesive remnants beneath orthodontic brackets under cyclic exposure to commonly consumed commercial "soft" drinks // Indian Journal of Dental Research. 2021. Vol. 32. No. 1. Pp. 98–103.

### REFERENCES

1. Sinani I. L., Shchurik A. G., Osorgin Yu. K., Bushuev V. M., Carbon-carbon composites for orthopaedics and traumatology, Russian Journal of Biomechanics. 16 (2(56)) (2012) 66–73.
2. Gavryushenko N. S., Batrakov S. Yu., Balametov S. G., Comparative characteristic of mechanical strength properties of the carbon nanostructural implant and native bone, Vestnik of the Smolensk State Medical Academy. 19 (1) (2020) 108–115 (in Russian).

3. Fedoseev A. V., Litvinov A. A., Chekushin A. A., et al., Quality of life in patients after total cement or cementless hip arthroplasty, I. P. Pavlov Russian Medical Biological Herald. 22 (4) (2014) 121–125 (in Russian).
4. Shevtsov V., Mushkin A., Sergeyev K., et al., Uglerod: novyye grani yego ispolzovaniya v meditsine [Carbon: New facets of its use in medicine], Meditsinskaya gazeta [Medical Newspaper], No. 86, November 19, 2014 (in Russian).
5. Nazarov E. A., Ryabova M. N., Application domestic implants in total hip arthroplasty, I. P. Pavlov Russian Medical Biological Herald. 15 (2) (2007) 13–20 (in Russian).
6. Kuzmanin S. A., Nazarov E. A., Vesnov I. G., Composite material based on calcium phosphate and germanium (experimental study), I. P. Pavlov Russian Medical Biological Herald. 24 (2) (2016) 92–100 (in Russian).
7. Ryabova M. N., Nazarov E. A., Zubov A. A., Podyablonskaya I. A., Total hip replacement in bilateral ankyloses, Nauka Molodykh (Eruditio Juvenium). (2) (2017) 271–276.
8. Chetan P., Tandon P., Singh G., et al., Dynamics of a smile in different age groups, Angle Orthod. 83 (1) (2013) 90–96.
9. Sarver D. M., Interactions of hard tissues, soft tissues, and growth over time, and their impact on orthodontic diagnosis and treatment planning, Am. J. Orthod. Dentofacial Orthop. 148 (3) (2015) 380–386.
10. Pitts T. R., Bracket positioning for smile arc protection, J. Clin. Orthod. 51 (3) (2017) 142–156.
11. Proffit W., Fields H., Larson B., Sarver D., Contemporary orthodontics, 6th ed., Elsevier, Philadelphia, 2018.
12. Pulgaonkar R., Chitra P., Stereomicroscopic analysis of microleakage, evaluation of shear bond strengths and adhesive remnants beneath orthodontic brackets under cyclic exposure to commonly consumed commercial "soft" drinks, Indian J. Dent. Res. 32 (1) (2021) 98–103.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ИЛЯСОВА Наталья Викторовна** — *ординатор кафедры ортопедической стоматологии и ортодонтии Рязанского государственного медицинского университета имени академика И. П. Павлова, г. Рязань, Россия.*

390026, Россия г. Рязань, Высоковольтная ул., 9

ilyasowa-natalya@mail.ru

ORCID: 0000-0001-8248-4309

**КОНДРАКОВА Ольга Владимировна** — *кандидат медицинских наук, доцент кафедры ортопедической стоматологии и ортодонтии, врач-ортодонт Рязанского государственного медицинского университета имени академика И. П. Павлова, г. Рязань, Россия.*

390026, Россия г. Рязань, Высоковольтная ул., 9

kov0177@mail.ru

ORCID: 0000-0002-4889-5566

**КУДЮКИН Александр Игоревич** — *аспирант кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С. А. Есенина, г. Рязань, Россия.*

390000, Россия, г. Рязань, ул. Свободы, 46

a.kudykin@rsu.edu.ru

ORCID: 0000-0002-1213-4837

**МООС Евгений Николаевич** — *доктор технических наук, профессор кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С. А. Есенина, г. Рязань, Россия.*

390000, Россия, г. Рязань, ул. Свободы, 46

e\_moos@mail.ru

ORCID: 0000-0003-3831-7882

**THE AUTHORS****ILYASOWA Natalya V.***Ryazan State Medical University*

9, Vysokovol'tnaya St., Ryazan, 390026, Russia

ilyasowa-natalya@mail.ru

ORCID: 0000-0001-8248-4309

**KONDRAKOVA Olga V.***Ryazan State Medical University*

9, Vysokovol'tnaya St., Ryazan, 390026, Russia

kov0177@mail.ru

ORCID: 0000-0002-4889-5566

**KUDYUKIN Aleksandr I.***Ryazan State University named for S. A. Yesenin*

40, Svobody St., Ryazan, 390000, Russia

a.kudykin@rsu.edu.ru

ORCID: 0000-0002-1213-4837

**MOOS Evgeniy N.***Ryazan State University named for S. A. Yesenin*

40, Svobody St., Ryazan, 390000, Russia

e\_moos@mail.ru

ORCID: 0000-0003-3831-7882

*Статья поступила в редакцию 14.11.2021. Одобрена после рецензирования 15.12.2021.  
Принята 15.12.2021.*

*Received 14.11.2021. Approved after reviewing 15.12.2021. Accepted 15.12.2021.*

## Биофизика и медицинская физика

Научная статья

УДК 577.29, 57,052, 57,042.2

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15107>

### ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ НА УРОВНЕ ОДИНОЧНЫХ МОЛЕКУЛ ПАРАМЕТРОВ ТРАНСКРИПЦИИ БАКТЕРИАЛЬНОЙ РНК-ПОЛИМЕРАЗЫ МЕТОДОМ АКУСТИЧЕСКОЙ СИЛОВОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

**А. Н. Арсениев, М. А. Панфилов, Г. Е. Побегалов,  
А. С. Потысьева, П. А. Павлинова,  
М. В. Якунина, М. А. Ходорковский** ✉

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Россия  
✉ [khodorkovskii@gmail.com](mailto:khodorkovskii@gmail.com)

**Аннотация.** В настоящей работе приведены результаты одномолекулярных исследований влияния ионов магния на динамические характеристики элонгации транскрипции бактериальной РНК-полимеразы. Показано, что с уменьшением концентрации магния снижаются мгновенная и средняя скорости транскрипции. Наблюдаемая зависимость происходит за счет увеличения количества коротких пауз; предложено объяснение механизма их образования. Для проведения исследований использован метод акустической силовой спектроскопии (АСС), который составил основу для разработки одномолекулярной методики характеристики параметров транскрипции. Приведено подробное описание методики и алгоритма обработки результатов измерений.

**Ключевые слова:** транскрипция, РНК-полимераза, акустическая силовая спектроскопия, одномолекулярные методы

**Финансирование:** Исследование выполнено при финансовой поддержке Российской Федерации в лице Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-996 от 23.09.2021).

**Для цитирования:** Арсениев А. Н., Панфилов М. А., Побегалов Г. Е., Потысьева А. С., Павлинова П. А., Якунина М. В., Ходорковский М. А. Характеризация на уровне одиночных молекул параметров транскрипции бактериальной РНК-полимеразы методом акустической силовой спектроскопии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 1. С 70–80. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15107>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15107>

## SINGLE MOLECULES CHARACTERIZATION OF TRANSCRIPTION OF BACTERIAL RNA POLYMERASE PARAMETERS USING ACOUSTIC FORCE SPECTROSCOPY

A. N. Arseniev, M. A. Panfilov, G. E. Pobegalov, A. S. Potyseva,  
P. A. Pavlinova, M. V. Yakunina, M. A. Khodorkovskii ✉

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

✉ [khodorkovskii@gmail.com](mailto:khodorkovskii@gmail.com)

**Abstract.** This work presents the results of single-molecular studies of the effect of magnesium ions on the dynamic characteristics of transcription elongation of bacterial RNA polymerase. It has been shown that the instantaneous and average transcription rates decrease with a decrease in magnesium concentration. The observed dependence occurred due to an increase in the number of short pauses; an explanation of the mechanism of their formation was put forward. To carry out these studies, the method of acoustic force spectroscopy (AFS) was used. This technique served as a basis for the development of a single-molecule procedure for characterizing the transcription parameters. A detailed description of the method and algorithm for processing the measurement results was given.

**Keywords:** transcription, RNA polymerase, acoustic force spectroscopy, single-molecule methods

**Funding:** The research was supported by the Ministry of Education of Russian Federation as a part of a state task (agreement No. 075-15-2021-996, Sept. 23, 2021).

**For citation:** Arseniev A. N., Panfilov M. A., Pobegalov G. E., Potyseva A. S., Pavlinova P. A., Yakunina M. V., Khodorkovskii M. A., Single molecules characterization of transcription of bacterial RNA-polymerase parameters using acoustic force spectroscopy, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (1) (2022) 70–80. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15107>

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

### Введение

Исследованию процесса транскрипции, в результате которого происходит экспрессия гена ДНК-зависимой РНК-полимеразой (РНКП), посвящено огромное количество работ, большинство из которых выполнено с использованием классических биохимических методов. Возможности последних ограничены в получении детальных характеристик этого процесса. Дополнительная важная информация о процессе транскрипции содержится в публикациях по исследованию структур бактериальных РНКП–ДНК комплексов методами криоэлектронной микроскопии, спектроскопии ядерного магнитного резонанса и рентгеновской кристаллографии. Эти методы дают очень важную информацию о некоторых наиболее долгоживущих состояниях этих комплексов и практически не дают какой-либо информации о промежуточных, короткоживущих состояниях, определяющих динамику процесса.

Фактически, однозначные данные об этой динамике можно получить только с использованием одномолекулярных методов, которые позволяют наблюдать изменение характеристик индивидуальных молекул в реальном масштабе времени, без усреднения по ансамблю частиц. На сегодняшний день наиболее часто используются методы оптической или магнитной ловушек и метод одномолекулярного ферстеровского резонансного переноса энергии smFRET (*англ.* single molecular Förster Resonance Energy Transfer).

В последние 10 – 15 лет наблюдается заметный рост числа публикаций с использованием этих методов с целью детальной характеристики динамики процесса элонгации транскрипции [1 – 4]. Результаты этих исследований показывают, что в процессе транскрипции, имеющем пошаговый характер и где величина одного шага соответствует по длине перемещению полимеразы на одну пару оснований ДНК, реализуются различные конформационные состояния РНКП, времена жизни которых различаются на несколько порядков.

В настоящей работе для проведения одномолекулярных исследований использован метод акустической силовой спектроскопии; он обладает преимуществом перед другими методами, ввиду возможности одновременного получения данных о динамике нескольких молекул РНКП. Этот метод является сравнительно новым, в связи с чем в этой работе подробно рассмотрены его возможности и особенности использования методики, разработанной на его основе.

В настоящей работе часть данных о влиянии параметров среды на динамические характеристики транскрипции бактериальной РНКП получена впервые.

### Метод акустической силовой спектроскопии для анализа транскрипции

Впервые метод акустической силовой спектроскопии (АСС) был представлен в конце 2014 года [3]. Метод реализован на специальной установке Lumicks, включающей в себя специальный микрофлюидный чип, инвертированный микроскоп и камеру. Эксперименты проводятся с использованием специального устройства – микрофлюидного чипа, который представляет собой ячейку, ограниченную двумя стеклянными пластинами, между которыми находится жидкость. При подаче напряжения пьезогенератор, расположенный на этом чипе, создает плоскую акустическую волну, действующую на полимерные микросферы; их смещение фиксируется с помощью инвертированного микроскопа и камеры. Молекулы ДНК закрепляются между поверхностью стекла чипа и микросферами (рис. 1). Сила, имеющая акустическую природу, оказывает воздействие на микросферы.

Акустическая волна, распространяющаяся внутри чипа, создает силу, действующую на микросферы:

$$F = -V\nabla \left[ \frac{1-k^*}{4} k_m p^2 - \frac{\rho^* - 1}{2\rho^* + 1} \rho_m v^2 \right], \quad (1)$$

где  $V$ , м<sup>3</sup>, – объем микросферы;  $p$ , Па, – звуковое давление;  $v$ , м/с, – скорость звука;  $\rho^* = \rho_p / \rho_m$  – отношение плотностей микросферы и среды;  $k^* = k_p / k_m$  – отношение коэффициентов упругости микросферы и среды.

Величина силы  $F$  (см. рис. 1) зависит от размера микросферы, частоты акустической волны и ее амплитуды, которая в свою очередь зависит от напряжения, подающегося на пьезоэлемент [3].

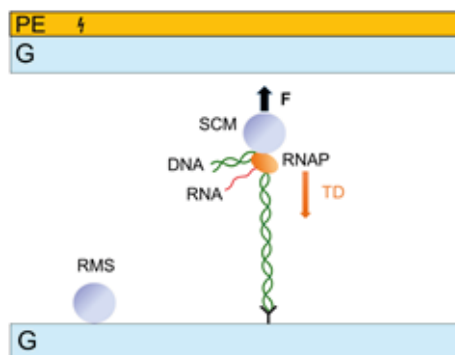


Рис. 1. Схема эксперимента по изучению транскрипции методом акустической силовой спектроскопии:

PE – пьезоэлемент; G – стекло; SCM, RMS – микросфера, модифицированная стрептавидином, и референсная микросфера, соответственно; DNA, RNA – ДНК и РНК; RNAP – РНКП, модифицированная биотином; TD – направление транскрипции; F – прилагаемая сила



Как правило, диапазон сил при использовании этого метода находится в пределах от единиц до десятков и даже сотен пиконьютонов, что дает возможность применять его к исследованиям биологических объектов [5].

Несмотря на конструктивную простоту реализации метода АСС, для осуществления эксперимента необходимо придерживаться довольно объемного и сложного протокола.

На этапе подготовки к эксперименту необходимо получить молекулу ДНК, которая будет крепиться к одной из поверхностей микрофлюидного чипа. Для этого ДНК и поверхность модифицируют соответственно дигоксигенином и антителами к нему – соединениями, образующими химическую связь при взаимодействии. Как видно на рис. 1, для проведения эксперимента РНК-полимераза (РНКП) должна быть химически связана с микросферой. Для этих целей используются биотин и стрептавидин – соединения, которыми модифицированы РНКП и микросфера соответственно [6].

Транскрипционный цикл, осуществляемый РНК-полимеразой (независимо от типа клетки), включает в себя три последовательные стадии: инициацию, элонгацию и терминацию. Инициация включает в себя связывание РНКП с особой последовательностью ДНК – промотором, в результате которого происходит плавление связанного двунитевого участка ДНК и образуется открытый комплекс РНКП – ДНК. Далее осуществляется активный синтез РНК-молекулы – это стадия элонгации. Продвижение РНКП по ДНК происходит неравномерно, в ходе элонгации этот фермент может делать временные остановки (паузы), прекращать движение (перманентная остановка) или терминировать синтез РНК в ответ на регуляторные воздействия со стороны белковых факторов и/или сигналов, закодированных в ДНК и РНК [7, 8].

Метод АСС позволяет одновременно регистрировать динамику перемещения нескольких молекул РНКП по ДНК, обеспечивая тем самым его преимущество перед другими одномолекулярными методами, в которых возможно детектирование положения только одной молекулы РНКП [9, 10].

Элонгационные профили отражают динамические характеристики одиночной РНКП, такие как мгновенная (скорость между паузами) и средняя скорости, наличие остановок/пауз и их продолжительность, и представляют собой фактически графическую интерпретацию характерного движения одиночных полимераз, осуществляющих элонгацию транскрипции, представленную в форме зависимости транскрибируемой длины ДНК (в нанометрах либо нуклеотидах) от времени (секунды).

#### Алгоритм обработки элонгационных профилей

Типичный вид элонгационных профилей трех одиночных РНК-полимераз в условиях отсутствия влияния на транскрипцию каких-либо химических агентов, приведен на рис. 2.

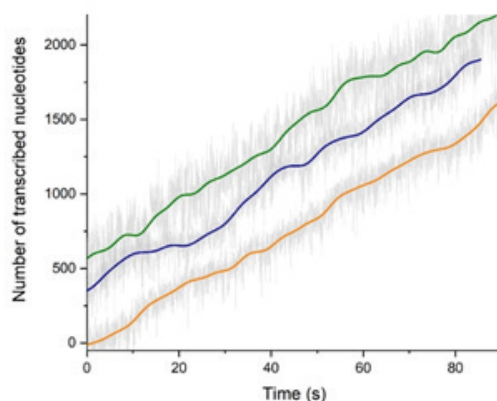


Рис. 2. Репрезентативные элонгационные профили трех одиночных РНКП в контрольных условиях, при которых нет влияния химических агентов

При обработке полученных данных используется медианный фильтр с окном в несколько секунд и для повторного сглаживания – фильтр Савицкого – Голея [11]. Устанавливаются предельные значения скоростей и все временные промежутки, на которых скорости ниже порогового значения рассматриваются как паузы. Эти паузы сортируются на «длинные», продолжительность которых более 20 с, и «короткие», продолжительность которых составляет от 2,5 до 20 с [12, 13]. Разрешающая способность установки не позволяет регистрировать паузы длительностью короче 2,5 с. Пороговое значение выбирается равным  $0,5\sigma$ , где  $\sigma$  – величина стандартного отклонения от среднего значения, полученная из распределения Гаусса для мгновенных скоростей. Функция Гаусса  $f(x)$  имеет вид

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}.$$

Полученные значения усредняются по всему ансамблю пауз и представляются в виде «среднее  $\pm$  стандартная ошибка среднего (s.e.m)». В качестве критерия статистической достоверности используется критерий Манна – Уитни. В результате обработки с выбранным предельным порогом скорости формируется распределение мгновенных скоростей.

В общем случае в распределении скоростей присутствуют сигналы, соответствующие производным от шумового и полезного сигналов. Шумовая составляющая определяется параметрами экспериментальной установки, и ее спектр соответствует распределению производных тех участков элонгационного профиля, где движение полимеразы остановлено, т. е. когда она находится в паузированных состояниях. Производная шума имеет симметричное распределение относительно нуля скорости, и для учета ее вклада можно использовать отрицательную часть распределения, на которую не накладывается полезный сигнал. Поскольку положительные значения шумового сигнала по абсолютной величине равны ее отрицательным значениям, истинное распределение мгновенных скоростей можно получить путем вычитания абсолютных значений шумового сигнала из суммарного распределения скоростей. Такая методика была использована в работах [14, 15]. Для описанного примера приведена гистограмма одного из полученных элонгационных профилей с выраженным бимодальным распределением (рис. 3,а). Разложение этого распределения с использованием функций Гаусса позволяет выделить распределение вблизи нуля (красная кривая), соответствующее шумовой составляющей сигнала, и истинной мгновенной скорости (зеленая кривая).

Параметры мгновенной скорости можно определить точнее, если использовать приведенную выше процедуру вычитания шумового сигнала.

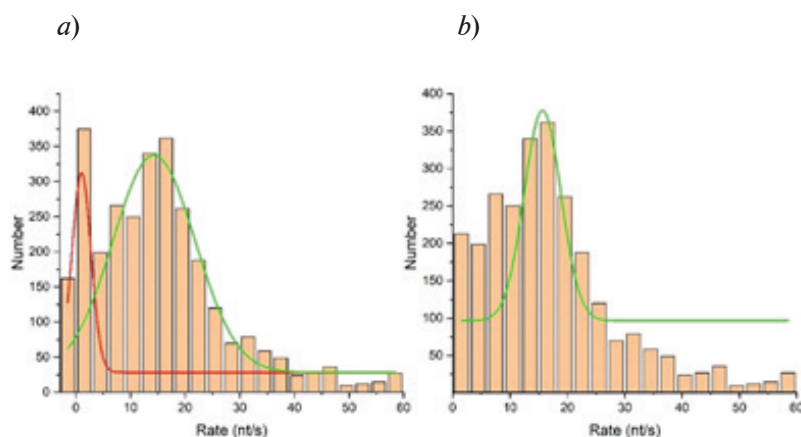


Рис. 3. Гистограммы распределений мгновенных скоростей до (а) и после (б) вычитания абсолютных значений шумовой составляющей сигнала и аппроксимации функцией Гаусса (зеленые кривые – мгновенная скорость, красная – шумовая составляющая)



На рис. 3,*b* приведена аппроксимация распределения скоростей функцией Гаусса после вычитания шумового сигнала. Как видно из результатов аппроксимации, значение мгновенной скорости при такой обработке несколько выше и, вероятно, ближе к истинным значениям мгновенной скорости движения полимеразы.

После проведения указанных манипуляций для каждого полученного элонгационного профиля, данные для всех профилей, соответствующих конкретным условиям эксперимента, усредняются и представляются в виде среднего значения  $\pm$  стандартная ошибка среднего (s.e.m.).

Значение средней скорости транскрипции для каждой РНК-полимеразы равно отношению пути, пройденного полимеразой (длина элонгационного профиля), к общему времени, затраченному на его прохождение. Полученные значения усредняются по всему ансамблю скоростей для каждого из экспериментальных условий и представляются как среднее значение  $\pm$  s.e.m. В качестве критерия статистической достоверности используется критерий Манна – Уитни.

### Влияние ионов магния на параметры транскрипции

Для оценки влияния ионов магния на процесс транскрипции было проведено сравнение параметров элонгационных профилей, измеренных при концентрациях хлорида магния  $MgCl_2$ , равных 1 и 10 мМ. Репрезентативные элонгационные профили одиночных РНКП при разных концентрациях магния приведены на рис. 4.

Значения мгновенной и средней скоростей транскрипции при концентрации хлорида магния 10 мМ, полученные после усреднения по 28 элонгационным профилям (рис. 5), оказались равными  $20,5 \pm 0,9$  и  $17 \pm 0,7$  нуклеотидов в секунду (нт/с; среднее значение  $\pm$  s.e.m.).

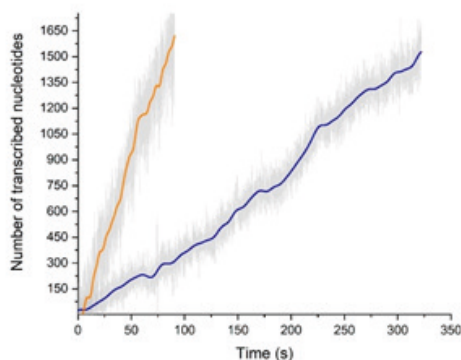


Рис. 4. Репрезентативные элонгационные профили одиночных РНКП при концентрациях  $MgCl_2$ , равных 1 мМ (кривая синего цвета) и 10 мМ (кривая красного цвета)

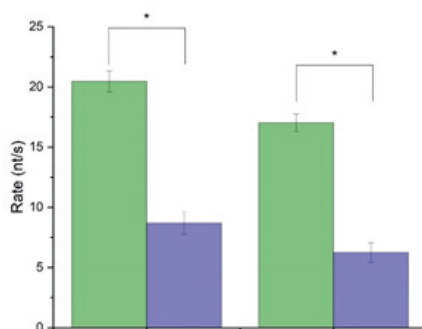


Рис. 5. Диаграмма значений мгновенной (слева) и средней (справа) скоростей транскрипции для концентраций  $MgCl_2$  10 мМ (зеленые столбики) и 1 мМ (синие столбики).

Концентрация нуклеозидтрифосфатов (НТФ) – 1 мМ

Численные значения этих величин практически совпадают с данными, приведенными в литературе [6, 16, 17]. Столь близкие значения средней и мгновенной скоростей и небольшое количество коротких пауз при высокой концентрации ионов магния свидетельствуют о том, что время, в течение которого РНК-полимераза находится без движения, незначительно, по сравнению со временем, затраченным на транскрипцию участка ДНК, который в этих экспериментах был выбран равным  $500 \text{ нм} \pm 10 \%$ . Больших пауз (длительностью свыше 20 с) в этих условиях не наблюдается, в то время как небольшое количество коротких пауз (от 2,5 до 20 с) было найдено с помощью протокола обработки, приведенного выше. Результаты обработки всего массива данных с определением среднего количества коротких пауз, приходящихся на один элонгационный профиль, представлены на рис. 6.

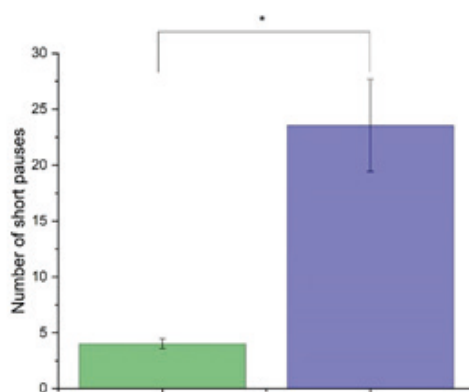


Рис. 6. Диаграмма среднего количества коротких пауз транскрипции, приходящихся на один элонгационный профиль, для концентраций  $\text{MgCl}_2$  10 мМ (зеленый столбик) и 1 мМ (синий столбик).  
Концентрация НТФ – 1 мМ

Как видно на рис. 4, принципиальное отличие вида элонгационного профиля при пониженной концентрации магния (1 мМ  $\text{MgCl}_2$ ) от вида при его повышенной концентрации (10 мМ  $\text{MgCl}_2$ ) заключается в том, что полимераза проходит ту же длину ДНК за гораздо большее время. При этом, как и в случае с большой концентрацией магния, пауз длительностью более 20 с не наблюдается. Значения мгновенной и средней скоростей, а также количество коротких пауз на один элонгационный профиль, рассчитанных по тем же протоколам, что и при высокой концентрации ионов магния, оказались равными соответственно  $8,7 \pm 0,9$  и  $6,3 \pm 0,8$  нт/с, а также  $23,6 \pm 4$  паузы (см. рис. 5 и 6).

Прежде всего следует отметить, что качественно полученные результаты о замедлении скорости элонгации транскрипции при уменьшении концентрации ионов магния совпадают с данными биохимических экспериментов. Однако получение объективных данных о возможных процессах, влияющих на величину средней скорости транскрипции, с использованием ансамблевых методов не представляется возможным.

Как следует из результатов, полученных в настоящей работе, снижение средней скорости транскрипции при уменьшении концентрации ионов магния происходит, в существенной степени, за счет роста количества коротких пауз. Возможный механизм образования этих пауз связан с формированием ошибочного состава среды в активном центре РНКП, необходимого для первой стадии элонгации транскрипции. Этот состав должен содержать нуклеотид, комплементарный соответствующему нуклеотиду матричной цепи ДНК, и ион магния. Эти компоненты состава поступают в активный центр полимеразы через вторичный канал в результате диффузии. Поступление ошибочных нуклеотидов в активный центр РНКП либо отсутствие там ионов магния приводят к возникновению коротких пауз, во время которых РНКП может удалить неправильный состав из активного центра.

В предположении такого механизма возникновения паузы следует ожидать, что при



низкой концентрации  $MgCl_2$  в транскрипционном буфере количество случаев с отсутствием ионов магния в активном центре будет больше, чем при высокой концентрации этих ионов, и, соответственно, количество коротких пауз при низкой концентрации будет также больше, что и наблюдается в этом исследовании.

Следует отметить, что разрешающая способность установки АСС не позволяет регистрировать паузы длительностью короче 2,5 с, количество которых, весьма вероятно, также существенно больше при низких концентрациях магния. Принимая это во внимание, можно предположить, что величина мгновенной скорости элонгации (т. е. скорость между паузами) при низкой концентрации ионов магния больше того значения, которое в настоящей работе получено из расчета этой скорости между паузами длительностью выше 2,5 с.

### Заключение

Разработана методика измерения элонгационных профилей транскрипции на уровне индивидуальных молекул методом акустической силовой спектроскопии (АСС) и создан алгоритм анализа полученных данных. С помощью этой методики проведено исследование таких параметров транскрипции, как мгновенная и средняя скорости элонгации и спектр паузированных состояний бактериальной РНК-полимеразы, и изучена их зависимость от концентрации ионов магния. Полученные значения этих параметров позволили сделать вывод о возможном механизме формирования коротких пауз на стадии элонгации транскрипции бактериальной РНКП.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Dulin D., Lipfert J., Moolman M. C., Dekker N. H.** Studying genomic processes at the single-molecule level: introducing the tools and applications // *Nature Reviews Genetics*. 2013. Vol. 14. No. 1. Pp. 9–22.
2. **Kamsma D., Creyghton R., Sitters G., Wuite G. J., Peterman E. J.** Tuning the music: Acoustic force spectroscopy (AFS) 2.0 // *Methods*. 2016. Vol. 105. 1 August. Pp. 26–33.
3. **Sitters G., Kamsma D., Thalhammer G., Ritsch-Marte M., Peterman E. J. G., Wuite G. J. L.** Acoustic force spectroscopy // *Nature Methods*. 2015. Vol. 12. No. 1. Pp. 47–50.
4. **Mohapatra S., Lin Ch.-T., Feng X. A., Basu A., Ha T.** Single-molecule analysis and engineering of DNA motors // *Chemical Reviews*. 2020. Vol. 120. No. 1. Pp. 36–78.
5. **Yin H., Wang M. D., Svoboda K., Landick R., Block S. M., Gelles J.** Transcription against an applied force // *Science*. 1995. Vol. 270. No. 5242. Pp. 1653–1657.
6. **Meteliev M., Arseniev A., Bushin L. B., Kuznedelov K., Artamonova T. O., Kondratenko R., Khodorkovskii M., Seyedsayamdost M. R., Severinov K.** Acinetodin and klebsidin, RNA polymerase targeting lasso peptides produced by human isolates of *Acinetobacter gyllenbergii* and *Klebsiella pneumoniae* // *ACS Chemical Biology*. 2017. Vol. 12. No. 3. Pp. 814–824.
7. **Nudler E.** RNA polymerase backtracking in gene regulation and genome instability // *Cell*. 2012. Vol. 149. No. 7. Pp. 1438–1445.
8. **Saba J., Chua X. Y., Mishanina T. V., Nayak D., Windgassen T. A., Mooney R. A., Landick R.** The elemental mechanism of transcriptional pausing // *eLife*. 2019. January 8. P. e40981.
9. **Zhao Y., Chen D., Yue H., French J. B., Rufo J., Benkovic S. J., Huang T. J.** Lab-on-a-chip technologies for single-molecule studies // *Lab on a Chip*. 2013. Vol. 13. No. 12. P. 2183.
10. **Neuman K.C., Nagy A.** Single-molecule force spectroscopy: Optical tweezers, magnetic tweezers and atomic force microscopy // *Nature Methods*. 2008. Vol. 5. No. 6. Pp. 491–505.
11. **Savitzky A., Golay M. J. E.** Smoothing and differentiation // *Analytical Chemistry*. 1964. Vol. 36. No. 8. Pp. 1627–1639.
12. **Neuman K. C., Abbondanzieri E. A., Landick R., Gelles J., Block S. M.** Ubiquitous transcriptional pausing is independent of RNA polymerase backtracking // *Cell*. 2003. Vol. 115. No. 4. Pp. 437–447.
13. **Shaevitz J. W., Abbondanzieri E. A., Landick R., Block S. M.** Backtracking by single RNA polymerase molecules observed at near-base-pair resolution // *Nature*. 2003. Vol. 426. No. 6967. Pp. 684–687.
14. **Hodges C., Bintu L., Lubkowska L., Kashlev M., Bustamante C.** Nucleosomal fluctuations

govern the transcription dynamics of RNA polymerase II // *Science*. 2009. Vol. 325. No. 5940. Pp. 626–628.

15. **Bintu L., Ishibashi T., Dangkulwanich M., Wu Yu-Yi, Lubkowska L., Kashlev M., Bustamante C.** Nucleosomal elements that control the topography of the barrier to transcription // *Cell*. 2012. Vol. 151. No. 4. Pp. 738–749.

16. **Mejia Y. X., Nudler E., Bustamante C.** Trigger loop folding determines transcription rate of *Escherichia coli*'s RNA polymerase // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2015. Vol. 112. No. 3. Pp. 743–748.

17. **Adelman K., Yuzenkova J., La Porta A., Zenkin N., Lee J., Lis J. T., Borukhov S., Wang M. D., Severinov K.** Molecular mechanism of transcription inhibition by peptide antibiotic microcin J25 // *Molecular Cell*. 2004. Vol. 14. No. 6. Pp. 753–762.

## REFERENCES

1. **Dulin D., Lipfert J., Moolman M. C., Dekker N. H.**, Studying genomic processes at the single-molecule level: introducing the tools and applications, *Nat. Rev. Genet.* 14 (1) (2013) 9–22.

2. **Kamsma D., Creighton R., Sitters G., et al.**, Tuning the music: Acoustic force spectroscopy (AFS) 2.0, *Methods*. 105 (1 August) (2016) 26–33.

3. **Sitters G., Kamsma D., Thalhammer G., et al.**, Acoustic force spectroscopy, *Nat. Methods*. 12 (1) (2015) 47–50.

4. **Mohapatra S., Lin Ch.-T., Feng X. A., et al.**, Single-molecule analysis and engineering of DNA motors, *Chem. Rev.* 120 (1) (2020) 36–78.

5. **Yin H., Wang M. D., Svoboda K., et al.**, Transcription against an applied force, *Sci.* 270 (5242) (1995) 1653–1657.

6. **Meteliev M., Arseniev A., Bushin L. B., et al.**, Acinetodin and klebsidin, RNA polymerase targeting lasso peptides produced by human isolates of *Acinetobacter gyllenbergii* and *Klebsiella pneumonia*, *ACS Chem. Biol.* 12 (3) (2017) 814–824.

7. **Nudler E.**, RNA polymerase backtracking in gene regulation and genome instability, *Cell*. 149 (7) (2012) 1438–1445.

8. **Saba J., Chua X. Y., Mishanina T. V., et al.**, The elemental mechanism of transcriptional pausing, *eLife*. (Jan. 8) (2019) e40981.

9. **Zhao Y., Chen D., Yue H., et al.**, Lab-on-a-chip technologies for single-molecule studies, *Lab Chip*. 13 (12) (2013) 2183.

10. **Neuman K.C., Nagy A.**, Single-molecule force spectroscopy: Optical tweezers, magnetic tweezers and atomic force microscopy, *Nat. Methods*. 5 (6) (2008) 491–505.

11. **Savitzky A., Golay M. J. E.**, Smoothing and differentiation, *Anal. Chem.* 36 (8) (1964) 1627–1639.

12. **Neuman K. C., Abbondanzieri E. A., Landick R., et al.**, Ubiquitous transcriptional pausing is independent of RNA polymerase backtracking, *Cell*. 115 (4) (2003) 437–447.

13. **Shaevitz J. W., Abbondanzieri E. A., Landick R., Block S. M.**, Backtracking by single RNA polymerase molecules observed at near-base-pair resolution, *Nature*. 426 (6967) (2003) 684–687.

14. **Hodges C., Bintu L., Lubkowska L., et al.**, Nucleosomal fluctuations govern the transcription dynamics of RNA polymerase II, *Sci.* 325 (5940) (2009) 626–628.

15. **Bintu L., Ishibashi T., Dangkulwanich M., et al.**, Nucleosomal elements that control the topography of the barrier to transcription, *Cell*. 151 (4) (2012) 738–749.

16. **Mejia Y. X., Nudler E., Bustamante C.**, Trigger loop folding determines transcription rate of *Escherichia coli*'s RNA polymerase, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 112 (3) (2015) 743–748.

17. **Adelman K., Yuzenkova J., La Porta A., et al.**, Molecular mechanism of transcription inhibition by peptide antibiotic microcin J25, *Mol. Cell*. 14 (6) (2004) 753–762.

**СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ**

**АРСЕНИЕВ Анатолий Николаевич** — научный сотрудник научно-исследовательского комплекса «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
arsenievanatoly@gmail.com  
ORCID: 0000-0003-0901-4188

**ПАНФИЛОВ Михаил Андреевич** — лаборант-исследователь лаборатории молекулярной микробиологии Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
miha-panf@yandex.ru  
ORCID: 0000-0003-2875-7315

**ПОБЕГАЛОВ Георгий Евгеньевич** — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник научно-исследовательского комплекса «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
lwdrums@gmail.com  
ORCID: 0000-0003-0836-0732

**ПОТЫСЬЕВА Алина Сергеевна** — студентка Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
alina.potyseva@yandex.ru  
ORCID: 0000-0003-0121-1494

**ПАВЛИНОВА Полина Андреевна** — лаборант-исследователь лаборатории молекулярной микробиологии Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
polina.pavlina1004@gmail.com  
ORCID: 0000-0003-4269-5632

**ЯКУНИНА Мария Вячеславовна** — кандидат биологических наук, научный сотрудник лаборатории молекулярной микробиологии Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
yakuninam@gmail.com  
ORCID: 0000-0003-2083-3643

**ХОДОРКОВСКИЙ Михаил Алексеевич** — кандидат физико-математических наук, директор научно-исследовательского комплекса «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
khodorkovskii@gmail.com  
ORCID: 0000-0003-0562-0156

## THE AUTHORS

**ARSENIEV Anatolii N.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
arsenievanatoly@gmail.com  
ORCID: 0000-0003-0901-4188

**PANFILOV Mikhail A.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
miha-panf@yandex.ru  
ORCID: 0000-0003-2875-7315

**POBEGALOV Georgii E.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
lwdrums@gmail.com  
ORCID: 0000-0003-0836-0732

**POTYSEVA Alina S.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
alina.potyseva@yandex.ru  
ORCID: 0000-0003-0121-1494

**PAVLINOVA Polina A.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
polina.pavlina1004@gmail.com  
ORCID: 0000-0003-4269-5632

**YAKUNINA Maria V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
yakuninam@gmail.com  
ORCID: 0000-0003-2083-3643

**KHODORKOVSKII Mikhail A.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
khodorkovskii@gmail.com  
ORCID: 0000-0003-0562-0156

*Статья поступила в редакцию 07.12.2021. Одобрена после рецензирования 15.12.2021.  
Принята 15.12.2021.*

*Received 07.12.2021. Approved after reviewing 15.12.2021. Accepted 15.12.2021.*



Научная статья  
УДК 517.95+577.3+535.8+519.6  
DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15108>

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СВЕТОРАССЕЯНИЯ И ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПО РАЗМЕРАМ ДЛЯ АГРЕГАТОВ ИЗ МНОГОСЛОЙНЫХ ЧАСТИЦ

**В. Г. Концевая<sup>1</sup>✉, А. П. Головицкий<sup>2</sup>, К. Г. Куликов<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Псковский государственный университет, г. Псков, Россия;

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Россия

✉ [nkoncevoi@mail.ru](mailto:nkoncevoi@mail.ru)

**Аннотация.** В статье представлена новая математическая модель для расчета спектральных характеристик биологических частиц, имитирующих форменные элементы крови, а также их агрегатов с учетом структуры и эффектов многократного светорассеяния. Рассмотрены методы и алгоритмы, базирующиеся на методе Т-матриц расчета рассеяния лазерного излучения на группе биологических частиц. Определена функция распределения частиц по размерам на основе данных модельного эксперимента по рассеянию света агрегатами биологических частиц в случае *in vitro*. Представлено обсуждение полученных результатов.

**Ключевые слова:** Т-матрица, эритроцит, метод регуляризации Тихонова, многократное светорассеяние, форменный элемент крови

**Для цитирования:** Концевая В. Г., Головицкий А. П., Куликов К. Г. Определение спектральных характеристик светорассеяния и функции распределения по размерам для агрегатов из многослойных частиц // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 1. С 81–97. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15108>

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

Original article  
DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15108>

## AGGREGATES OF MULTILAYERED PARTICLES: THE SPECTRAL CHARACTERISTICS OF LIGHT SCATTERING AND SIZE DISTRIBUTION FUNCTIONS

**V. G. Kontsevaya<sup>1</sup>✉, A. P. Golovitskii<sup>2</sup>, K. G. Kulikov<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Pskov State University, Pskov, Russia;

<sup>2</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ [nkoncevoi@mail.ru](mailto:nkoncevoi@mail.ru)

**Abstract.** In the paper, a new mathematical model for calculating the spectral characteristics of biological particles imitating formed elements of blood, as well as their aggregates has been

put forward. The model takes into account the aggregate structure and multiple light scattering effect on them. The methods and algorithms based the T-matrix technique for calculating the laser radiation scattering on a biological cluster were considered. A particle size distribution function was determined on a basis of simulated *in vitro* experiment on light scattering by particle aggregates. A discussion of the obtained results was presented.

**Keywords:** The T-matrix method, erythrocytes, Tikhonov regularization method

**For citation:** Kontsevaya V. G., Golovitskii A. P., Kulikov K. G., Aggregates of multilayered particles: The spectral characteristics of light scattering and size distribution functions, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (1) (2022) 81–97. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15108>

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

### Введение

Одним из основных инструментов современной медицинской диагностики, отчетливо реагирующим на какие-либо изменения в состоянии организма, является анализ крови. С другой стороны, состояние клеток крови и такие их параметры, как размеры, деформируемость и принимаемые ими формы незамедлительно сказываются на процессах газообмена в тканях.

Для развития новых методов диагностики состояний биообъектов, используемых в различных областях биологии и медицины [1, 2], например, в процессах диагностики состояния крови, крайне важным и весьма актуальным является знание оптических характеристик форменных элементов крови. Разработка же адекватных математических моделей, описывающих распространение света в биологических тканях, входит существенной составной частью в решение данной актуальной задачи.

Ранняя диагностика нарушений функций тромбоцитов (отклонения в их размере и форме, изменения их агрегационных свойств), а значит и нарушения процессов тромбообразования, важна для выявления рисков заболеваний, тесно связанных с такими нарушениями. В первую очередь это относится к ишемической болезни сердца.

На эффективность поглощения и рассеяния лазерного излучения могут существенно влиять тромбоциты, находящиеся в активированном состоянии, в котором они склонны к агрегации и формированию тромбов.

Процесс агрегации эритроцитов, вызванный естественными в таком случае повреждениями, может инициировать возникновение гиперкоагуляции вследствие выделения в кровь эритроцитарных факторов свертывания.

Каждое конкретное заболевание, которое сопровождается процессами патологической агрегации клеток крови, требует своего детального изучения, тщательного выбора максимально эффективной лабораторной методики, позволяющей отследить и проанализировать подобный процесс. Часто одним из основных факторов воздействия на подобные патологические процессы и механизмы их протекания выступает нарушение структурно-функциональных свойств эритроцитов и особенно их способность к агрегации.

Оптические характеристики крови весьма чувствительны к параметрам процессов агрегации форменных элементов крови, эритроцитов и тромбоцитов; в частности, подобные процессы влияют на эффективность поглощения и рассеяния лазерного излучения кровью.

Для разработки новых подходов в оптической биопсии, оптической томографии, для анализа процессов фотодинамической и фототермической деструкции тканей и образующих их клеток актуально выявление и изучение количественных связей между биологическими свойствами и оптическими характеристиками комплексов биологических частиц. В частности, надлежит учитывать возможность агрегации моделируемых частиц. Для количественного исследования объединения биологических частиц в агрегаты, в рамках данной работы было впервые проведено численное моделирование многократного



рассеяния оптического излучения на агрегатах частиц, моделирующих заданные биологические структуры.

Цель данной работы – подробно описать разработанную новую математическую модель взаимодействия лазерного излучения с агрегатами биологических объектов различной сложности и организации на примере форменных элементов крови, а также апробировать предлагаемую модель на конкретных примерах.

### Решение задачи светорассеяния на агрегате частиц

Интерпретация явлений рассеяния света агрегатами частиц (сгустками, совокупностями и т. п.) даже простой формы весьма сложна, так как обусловлена взаимодействием полей от всех частиц, составляющих агрегат. При этом необходимо учитывать, что каждая частица изменяет поле не только в окрестности остальных (многократное рассеяние), но и в результате интерференции полей в дальней зоне.

В общем случае многократное рассеяние следует учитывать с использованием строгих численных методов. Среди них можно выделить те, которые явно учитывают взаимодействия между частицами [3] (подобно методу суперпозиции Т-матриц [4 – 6] и методу дискретных диполей (МДД) [7]), а также те, в которых агрегат рассматривают как кластер, т. е. одну целостную частицу сложной формы (подобно методу конечных разностей во временной области [8]).

Многократное рассеяние можно вычислять итерационно [9, 10], если использовать, например, метод приближения по порядку, который принято считать частным случаем метода суперпозиций.

Рассмотрим задачу многократного рассеяния света на группе частиц, моделирующей клетки крови с учетом наличия в них ядер, плазматических мембран и цитоплазмы, при- сущих исследуемой биологической структуре, характеризуемой различными геометрическими и оптическими параметрами, которые близки к моделируемому объекту.

Связать коэффициенты разложения полей падающего света и рассеянного агрегатом оказывается возможным, если рассчитывать Т-матрицу рассеяния лазерного излучения на агрегате, составленном из многослойных частиц, в рамках строгой теории многократного рассеяния света. Поскольку учитываются многократные взаимодействия внутри компонентов агрегата, следует констатировать взаимосвязанность рассеянных полей.

Расчет Т-матриц можно осуществлять в локальной системе координат, связанной с центром соответствующей частицы, для каждой из частиц агрегата, поскольку они независимы от падающего излучения. Следуя стандартному представлению электромагнитного поля, падающего на  $j$ -ю частицу, в виде суммы исходного падающего поля световой волны и поля, рассеянного совокупностью других частиц, располагающихся в среде с показателем преломления  $n$ , запишем выражение [11]:

$$E_{inc}(j) = E_0(j) + \sum_{l \neq j} E_{scat}(l, j), \quad (1)$$

где  $E_{scat}(l, j)$  – сумма полей, рассеянных на  $j$ -ой частице (использованием в обозначениях индексов  $l, j$  мы подчеркиваем переход из  $l$ -ой в  $j$ -ю систему координат).

При помощи Т-матрицы мы рассчитываем поле, рассеянное  $j$ -ой частицей; оно входит в это уравнение как  $E_{scat}(l, j)$ . Для расчета Т-матрицы выбрана локальная система координат, связанная с  $j$ -ой частицей.

Воспользовавшись трансляционными свойствами векторных волновых сферических функций, мы далее можем осуществлять преобразования разложений по векторным сферическим волновым функциям из систем координат, связанных с  $j$ -ми частицами, к системе координат  $l$ -ой частицы. В итоге мы получаем систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) для нахождения коэффициентов рассеянного светового поля на группе многослойных частиц  $a_{mn}^j, b_{mn}^j$ :

$$\begin{pmatrix} a^j \\ b^j \end{pmatrix} = T_{12}^j \left[ \begin{pmatrix} p^{i,j} \\ q^{i,j} \end{pmatrix} + \sum_{l \neq j} \begin{pmatrix} A(l, j) & B(l, j) \\ B(l, j) & A(l, j) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^l \\ b^l \end{pmatrix} \right], \quad (2)$$

$$T_{12}^j = T_1^j + T_2^j, \quad T_1^j = \begin{pmatrix} a_{n_p}^j & 0 \\ 0 & b_{n_q}^j \end{pmatrix}, \quad T_2^j = \begin{pmatrix} 0 & a_{n_q}^j \\ b_{n_p}^j & 0 \end{pmatrix};$$

выражения для представленных здесь коэффициентов  $a_{n_p}^j$ ,  $b_{n_q}^j$ ,  $a_{n_q}^j$ ,  $b_{n_p}^j$  приведены в статьях [11, 12], а величины  $A(l, j)$  и  $B(l, j)$  определены в статьях [13, 14].

В процессе решения задачи светорассеяния на диэлектрических объектах, моделирующих биологические объекты, в частности кровяные клетки, часто возникает необходимость решения так называемых плохо обусловленных СЛАУ.

Решение СЛАУ вида (2) мы осуществляли, используя устойчивый алгоритм бисопряженных градиентов [15]. Данный метод, построенный на основе квадратичного метода сопряженных градиентов, не допускает нестабильного поведения невязки и накопления погрешностей округления.

Существенно улучшить сходимость к требуемому решению удалось благодаря использованию алгоритма решения СЛАУ с предобуславливанием в виде LU-разложения [16].

Анализ графика на рис. 1, где изображены зависимости относительной нормы невязки от номера итерации для метода бисопряженных градиентов с предобуславливанием, приводит к очевидному выводу о достаточно удовлетворительной сходимости использованного метода.

Мы осуществили разработку программного комплекса для расчета Т-матриц, учитывающего многократное рассеяние для многослойных сферических конструктов. В случае сферической формы рассеивающих объектов, Т-матрица, очевидно, принимает диагональную форму [17].

Использование программы, разработанной нами, позволило осуществить достаточно детальный анализ спектральных характеристик рассеяния лазерного излучения (его диапазон длин волн от 400 до 650 нм) на многослойных сферулированных частицах.

После нахождения из выражения (2) численных значений коэффициентов  $a_{mn}^j$ ,  $b_{mn}^j$  можно вычислить такие физические величины, как сечение поглощения  $C_{abc}$ , сечение рассеяния  $C_{scat}$  и сечение экстинкции  $C_{ext}$ , определяемые по приведенной ниже процедуре [18]:

$$C_{scat} = \frac{W_{scat}}{I_i}, \quad C_{ext} = \frac{W_{ext}}{I_i}, \quad C_{abs} = C_{ext} - C_{scat}, \quad (3)$$

где  $I_i$  – интенсивность падающего света,

$$W_{scat} = \int_A S_{scat} \cdot e_r \cdot dA, \quad W_{ext} = - \int_A S_{ext} \cdot e_r \cdot dA, \quad (4)$$

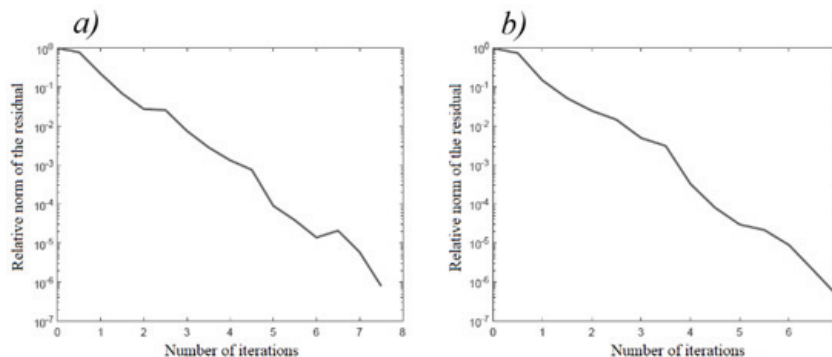


Рис. 1. Зависимости значений относительной нормы невязки от номера итерации, полученные методом бисопряженных градиентов с предобуславливанием.

Случай 4 частиц в слое с расстоянием между ними 2 мкм (а) и 1 мкм (б). Их параметры даны в таблице

Таблица

**Расчетные наборы параметров задачи для агрегатов частиц**

Параметр частицы	Значение параметра для частицы				
	I	II	III	IV	V
<i>Расстояние между частицами 2 мкм (рис. 1,а и 2) и 1 мкм (рис. 1,б)</i>					
Диаметр, мкм	6,5	6,5	7,0	7,6	—
Диаметр, мкм ядра частицы	4,0	4,0	4,0	4,0	
ее цитоплазмы	5,0	6,0	6,5	6,5	
Коэффициент преломления ядра	1,37				
То же для цитоплазмы	1,00				
То же для плазматической мембраны	1,33				
<i>Расстояние между частицами 2 мкм (рис. 3) и 1 мкм (рис. 4)</i>					
Диаметр, мкм	6,5	6,5	7,0	7,6	8,0
Диаметр, мкм ядра частицы	4,0	4,0	4,0	4,0	3,0
ее цитоплазмы	5,0	6,0	6,5	6,5	4,0
Коэффициент преломления ядра	1,37				
То же для цитоплазмы	1,00				
То же для плазматической мембраны	1,33				
<i>Расстояние между частицами 2 мкм (рис. 5)</i>					
Диаметр, мкм	6,6	6,6	7,1	7,7	8,1
Диаметр, мкм ядра частицы	4,0	4,0	4,0	4,0	3,0
ее цитоплазмы	5,0	6,0	6,5	6,5	4,0
Коэффициент преломления ядра	1,37				
То же для цитоплазмы	1,34				
То же для плазматической мембраны	1,33				
<i>Расстояние между частицами 2 мкм (рис. 7)</i>					
Диаметр, мкм	6,5	6,5	7,0	6,6	6,0
Коэффициент преломления ядра	1,37	1,33	1,33	1,37	1,37
<i>Расстояние между частицами 1 мкм (рис. 9)</i>					
Диаметр, мкм	6,5	6,5	7,0	8,6	12,0
Коэффициент преломления ядра	1,37	1,33	1,33	1,37	1,37

здесь

$$S_{scat} = \frac{1}{2} \Re[E_{scat}^j \times H_{scat}^{j*}], \quad S_{ext} = \frac{1}{2} \Re[E_{inc}^j \times H_{scat}^{j*} + E_{scat}^j \times H_{inc}^{j*}]; \quad (5)$$

$$W_{scat} = \frac{1}{2} \Re \int_0^{2\pi} \int_0^\pi [E_{scat(\theta)} H_{scat(\phi)}^* - E_{scat(\phi)} H_{scat(\theta)}^*] r^2 \sin \theta d\theta d\phi, \quad (6)$$

$$W_{ext} = \frac{1}{2} \Re \int_0^{2\pi} \int_0^\pi [E_{inc(\phi)} H_{scat(\theta)}^* - E_{inc(\theta)} H_{scat(\phi)}^* - E_{scat(\theta)} H_{inc(\phi)}^* + E_{scat(\phi)} H_{inc(\theta)}^*] r^2 \sin \theta d\theta d\phi, \quad (7)$$

где

$$E_{inc(\theta)} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n E_{mn} \left[ -ip_{mn}^0 \psi_n' \tau_{mn} + q_{mn}^0 \psi_n \pi_{mn} \right] \frac{e^{im\phi}}{kr}, \quad (8)$$

$$E_{inc(\phi)} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n E_{mn} \left[ iq_{mn}^0 \psi_n \tau_{mn} + p_{mn}^0 \psi_n' \pi_{mn} \right] \frac{e^{im\phi}}{kr}, \quad (9)$$

$$H_{inc(\theta)} = \frac{k}{\omega \mu^0} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n E_{mn} \left[ ip_{mn}^0 \psi_n \tau_{mn} - q_{mn}^0 \psi_n' \pi_{mn} \right] \frac{e^{im\phi}}{kr}, \quad (10)$$

$$H_{inc(\phi)} = \frac{k}{\omega \mu^0} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n E_{mn} \left[ iq_{mn}^0 \psi_n' \pi_{mn} + p_{mn}^0 \psi_n \tau_{mn} \right] \frac{e^{im\phi}}{kr}, \quad (11)$$

$$E_{scat(\theta)} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n E_{mn} \left[ -ia_{mn}^j \xi_n' \tau_{mn} - b_{mn}^j \xi_n \pi_{mn} \right] \frac{e^{im\phi}}{kr}, \quad (12)$$

$$E_{scat(\phi)} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n E_{mn} \left[ -ib_{mn}^j \xi_n' \tau_{mn} - a_{mn}^j \xi_n \pi_{mn} \right] \frac{e^{im\phi}}{kr}, \quad (13)$$

$$H_{scat(\theta)} = \frac{k}{\omega \mu^0} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n E_{mn} \left[ ia_{mn}^j \xi_n \pi_{mn} + b_{mn}^j \xi_n' \tau_{mn} \right] \frac{e^{im\phi}}{kr}, \quad (14)$$

$$H_{scat(\phi)} = \frac{k}{\omega \mu^0} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n E_{mn} \left[ ib_{mn}^j \xi_n' \pi_{mn} - a_{mn}^j \xi_n \tau_{mn} \right] \frac{e^{im\phi}}{kr}; \quad (15)$$

здесь использованы обозначения:  $\psi_n(\rho) = \rho j_n(\rho)$ ,  $\xi_n(\rho) = \rho h_n^{(1)}(\rho)$  – функции Риккати – Бесселя;  $E_{mn} = |E_0| i^n (2n+1) \frac{(n-m)!}{(n+m)!}$ ; величины  $q_{mn}^0$ ,  $p_{mn}^0$  определены в статье [11].

Подставив выражения для величин  $E_{inc(\theta)}$ ,  $E_{inc(\phi)}$ ,  $H_{inc(\theta)}$ ,  $H_{inc(\phi)}$ ,  $E_{scat(\theta)}$ ,  $E_{scat(\phi)}$ ,  $H_{scat(\theta)}$ ,  $H_{scat(\phi)}$  в формулы (6) и (7), имеем:

$$C_{scat} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n (n+1)(2n+1) \frac{(n-m)!}{(n+m)!} (|a_{mn}^j|^2 + |b_{mn}^j|^2), \quad (16)$$

$$C_{ext} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n (n+1)(2n+1) \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \Re(p_{mn}^{*0} a_{mn}^j + q_{mn}^{*0} b_{mn}^j). \quad (17)$$

На основе выражений (12) для  $\theta$ -составляющей интенсивности рассеянного излучения получим, что

$$I_{scat(\theta)} = I_i \cdot |E_{scat(\theta)}|^2.$$

Таким образом, на данном этапе изложения материала получены формулы, позволяющие определять зависимости вышеописанных спектральных характеристик от длины волны падающего лазерного излучения (см. рис. 2 – 5).

Отметим, что при расчетах по методу Т-матриц в данной работе был использован метод конечных разностей во временной области (*англ.* Finite Difference Time Domain (FDTD)). Для задачи рассеяния на многослойной сфере использовался математический подход, описание которого приведено в статье [12].

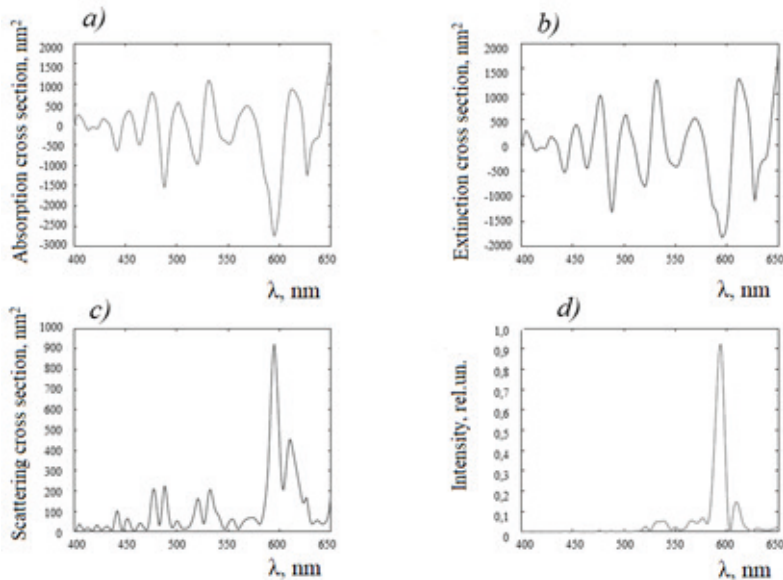


Рис. 2. Графическое представление сечений поглощения (a), экстинкции (b), рассеяния (c) и интенсивности рассеяния как функций длины волны лазерного излучения, падающего под нулевым углом (d), при заданных параметрах задачи (4 частицы в слое, расстояние между частицами – 2 мкм, см. таблицу)

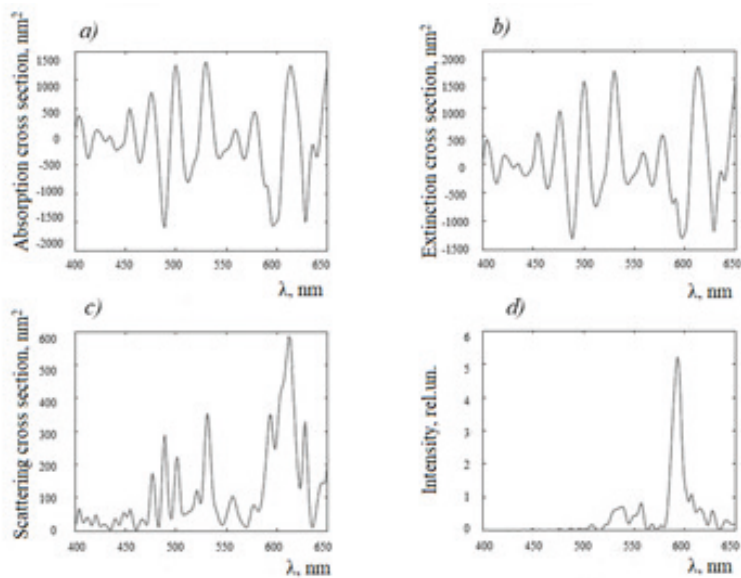


Рис. 3. Графическое представление сечений поглощения (a), экстинкции (b), рассеяния (c) и интенсивности рассеяния как функций длины волны лазерного излучения, падающего под нулевым углом (d), при заданных параметрах задачи (5 частиц в слое, расстояние между частицами – 2 мкм, см. таблицу)

### Определение функции распределения клеток крови по размерам

В качестве известной переменной (измеренной приближенно) здесь будет выступать интенсивность рассеяния света на агрегате многослойных частиц  $I_{blood}(\lambda)$ , моделирующих форменные элементы крови. Результатом решения задачи должно быть распределение клеток крови по размерам.

В данном случае, для демонстрации возможностей метода, величина  $I_{blood}(\lambda)$  будет определена при помощи модельного эксперимента (см. графики на рис. 2,  $d = 5, d$ ).

При этом поставленную задачу можно описать стандартным (для подобных случаев) образом – линейным интегральным уравнением Фредгольма первого рода следующего вида:

$$Au \equiv \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} I(\rho, \lambda) u(\rho) d\rho = f(\lambda), \quad (18)$$

где  $A$  – интегральный оператор;  $I(\rho, \lambda)$  – ядро интегрального уравнения;  $\rho$  – приведенный радиус,  $\rho = ka$  ( $k$  – модуль волнового вектора,  $a$  – радиус частицы);  $u(\rho)$  – искомое распределение клеток по размерам (приведенным радиусам);  $f(\lambda)$  – интенсивность рассеяния на группе многослойных сферуллированных частиц, определяемая из модельного эксперимента,  $f(\lambda) \equiv I_{blood}(\lambda)$ .

Данная задача относится к кругу так называемых обратных некорректных задач. Ядро интегрального уравнения  $I(\rho, \lambda)$  определяется как интенсивность света, рассеянного в направлении угла  $\theta$ , выбранного в эксперименте, на сферической многослойной частице. Будем предполагать, что  $I(\rho, \lambda)$  – функция, непрерывная в прямоугольнике

$$\Omega = ([c, d] \times [a, b]) \text{ и } f(\lambda) \in L_{2[c, d]},$$

где  $a \equiv \rho_{\min}$ ,  $b \equiv \rho_{\max}$ ,  $c \equiv \lambda_{\min}$ ,  $d \equiv \lambda_{\max}$ .

Пусть  $u(\rho)$  – гладкая функция, а вместо величины  $f$  нам известно ее приближенное значение  $f_{\delta}$ , такое что  $\|f - f_{\delta}\|_{L_{2[c, d]}} \leq \delta$ . Тогда выберем пространство решений как  $U = W_{p[a, b]}^1$ .

Пусть вместо функции  $I(\rho, \lambda)$  фактически задана функция  $I_h(\rho, \lambda)$ , при этом

$$\|I(\rho, \lambda) - I_h(\rho, \lambda)\|_{L_2(\Omega)} \leq h;$$

тогда  $\|A - A_h\|_{W_2^1 \rightarrow L_2} \leq h$ , где  $A_h$  – приближение для интегрального оператора  $A$  с точностью  $h$  в операторной норме, которое соответствует ядру  $I_h(\rho, \lambda)$ .

Следует отметить, что обращение оператора  $A$  для обратной задачи (см. выражение (18)) неустойчиво для пространства  $W_{p[a, b]}^1$ . Тогда для численного нахождения распределения  $u(\rho)$  можно использовать метод регуляризации Тихонова.

Запишем уравнение Тихонова [19, 20]:

$$(A_h^* A_h + \alpha C) u^\alpha = A_h^* f,$$

где  $A_h$  – оператор из пространства  $W_{2[a, b]}^1$  в подпространство  $L_{2[c, d]}$ ;  $A_h^*$  – оператор из  $L_{2[c, d]}$  в  $W_{2[a, b]}^1$  (сопряженный к  $A_h$ );  $C$  – некоторый оператор, матрица которого определена в монографии [20].

Отметим, что в данной постановке мы предполагаем, что информация о гладкости точного решения отсутствует; тогда рассматриваем оператор  $A_h$  исходного интегрального уравнения как действующий из  $L_{2[a, b]}$  в  $L_{2[c, d]}$ . В этом случае сглаживающий функционал принимает вид

$$M^\alpha[u] = \|A_h u^\alpha - f_{\delta}\|_{L_{2[c, d]}}^2 + \alpha \|u\|_{L_{2[c, d]}}^2 \rightarrow \min, \quad (19)$$

и уравнение Тихонова будет иметь вид

$$(A_h^* A_h + \alpha E) u^\alpha = A_h^* f,$$

где  $E$  – единичный оператор.



Функция  $u^a$ , минимизирующая функционал (19), будет зависеть от значения параметра регуляризации  $\alpha$ .

С целью выбора параметра регуляризации, обеспечивающего оптимальное соответствие между данными эксперимента и априорной информацией, мы будем использовать для данного случая следующие подходы: метод относительной невязки, критерий квази-оптимальности, принцип сглаживающего функционала, метод  $L$ -кривой [19, 20]. Выбор параметра регуляризации по заданным погрешностям ядра интегрального уравнения и

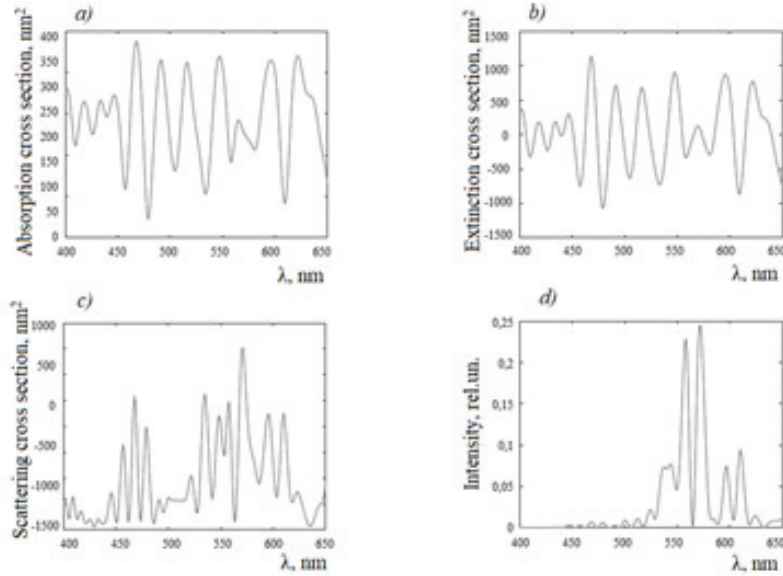


Рис. 4. Графическое представление сечений поглощения (a), экстинкции (b), рассеяния (c) и интенсивности рассеяния как функций длины волны лазерного излучения, падающего под нулевым углом (d), при заданных параметрах задачи (5 частиц в слое, расстояние между частицами – 1 мкм, см. таблицу)

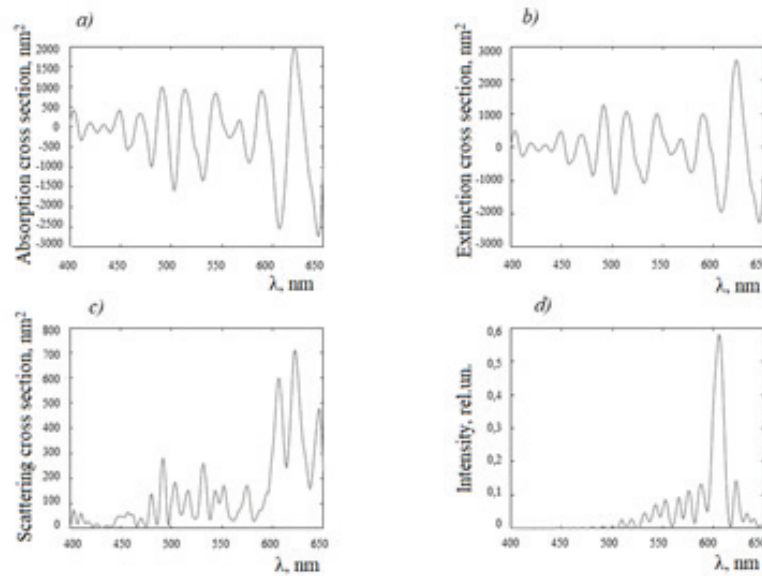


Рис. 5. Графическое представление сечений поглощения (a), экстинкции (b), рассеяния (c) и интенсивности рассеяния как функций длины волны лазерного излучения, падающего под нулевым углом (d), при заданных параметрах задачи (5 частиц в слое, расстояние между частицами – 2 мкм, см. таблицу)

экспериментальных данных (см. далее рис. 6 и 8) осуществлялся автоматически посредством программного комплекса, разработанного в рамках настоящей работы.

### Обсуждение результатов

Полученные результаты (см. рис. 2 – 5) демонстрируют, что представленный в статье математический подход и разработанное на его основе программное обеспечение позволяют определять факт агрегирования моделируемых частиц и их параметры, поскольку варьирование расстояния между ними сопровождается изменением не только численных значений спектральных характеристик, но и формы кривых, что видно на указанных рисунках. Мы рассматривали многократное рассеяние света на группе сферулированных частиц с включениями концентрических сфер различного радиуса.

На рис. (2,  $d - 5, d$ ) графически представлены интенсивности рассеяния и сечения рассеяния лазерного излучения как функции его длины волны при разных параметрах задачи (параметры сведены в таблицу).

Следует заметить, что сечение рассеяния характеризует эффективность рассеяния света частицей, разрешенного по углу. Различия как в сечениях рассеяния, так и в его интенсивностях для различных биосубстанций, для форменных элементов крови, следуют, в частности, из разницы в размерах самих клеток, а также вариативности их внутренних структур.

При нахождении функции распределения эритроцитов по приведенным радиусам мы решали задачу математического описания взаимодействия лазерного излучения с агрегатом, состоящим из конечного числа частиц, причем с учетом их структуры и эффектов многократного светорассеяния, а также с точно заданными геометрическими и оптическими характеристиками. В качестве модельных частиц выступали эритроциты. Следует отметить, что моделирование эритроцита как однородного рассеивателя вполне уместно, в силу отсутствия у него клеточных органелл и тонкости его клеточной мембраны (она не оказывает заметного влияния на рассеяние света). При этом в ряде работ эритроцит рассматривался в первом приближении как структурно однородная сфера [21, 22].

Чтобы проиллюстрировать вышеописанные методы, предварительно рассмотрим распределения эритроцитов по размерам, используемые в медицинской практике [23]:

$$u(\rho) = A_1 \cdot e^{B_1(\rho-b_1)^2}, \quad (20)$$

$$u(\rho) = A_2 \cdot e^{B_2(\rho-b_2)^2} + A_3 \cdot e^{B_3(\rho-b_3)^2}. \quad (21)$$

Нормальное распределение описывается формулой вида (20) ( $A_1 = 1, B_1 = -3, b_1 = 3$ ); бимодальному распределению соответствует формула вида (21), причем фракция аномально больших клеток составляет 30 % ( $A_2 = 0,80, B_2 = -1,00, b_2 = 3,00, A_3 = 0,25, B_3 = -2,30, b_3 = 5,0$ ) [23].

Нами были использованы разные способы выбора параметра регуляризации  $\alpha$  для нормального распределения эритроцитов по размерам:

- по невязке, где  $\|Au^\alpha - f\| / \|f\| = \delta$ , значение  $\alpha = 0,00216$  (рис. 6,а);
- по критерию квазиоптимальности, где  $\|\alpha du^\alpha / d\alpha\|$ , значение  $\alpha = 1,1059 \cdot 10^{-9}$  (рис. 6,б);
- по критерию  $L$ -кривой, где  $L^* = \lg \|Au^\alpha - f\|, L = \lg \|u^\alpha\|$ , значение  $\alpha = 2,7648 \cdot 10^{-8}$  (рис. 6,с);
- по принципу сглаживающего функционала, где  $(\alpha \|u^\alpha\|^2 + \|Au^\alpha - f\|^2) / \|f\|^2 = C\delta^2$ , значение  $\alpha = 0,00216$  (6,д).

При этом оптимальные значения параметра регуляризации составило

$$\alpha_{opt} = 0,002160 \text{ при } h = 0,11, \delta = 0,10.$$

Рассмотрим графики двух функций, представленных на рис. 7. Функция распределения по размерам (20) представлена непрерывной кривой, а результат численного решения обратной задачи представлен точечными контурами при уровне шума в правой части уравнения (18), принятое равным 5 %. Видно, что кривые практически совпадают. Можно с уверенностью констатировать, что с помощью численного решения задачи вида (18)

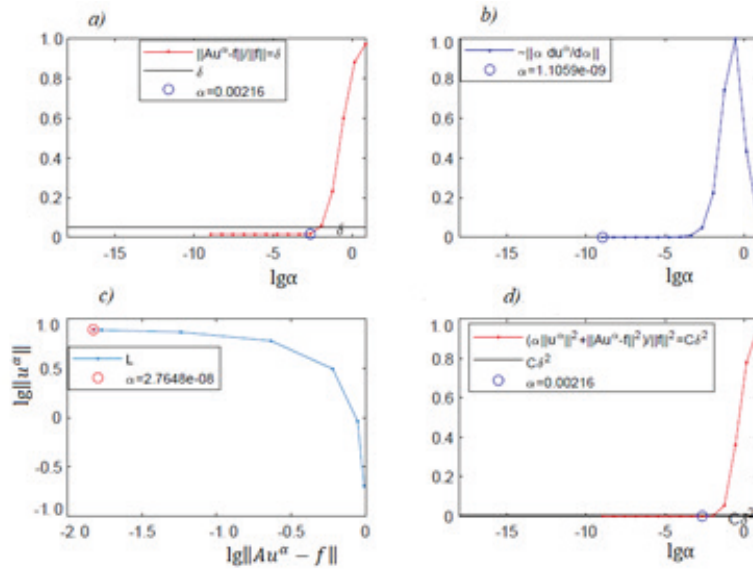


Рис. 6. Нахождение параметра регуляризации путем выбора по методу относительной невязки (a), по критериям квазиоптимальности (b) и L-кривой (c), а также по принципу сглаживающего функционала (d). Случай нормального распределения частиц по размерам. Итоговое оптимальное значение искомого параметра приведено в тексте

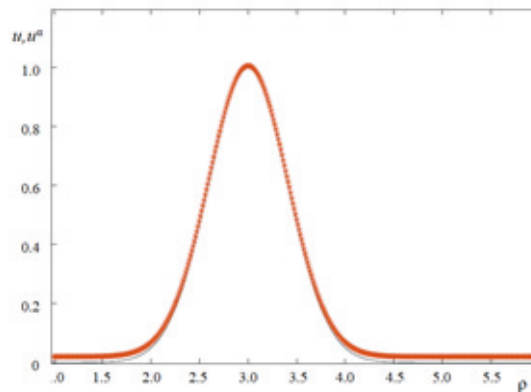


Рис. 7. Результаты расчета функций  $u(\rho)$  (см. ф-лу (20), черная сплошная кривая) и  $u^\alpha(\rho)$  (численное решение обратной задачи, цветная кривая) – распределений 5 частиц по приведенным радиусам  $\rho$ ; расстояние между частицами – 2 мкм (см. таблицу)

восстановлен с высокой точностью профиль распределения по размерам частиц, который определен выражением (20). Более того, вполне резонно предположить, что полученная кривая распределения близка к стандартной кривой Прайс-Джонса, описывающей распределение эритроцитов в крови здорового человека [24].

Как и для случая нормального распределения, на рис. 8 представлен выбор параметра регуляризации  $\alpha$  для случая бимодального распределения эритроцитов по размерам. Укажем основные результаты выбора: по невязке,  $\alpha = 0,012805$  (рис. 8,a); по критерию квазиоптимальности,  $\alpha = 1,311200 \cdot 10^{-9}$  (рис. 8,b); по критерию L-кривой,  $\alpha = 3,27810 \cdot 10^{-8}$  (рис. 8,c); по принципу сглаживающего функционала,  $\alpha = 0,00216$  (рис. 8,d).

Оптимальные значения параметра регуляризации составило

$$\alpha_{opt} = 0,012805 \text{ при } h = 0,11, \delta = 0,10.$$

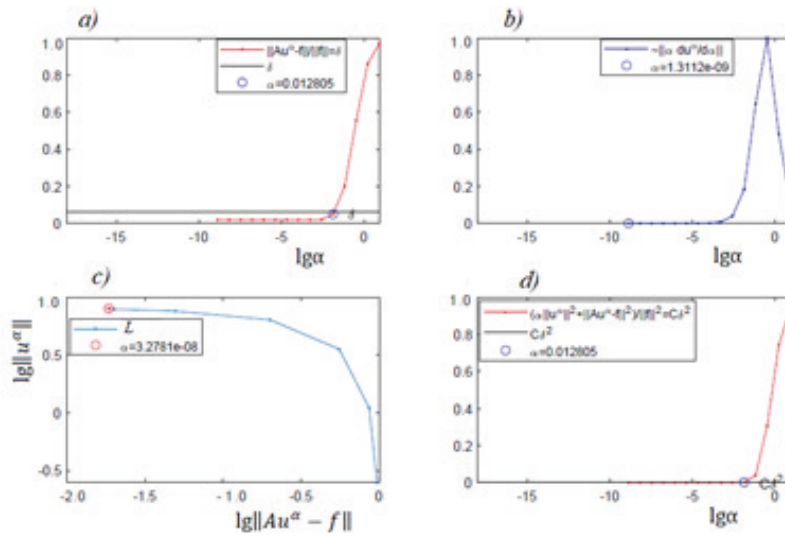


Рис. 8. Нахождение параметра регуляризации путем выбора по методу относительной невязки (a), по критериям квазиоптимальности (b) и L-кривой (c), а также по принципу сглаживающего функционала (d). Случай бимодального распределения частиц по размерам.

Итоговое оптимальное значение искомого параметра приведено в тексте

Обратимся к расчетным данным, представленным на рис. 9. Заранее заданное асимметричное бимодальное распределение (21) по размерам представлено непрерывной линией. Подобное распределение моделирует наличие в нем фракций нормальных и аномально больших эритроцитов.

Численное решение задачи дало с высокой степенью точности восстановление интенсивностей обоих пиков распределения частиц по размерам (пики относятся к фракциям типичных и аномально больших клеток).

Очевидно, что решение, полученное с использованием минимизации, соответствует с приемлемой степенью точности модельным зависимостям, заранее заданным для разных типов распределений. Полученное нами значение оценки ошибки вполне соответствует уровню шума правой части.

Таким образом, аргументированно показано, что с учетом априорной информации о гладкости и финитности решения можно достаточно корректно восстанавливать распределения эритроцитов по приведенным радиусам и определять изменения их ширины, что важно и актуально для современной медицины [25].

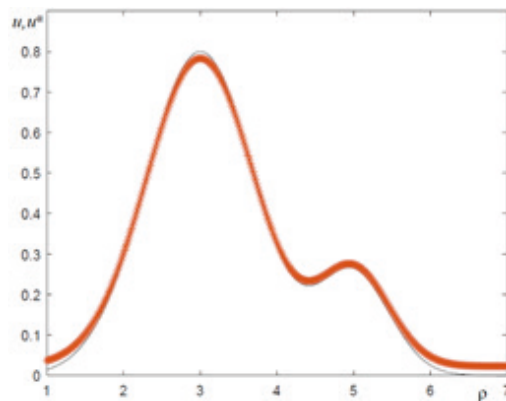


Рис. 9. Результаты расчета функций  $u(\rho)$  (см. ф-лу (21), серая сплошная кривая) и  $u^\alpha(\rho)$  (численное решение обратной задачи, цветная кривая) – распределений 5 частиц по приведенным радиусам  $\rho$ ; расстояние между частицами – 1 мкм (см. таблицу)



На основе разработанной математической модели имеется возможность определять *in vitro* функцию распределения по размерам для частиц, моделирующих клетки крови.

### Заключение

Из наиболее существенных результатов статьи можно выделить следующие:

1. Построена новая по сути модель, пригодная для прогнозирования спектральных характеристик агрегата сферических частиц сложной структуры. Модель актуальна для случая *in vitro* и самосогласованно учитывает многократное рассеяние света на объектах.

2. Спектральные распределения оптических параметров биологической среды, изменяющиеся под влиянием разных факторов и вызывающие флуктуации функционально-морфологического состояния биологических тканей (например, процессы агрегации форменных элементов крови), вполне успешно определяются на основе предлагаемой модели.

3. На базе представленной математической модели разработано эффективное программное обеспечение, позволяющее извлекать информацию из экспериментальных данных, относящихся к распределению по размерам клеток крови.

4. Результаты, даваемые предлагаемой моделью, демонстрируют хорошую чувствительность к флуктуациям геометрических характеристик ядра клеток крови, а также их плазматической мембраны. Подобная чувствительность позволяет исследовать физиологические процессы, протекающие в организме: так, увеличение коэффициента преломления среды на 0,34 (и, соответственно, диаметра моделируемых частиц на 0,1 мкм), сопровождается существенными изменениями спектральных характеристик этих частиц (см. графики на рис. 3 и 5). Следует отметить, что изменения размеров клеточного ядра часто связаны с изменениями метаболизма в человеческом организме, вызванными повреждением клетки или физиологическими дисфункциями.

Предлагаемый в данной работе вид моделирования можно использовать при диагностике различных патологий. Например, в статье [26] утверждается, что изменение показателя преломления среды в ядре клетки указывает на старт процесса деления (митоз), а в работе [27] показано, что ядро раковой клетки демонстрирует внутренние структурные изменения, по сравнению с нормальными клетками, которые связаны с геометрическими характеристиками изучаемого объекта.

Построенная математическая модель и программное обеспечение на ее основе позволяют определять и анализировать спектральные характеристики оптических параметров биологической среды, в том числе и с учетом динамики.

5. Новая математическая модель позволяет находить функцию распределения частиц по приведенным радиусам для различных структур сферулированных частиц при изменении их геометрических, а также оптических характеристик и при этом учитывает многократное рассеяние, что очень важно для применения в медицинской практике.

Важным достижением проведенного исследования является создание программного комплекса, обеспечивающего возможность рассчитывать рассеяние света на агрегате, структура которого включает слоистые сферические частицы, а также корректно восстанавливать распределения эритроцитов по приведенным радиусам и определять изменение ширины такого распределения эритроцитов. Разработанный комплекс представляет определенную ценность как эффективный и универсальный инструмент для специалистов биомедицинской оптики; он позволяет варьировать оптические характеристики и размеры биоструктуры, подлежащей исследованию, и дает возможность фиксировать зависимости между ними — все на одной установке и в автоматическом режиме.

Представленные возможности программного комплекса открывают перспективу для создания базы данных для частиц, имеющих различные оптические и геометрические характеристики. В дальнейшем это позволит установить и детально исследовать корреляционные зависимости между оптическими характеристиками и параметрами моделируемой биосубстанции и их биологическими свойствами.

Получение сведений о склонности к агрегации форменных элементов крови позволит качественно оценивать изменения агрегационно-деагрегационных взаимодействий и проводить учет динамики соответствующих показателей.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Тучин В. В.** Оптика биологических тканей. Методы рассеяния света в медицинской диагностике. М.: Ай Пи Ар Медиа, 2021. 802 с.
2. **Тучин В. В.** Лазеры и волоконная оптика в биомедицинских исследованиях. М.: Ай Пи Ар Медиа, 2021. 495 с.
3. **Mishchenko M. I., Mackowski D. W., Travis L. D.** Scattering of light by bispheres with touching and separated components // *Applied Optics*. 1995. Vol. 34. No. 21. Pp. 4589–4599.
4. **Mishchenko M. I., Travis L. D., Mackowski D. W.** T-matrix computations of light scattering by nonspherical particles: A review // *Journal of Quantum Spectroscopy & Radiative Transfer*. 1996. Vol. 55. No. 5. Pp. 535–575.
5. **Xu Y.** Scattering Mueller matrix of an ensemble of variously shaped small particles // *Journal of the Optical Society of America. A*. 2003. Vol. 20. No. 11. Pp. 2093–2105.
6. **Doicu A., Wreidt T., Eremin Y.** Light scattering by systems of particles. Null-field method with discrete sources: Theory and programs. Springer Series in Optical Sciences. Vol. 24. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2006. 324 p.
7. **Yurkin M. A., Hoekstra A. G.** The discrete dipole approximation: An overview and recent developments // *Journal of Quantum Spectroscopy & Radiative Transfer*. 2007. Vol. 106. No. 1–3. Pp. 558–589.
8. **Taflove A., Hagness S. C.** Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method. Boston, London: Artech House, 2005. 997 p.
9. **Mackowski D. W.** Analysis of radiative scattering for multiple sphere configurations // *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical & Physical Sciences*. 1991. Vol. 433. No. 1889. Pp. 599–614.
10. **Xu Y.** Electromagnetic scattering by an aggregate of spheres // *Applied Optics*. 1995. Vol. 34. No. 21. Pp. 4573–4588.
11. **Куликов К. Г., Радин А. М.** Исследование дисперсии и спектра поглощения совокупности сферических частиц в полости оптического резонатора и новые возможности прогноза оптических характеристик биологических сред методом внутрирезонаторной лазерной спектроскопии // *Оптика и спектроскопия*. 2002. Т. 92. № 2. С. 228–236.
12. **Moroz A.** A recursive transfer-matrix solution for a dipole radiating inside and outside a stratified sphere // *Annals of Physics*. 2005. Vol. 315. No. 2. Pp. 352–418.
13. **Cruzan O. R.** Translational addition theorems for spherical vector wave functions // *Quarterly of Applied Mathematics*. 1962. Vol. 20. No. 1. Pp. 33–40.
14. **Stein S.** Addition theorems for spherical wave functions // *Quarterly of Applied Mathematics*. 1961. Vol. 19. No. 1. Pp. 15–24.
15. **Saad Y.** Iterative methods for sparse linear systems. USA: SIAM, 2003. 535 p.
16. **Van der Vorst H. A.** Iterative Krylov methods for large linear systems. Cambridge: Cambridge University, 2003. 194 p.
17. **Куликов К. Г., Кошлан Т. В., Концевая В. Г.** Программный комплекс для расчета оптических характеристик на группе диэлектрических тел произвольной формы. Программа для ЭВМ. № 2022611755. 1200 стр. Российская Федерация; зарегистрирована в реестре Федеральной службы по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам 01.02.2022.
18. **Борен К., Хафмен Д.** Поглощение и рассеяние света малыми частицами. Пер. с англ. М.: Мир, 1986. 664 с.
19. **Тихонов А. Н., Арсенин В. А.** Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 285 с.
20. **Тихонов А. Н., Гончарский А. В., Степанов В. В., Ягола А. Г.** Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1990. 14 с.
21. **Steinke J. M., Shepherd A. P.** Comparison of Mie theory and the light scattering of red blood cells // *Applied Optics*. 1988. Vol. 27. No. 19. Pp. 4027–4033.
22. **Yaroslavsky A. N., Goldbach T., Schwarzmaier H.** Influence of the scattering phase function approximation on the optical properties of blood determined from the integrating sphere measurements // *Journal of Biomedical Optics*. 1999. Vol. 4. No. 1. Pp. 47–53.
23. **Устинов В. Д.** Об обратных задачах восстановления распределения эритроцитов по размерам в лазерной дифрактометрии // *Математическое моделирование*. 2017. Т. 29. № 3. С. 51–62.



24. **Висмонт Ф. И., Лемешонок Л. С., Попутников Д. М.** Патолофизиологический анализ гемограмм и оценка типовых нарушений системы крови. Минск: Изд. Белорусского государственного медицинского университета, 2011. 72 с.
25. **Dobbe J. G. G., Hardeman M. R., Streekstra G. J., Strackee J., Ince C., Grimbergen C. A.** Analyzing red blood cell-deformability distributions // *Blood Cells, Molecules, and Diseases*. 2002. Vol. 28. No. 3. Pp. 373–384.
26. **Brunsting A., Mullaney P. F.** Differential light scattering from spherical mammalian cells // *Biophysical Journal*. 1974. Vol. 14. No. 6. Pp. 439–453.
27. **Zink D., Fischer A. H., Nickerson J. A.** Nuclear structure in cancer cells // *Nature Reviews Cancer*. 2004. Vol. 4. No. 9. Pp. 677–687.

## REFERENCES

1. **Tuchin V. V.**, *Optika biologicheskikh tkaney. Metody rasseyaniya sveta v meditsinskoj diagnostike* [Biological tissue optics. Light scattering methods for medical diagnostics], IPR Media, Moscow, 2021 (in Russian).
2. **Tuchin V. V.**, *Lazery i volokonnaya optika v biomeditsinskikh issledovaniyakh* [Lasers and fiber optics in biomedical studies], IPR Media, Moscow, 2021 (in Russian).
3. **Mishchenko M. I., Mackowski D. W., Travis L. D.**, Scattering of light by bispheres with touching and separated components, *Appl. Opt.* 34 (21) (1995) 4589–4599.
4. **Mishchenko M. I., Travis L. D., Mackowski D. W.**, T-matrix computations of light scattering by nonspherical particles: A review, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 55 (5) (1996) 535–575.
5. **Xu Y.**, Scattering Mueller matrix of an ensemble of variously shaped small particles, *J. Opt. Soc. Am. A*. 20 (11) (2003) 2093–2105.
6. **Doicu A., Wreidt T., Eremin Y.**, Light scattering by systems of particles. Null-field method with discrete sources: Theory and programs, Springer Series in Optical Sciences. Vol. 24. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2006.
7. **Yurkin M. A., Hoekstra A. G.**, The discrete dipole approximation: An overview and recent developments, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 106 (1–3) (2007) 558–589.
8. **Taflove A., Hagness S. C.**, Computational electrodynamics: The finite-difference time-domain method, Artech House, Boston, London, 2005.
9. **Mackowski D. W.**, Analysis of radiative scattering for multiple sphere configurations, *Proc. R. Soc. Lond. Ser. Math. Phys. Sci. A: Math. Phys. Sci.* 433 (1889) (1991) 599–614.
10. **Xu Y.**, Electromagnetic scattering by an aggregate of spheres, *Appl. Opt.* 34 (21) (1995) 4573–4588.
11. **Kulikov K. G., Radin A. M.**, Study of dispersion and absorption of an ensemble of spherical particles inside an optical cavity and new possibilities of predicting the optical characteristics of biological media by intracavity laser spectroscopy, *Optics & Spectroscopy*. 92 (2) (2002) 199–206.
12. **Moroz A.**, A recursive transfer-matrix solution for a dipole radiating inside and outside a stratified sphere, *Ann. Phys.* 315 (2) (2005) 352–418.
13. **Cruzan O. R.**, Translational addition theorems for spherical vector wave functions, *Quart. Appl. Math.* 20 (1) (1962) 33–40.
14. **Stein S.**, Addition theorems for spherical wave functions, *Quart. Appl. Math.* 19 (1) (1961) 15–24.
15. **Saad Y.**, Iterative methods for sparse linear systems. SIAM, USA, 2003.
16. **Van der Vorst H. A.**, Iterative Krylov methods for large linear systems, Cambridge University, Cambridge, 2003.
17. **Kulikov K. G., Koshlan T. V., Kontsevaya V. G.**, Programmnyy kompleks dlya rascheta opticheskikh kharakteristik na gruppe dielektricheskikh tel proizvolnoy formy. Programma dlya EVM [Software package for calculating optical characteristics on a group of dielectric arbitrary shaped bodies] No. 2022611755; 1200 p. Russian Federation; recorded in the Register of Federal Service on Intellectual Property, Patents and Trademarks 01.02.2022 (in Russian).
18. **Bohren C. F., Huffman D. R.**, Absorption and scattering of light by small particles, John Wiley & Sons, Inc., New-York, Toronto, 1998.
19. **Tikhonov A. N., Arsenin V. A.**, Metody resheniya nekorrektnykh zadach [Methods for solving ill-posed problems], Nauka, Moscow, 1979 (in Russian).

20. **Tikhonov A. N., Goncharov A. V., Stepanov V. V., Yagola A. G.**, Chislennyye metody resheniya nekorrektnykh zadach [Numerical methods for solving ill-posed problems], Nauka, Moscow, 1990 (in Russian).

21. **Steinke J. M., Shepherd A. P.**, Comparison of Mie theory and the light scattering of red blood cells, *Appl. Opt.* 27 (19) (1988) 4027–4033.

22. **Yaroslavsky A. N., Goldbach T., Schwarzmaier H.**, Influence of the scattering phase function approximation on the optical properties of blood determined from the integrating sphere measurements, *J. Biomed. Opt.* 4 (1) (1999) 47–53.

23. **Ustinov V. D.**, On inverse reconstruction problems of erythrocyte size distribution in laser diffractometry, *Math. Models Comput. Simul.* 9 (5) (2017) 561–569.

24. **Vismont F. I., Lemeshonok L. S., Poputnikov D. M.**, Patofiziologicheskiy analiz gemogramm i otsenka tipovykh narusheniy sistemy krovi [Pathophysiological analysis of haemogrammas and evaluation of typical disorders of the blood system], BGMU, Minsk, 2011 (In Russian).

25. **Dobbe J. G. G., Hardeman M. R., Streekstra G. J., et al.**, Analyzing red blood cell-deformability distributions, *Blood Cells, Mol. Dis.* 28 (3) (2002) 373–384.

26. **Brunsting A., Mullaney P. F.**, Differential light scattering from spherical mammalian cells, *Biophys. J.* 14 (6) (1974) 439–453.

27. **Zink D., Fischer A. H., Nickerson J. A.**, Nuclear structure in cancer cells, *Nat. Rev. Cancer.* 4 (9) (2004) 677–687.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**КОНЦЕВАЯ Вера Геннадьевна** – старший преподаватель кафедры математики и теории игр Псковского государственного университета, г. Псков, Россия.

180000, Россия, г. Псков, пл. Ленина, д. 2.

nkoncevoi@mail.ru

ORCID: 0000-0002-1434-5056

**ГОЛОВИЦКИЙ Александр Петрович** – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

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

alexandergolovitski@yahoo.com

ORCID:0000-0003-4292-0959

**КУЛИКОВ Кирилл Геннадьевич** – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы биомедицинских систем и технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

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

kulikov.kirill.g@gmail.com

ORCID: -0000-0002-4610-7394

## THE AUTHORS

**KONTSEVAYA Vera G.**

*Pskov State University*

2, Lenin Sq., Pskov, 180000, Russia

nkoncevoi@mail.ru

ORCID: 0000-0002-1434-5056



**GOLOVITSKII Alexander P.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
alexandergolovitski@yahoo.com  
ORCID:0000-0003-4292-0959

**KULIKOV Kirill G.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia  
kulikov.kirill.g@gmail.com  
ORCID: 0000-0002-4610-7394

*Статья поступила в редакцию 04.03.2022. Одобрена после рецензирования 15.03.2022.*  
*Принята 15.03.2022.*

*Received 04.03.2022. Approved after reviewing 15.03.2022. Accepted 15.03.2022.*

Научная статья

УДК 539.12:537.63:537.868

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15109>

## ДВИЖЕНИЕ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ МНОГОТОНАЛЬНОЙ АМПЛИТУДНО-МОДУЛИРОВАННОЙ ВОЛНЫ И ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Г. Ф. Копытов<sup>1</sup>, Д. И. Кудрявцев<sup>2</sup> ✉

<sup>1</sup> Московский государственный университет технологий и управления  
имени К. Г. Разумовского (Первый казачий университет), г. Москва, Россия;

<sup>2</sup> Кубанский государственный университет, г. Краснодар, Россия

✉ [dmitriy-kudryavtsev-2016@mail.ru](mailto:dmitriy-kudryavtsev-2016@mail.ru)

**Аннотация.** Представлено решение уравнения движения заряженной частицы в электромагнитном поле циркулярно- и линейно-поляризованной многотональной амплитудно-модулированной волны, в присутствии постоянного однородного магнитного поля. Проанализировано движение заряженной частицы в этих полях и выражено в виде зависимостей ее средней кинетической энергии от интенсивности электромагнитных волн, глубины их модуляции, отношения частоты модуляции к несущей частоте, а также от напряженности постоянного магнитного поля. Решение уравнения движения заряженной частицы в поле плоской электромагнитной волны открывает возможности различных приложений, связанных, в частности, с современными разработками многочастотных лазеров и технологии лазерной модуляции. Предлагаемое исследование было проведено в связи с широким практическим применением высокотемпературной плазмы.

**Ключевые слова:** многотональная амплитудно-модулированная волна, заряженная частица, средняя кинетическая энергия, уравнение движения

**Для цитирования:** Копытов Г. Ф., Кудрявцев Д. И. Движение заряженной частицы в электромагнитном поле многотональной амплитудно-модулированной волны и постоянном магнитном поле // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 1. С 98–112. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15109>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15109>

## THE MOTION OF A CHARGED PARTICLE IN THE ELECTROMAGNETIC FIELD OF A MULTITONAL AMPLITUDE-MODULATED WAVE AND IN THE CONSTANT MAGNETIC FIELD

**G. F. Kopytov**<sup>1</sup>, **D. I. Kudryavtsev**<sup>2</sup> ✉<sup>1</sup> Moscow State University of Technology and Management  
(The First Cossack University), Moscow, Russia;<sup>2</sup> Kuban State University, Krasnodar, Russia✉ [dmitriy-kudryavtsev-2016@mail.ru](mailto:dmitriy-kudryavtsev-2016@mail.ru)

**Abstract.** This article presents the exact solution of the equation of motion for a charged particle in the electromagnetic field of circularly and linear polarized multitonal amplitude-modulated waves, as well in the presence of a constant uniform magnetic field. The motion of a charged particle in the both fields was analyzed and was expressed as dependences of its average kinetic energy on the electromagnetic waves' intensity, on their modulation percentage, on the modulation frequency-to carrier one ratio and on the constant magnetic field strength. The solution of the equation of the charged particle's motion in the electromagnetic field of the plane wave opens up opportunities for different applications related, in particular, to various developments of multifrequency lasers and laser modulation technology. This study was undertaken in connection with the wide practical use of high-temperature plasma.

**Keywords:** multitoned amplitude-modulated wave, charged particle, average kinetic energy, equation of motion

**For citation:** Kopytov G. F., Kudryavtsev D. I., The motion of a charged particle in the electromagnetic field of a multitonal amplitude-modulated wave and in the constant magnetic field, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (1) (2022) 98–112. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15109>

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

### Введение

В такой области знания, как ускорение заряженных частиц через взаимодействие с плазмой лазерных импульсов короткой продолжительности и высоких интенсивностей порядка  $10^{22}$  Вт/см<sup>2</sup>, проведены широкомасштабные исследования [1, 2]. Так, вопрос о динамике заряженной частицы в поле монохроматической волны был поставлен еще в первой половине прошлого века. Решение с квантовых позиций было предложено Д. М. Волковым [3], в классической же формулировке оно позднее было получено Я. И. Френкелем [4], а также (независимо от него) Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшицем [5]. Таким образом с течением времени задача претерпевала модификацию. Решение уравнения движения элементарной частицы в поле плоской монохроматической волны было получено в работе [6]. Более сложные частные случаи, когда лазер излучает электромагнитную волну, модулированную по частоте или амплитуде, были разобраны в дальнейших статьях [7 – 9]. Большой интерес представляет также влияние на подобные системы постоянного магнитного поля, заданного внешне. Наши работы [10 – 12] как раз посвящены этому вопросу.

Ценность указанных статей и настоящей определяется математической интерпретацией данного взаимодействия, описания управления кинетической энергией элементарной частицы с помощью параметров электромагнитного излучения. Частицы со сравнительно низкими энергетическими характеристиками используются в таких сферах, как получение изображения на экране электронного микроскопа, ликвидация злокачественных (раковых) клеток и бактерий, генерация рентгеновского излучения. Частицы же с высокими энергетическими характеристиками, превышающими уровень в 1 МэВ, представляют научный интерес для исследователей структуры микрообъектов (кластеры, атомные ядра), природы фундаментальных сил и других проблем. Именно этим и определяется практическая значимость данной области знания.

Необходимо обратить внимание на простой спектральный состав электромагнитной волны (ЭМ), предполагаемый в работах [8, 9, 12], где ее называют однотональной амплитудно-модулированной электромагнитной волной.

Настоящая работа отличается от этих трудов тем, что в ней рассматривается случай, когда амплитудно-модулированная ЭМ обладает сложным спектральным составом, т. е. анализируется многотональная амплитудно-модулированная ЭМ, которая чаще других встречается в прикладных задачах, что также подчеркивает практическую ценность предлагаемого исследования [13].

Цель настоящей работы – выявить влияние постоянного магнитного поля на динамику и энергетические характеристики заряженной частицы, движущейся в электромагнитном поле многотональной амплитудно-модулированной волны.

#### Постановка задачи

Задача будет ставиться подобно тому, как это было сделано в статье [12], где учитывался мультитональный характер ЭМ.

Амплитудная модуляция состоит в изменении во времени такого параметра ЭМ, как ее амплитуда. Предполагается, что амплитуда  $\mathbf{b}$  электромагнитной волны изменяется по следующему гармоническому закону:

$$b(\xi) = b_{0\perp} \left( \sigma + \sum_{i=1}^I \delta_{AM} \cos \tilde{\Phi}_i \right), \quad (1)$$

где  $\xi$  – пространственно-временная переменная,  $\xi = t - z/c$  ( $c$  – скорость света);  $b_{0\perp} = \sqrt{b_{0x}^2 + b_{0y}^2}$ ;  $\sigma$  – параметр несущей частоты ЭМ;  $\delta_{AM}$  – глубина амплитудной модуляции;  $i, I$  – номер монохроматической волны и их количество;  $\Phi$  – полная фаза модулированной ЭМ,  $\tilde{\Phi}_i = \omega_i \xi + i \zeta_0$  ( $\omega_i, c^{-1}$ , – частота модуляции,  $\zeta_0$  – начальная фаза амплитудно-модулированной ЭМ).

Величина  $\delta_{AM}$  характеризует степень изменения амплитуды электромагнитной волны при условии отсутствия перемодуляции,  $\delta_{AM} \in [0, 1]$ .

При условии, что ось  $z$  направлена вдоль распространения волны, математическое представление составляющих волны можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} E_x = H_y &= b_{0x} \left( \sigma + \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 0}}^I \delta_{AM} \cos \tilde{\Phi}_i \right) \cos \Phi, \\ E_y = -H_x &= f b_{0y} \left( \sigma + \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 0}}^I \delta_{AM} \cos \tilde{\Phi}_i \right) \sin \Phi, \\ E_z = H_z &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $b_{0x}, b_{0y}$  – полуоси эллипса поляризации волны, которые совпадают с осями  $x$  и  $y$ , причём  $b_{0x} \geq b_{0y} \geq 0$ ;  $\omega$  – частота несущей ЭМ волны;  $f$  – параметр поляризации,  $f = \pm 1$ ; верхний знак соответствует величине  $E_y$  правой поляризации, нижний – левой.

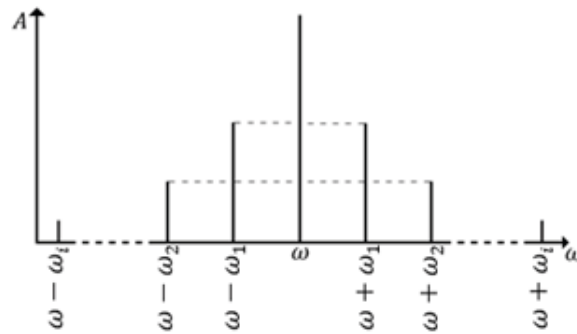


Рис. 1. Спектральная диаграмма многотональной амплитудно-модулированной электромагнитной волны:

$A, \omega$  — ее амплитуда и несущая частота,  $\omega_i$  — частота модуляции

Теперь, в соответствии с формулой (2) и рис. 1, можно определить главное отличие многотональной АМ волны от однотональной. Структура такой волны представляет собой суперпозицию  $2I+1$  монохроматических волн, которая состоит из волн с несущей частотой  $\omega$  и боковых частот  $\omega - \omega_i$  и  $\omega + \omega_i$ , расположенных симметрично от нее. Амплитуды боковых частот равны и составляют  $\mathbf{b}_{0\perp} / 2$  от амплитуды несущей электромагнитной волны. При отсутствии перемодуляции ( $\delta_{AM} \leq 1$ ), амплитуда колебаний изменяется в промежутке  $\mathbf{b} = \mathbf{b}_{0\perp} (1 \pm \delta_{AM})$ .

**Импульс и координаты заряженной частицы, движущейся в электромагнитном поле многотональной АМ-волны и постоянном однородном магнитном поле**

Для того чтобы найти два важнейших параметра заряженной частицы, необходимо решить уравнение движения частицы с массой  $m$  и зарядом  $q$ , которое имеет вид

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{H}_\Sigma] \right), \tag{3}$$

где  $\mathbf{p}$  — импульс частицы,  $\mathbf{v}$  — ее скорость;  $\mathbf{E}$  — напряженность электрической компоненты ЭМ поля,  $\mathbf{H}_\Sigma = \mathbf{H} + \mathbf{H}_0$  ( $\mathbf{H}$  — напряженность магнитной компоненты ЭМ поля,  $\mathbf{H}_0$  — напряженность постоянного магнитного поля).

Решение уравнения (3) будет выглядеть следующим образом:

$$p_x = \frac{qb_{0x}}{\omega} \left( \sigma \sin \Phi + \sum_{\substack{i=-I \\ i \neq 0}}^I \eta_i \sin \dot{\Phi}_i \right) + \frac{qH_0}{c} y + \chi_x,$$

$$p_y = \mp \frac{qb_{0y}}{\omega} \left( \sigma \cos \Phi + \sum_{\substack{i=-I \\ i \neq 0}}^I \eta_i \cos \dot{\Phi}_i \right) - \frac{qH_0}{c} x + \chi_y, \tag{4}$$

$$p_z = \gamma g,$$

где  $\dot{\Phi}_i = (1 + \alpha_i) \omega \xi + \varphi_0 + i \zeta_0$ ;  $\varphi_0$  — начальная фаза несущей волны;  $\eta_i = \frac{\delta_{AM}}{2(1 + \alpha_i)}$ ;  $\alpha_i = \omega / \omega_i$ ,  $\chi_x, \chi_y$  — константы интегрирования.

Обратим внимание на то, что в выражении для компоненты  $p_z$  была сделана замена, которая будет использоваться в дальнейших вычислениях.

Таким образом, величина  $g$  будет иметь следующий вид:

$$g = h - \frac{q^2 \sigma^2 (b_{0x}^2 - b_{0y}^2)}{4\gamma^2 (\omega^2 - \omega_c^2)} \cos 2\Phi - \tag{5}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{q^2(b_{0x}^2 - b_{0y}^2)}{4\gamma^2\omega^2} \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(\omega + \omega_i)^4}{[(\omega + \omega_i)^2 - \omega_c^2]^2} \eta_i^2 \cos 2\dot{\Phi}_i + \\
 & + R \frac{q\omega_c\sigma}{2\gamma c(\omega^2 - \omega_c^2)} \left[ (\omega + \omega_c)(b_{0x} \mp b_{0y}) \cos(\Phi + \Phi_c) - \right. \\
 & \quad \left. - (\omega - \omega_c)(b_{0x} \pm b_{0y}) \cos(\Phi + \Phi_c) \right] + \\
 & \quad + R \frac{q\omega_c}{2\gamma c\omega} \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{\omega + \omega_i}{(\omega + \omega_i)^2 - \omega_c^2} \eta_i \times \\
 & \quad \times \left\{ [(\omega + \omega_i) + \omega_c](b_{0x} \mp b_{0y}) \cos(\dot{\Phi}_i + \Phi_c) - \right. \\
 & \quad \left. - [(\omega + \omega_i) - \omega_c](b_{0x} \pm b_{0y}) \cos(\dot{\Phi}_i + \Phi_c) \right\} + \\
 & \quad + \frac{q^2\sigma}{2\gamma^2\omega(\omega^2 - \omega_c^2)} \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{\omega + \omega_i}{(\omega + \omega_i)^2 - \omega_c^2} \eta_i \times \\
 & \quad \times \left\{ [(\omega(\omega + \omega_i) + \omega_c^2)(b_{0x}^2 + b_{0y}^2) \mp 2b_{0x}b_{0y}\omega_c(2\omega + \omega_i)] \cos(\Phi - \dot{\Phi}_i) - \right. \\
 & \quad \left. - [(\omega(\omega + \omega_i) - \omega_c^2)(b_{0x}^2 - b_{0y}^2)] \cos(\Phi + \dot{\Phi}_i) \right\},
 \end{aligned} \tag{5}$$

где  $h$  следует выражению

$$\begin{aligned}
 h = & \frac{1}{2} \left\langle \frac{m^2 c^2}{\gamma^2} - 1 + \frac{q^2 \sigma^2}{2\gamma^2} \frac{1}{(\omega^2 - \omega_c^2)^2} \times \right. \\
 & \times [(\omega^2 + \omega_c^2)(b_{0x}^2 + b_{0y}^2) \mp 4b_{0x}b_{0y}\omega\omega_c] + \\
 & \left. + \frac{q^2}{2\gamma^2\omega^2} \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(\omega + \omega_i)^2}{[(\omega + \omega_i)^2 - \omega_c^2]^2} \eta_i^2 \times \right. \\
 & \left. \times \left\{ [(\omega + \omega_i)^2 + \omega_c^2](b_{0x}^2 + b_{0y}^2) \mp 4b_{0x}b_{0y}(\omega + \omega_i)\omega_c \right\} + \frac{R^2\omega_c^2}{c^2} \right\rangle.
 \end{aligned} \tag{6}$$

( $\omega_c$  – циклотронная частота,  $\omega_c = qH_0 / \gamma$ ,  $\gamma = mc(1 - v_{0z}/c) / \sqrt{1 - v_0^2/c^2}$ ,  $R$  – некоторая постоянная, определяемая начальными условиями).

Теперь, когда необходимые выражения для импульса частицы найдены, можно перейти к выводу выражений для ее координат.

С этой целью перейдем к дифференцированию по переменной  $\xi$ :

$$\dot{x} = \frac{qb_{0x}}{\gamma k} \left( \sigma \sin \Phi + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \eta_i \sin \dot{\Phi}_i \right) + \omega_c y + \frac{\omega}{\gamma k} \chi_x, \tag{7}$$

$$\dot{y} = \mp \frac{qb_{0y}}{\gamma k} \left( \sigma \cos \Phi + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \eta_i \cos \dot{\Phi}_i \right) - \omega_c x + \frac{\omega}{\gamma k} \chi_y, \tag{8}$$

где  $k$  – модуль волнового вектора,  $k = \omega/c$ .

Определим константы интегрирования  $\chi_x, \chi_y$  следующими выражениями:

$$\chi_x = -\frac{qb_{0x}}{\omega} \left( \sigma \sin \Phi_0 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \eta_i \sin \dot{\Phi}_{0i} \right) - \frac{cH_0}{\gamma} y_0 + \frac{mv_{0x}}{\sqrt{1 - \frac{v_0^2}{c^2}}}, \quad (9)$$

$$\chi_y = \pm \frac{qb_{0y}}{\omega} \left( \sigma \cos \Phi_0 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \eta_i \cos \dot{\Phi}_{0i} \right) + \frac{cH_0}{\gamma} x_0 + \frac{mv_{0y}}{\sqrt{1 - \frac{v_0^2}{c^2}}}. \quad (10)$$

Используя формулы (5), (7), (8), получим выражения для координат  $x, y, z$ :

$$x = R \cos \Phi_c - \frac{q}{\gamma k} \frac{b_{0x} \omega \mp b_{0y} \omega_c}{\omega^2 - \omega_c^2} \sigma \cos \Phi - \frac{q}{\gamma k} \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{b_{0x} (\omega + \omega_i) \mp b_{0y} \omega_c}{(\omega + \omega_i)^2 - \omega_c^2} \eta_i \cos \dot{\Phi}_i + \frac{\omega}{\omega_c \gamma k} \chi_y + x_0, \quad (11)$$

$$y = R \sin \Phi_c + \frac{q}{\gamma k} \frac{b_{0x} \omega_c \mp b_{0y} \omega}{\omega^2 - \omega_c^2} \sigma \sin \Phi + \frac{q}{\gamma k} \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{b_{0x} \omega_c \mp b_{0y} (\omega + \omega_i)}{(\omega + \omega_i)^2 - \omega_c^2} \eta_i \sin \dot{\Phi}_i - \frac{\omega}{\omega_c \gamma k} \chi_x + y_0, \quad (12)$$

$$z = z_0 + ch(\xi - \xi_0) - \frac{q^2 \sigma^2 (b_{0x}^2 - b_{0y}^2)}{8\gamma^2 k (\omega^2 - \omega_c^2)} \sin 2\Phi - \frac{q^2 c (b_{0x}^2 - b_{0y}^2)}{8\gamma^2 \omega^2} \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{\omega + \omega_i}{[(\omega + \omega_i)^2 - \omega_c^2]^2} \eta_i^2 \sin 2\dot{\Phi}_i + + R \frac{q\sigma\omega_c}{2\gamma(\omega^2 - \omega_c^2)} \left[ (b_{0x} \mp b_{0y}) \sin(\Phi + \Phi_c) - (b_{0x} \mp b_{0y}) \sin(\Phi - \Phi_c) \right] + + R \frac{q\omega_c}{2\gamma\omega^2} \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{\omega + \omega_i}{(\omega + \omega_i)^2 - \omega_c^2} \eta_i^2 \times \times \left[ (b_{0x} \mp b_{0y}) \sin(\dot{\Phi}_i + \Phi_c) - (b_{0x} \pm b_{0y}) \sin(\dot{\Phi}_i - \Phi_c) \right] + + \frac{q^2 \sigma_c}{2\gamma^2 \omega^2 (\omega^2 - \omega_c^2)} \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{\omega + \omega_i}{(\omega + \omega_i)^2 - \omega_c^2} \eta_i \times \times \left\langle \left[ \omega(\omega + \omega_i) + \omega_c^2 \right] (b_{0x}^2 + b_{0y}^2) \mp 2b_{0x} b_{0y} \omega_c (2\omega + \omega_i) \right\rangle \sin(\Phi - \dot{\Phi}_i) - - \left\langle \left[ \omega(\omega + \omega_i) - \omega_c^2 \right] (b_{0x}^2 - b_{0y}^2) / (2\omega + \omega_i) \right\rangle \sin(\Phi + \dot{\Phi}_i) \right\rangle, \quad (13)$$

где выражение для  $z_0$ , которое зависит от начальных условий, имеет вид:

$$\begin{aligned}
 z_0 = & \frac{q^2 \sigma^2 (b_{0x}^2 - b_{0y}^2)}{8\gamma^2 k (\omega^2 - \omega_c^2)} \sin 2\Phi_0 + \frac{q^2 c (b_{0x}^2 - b_{0y}^2)}{8\gamma^2 \omega^2} \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{\omega + \omega_i}{[(\omega + \omega_i)^2 - \omega_c^2]^2} \eta_i^2 \sin 2\dot{\Phi}_{0i} - \\
 & - R \frac{q \sigma \omega_c}{2\gamma (\omega^2 - \omega_c^2)} \left[ (b_{0x} \mp b_{0y}) \sin (\Phi_0 + \Phi_{0c}) - (b_{0x} \pm b_{0y}) \sin (\Phi_0 - \Phi_{0c}) \right] - \\
 & - R \frac{q \omega_c}{2\gamma \omega^2} \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{\omega + \omega_i}{(\omega + \omega_i)^2 - \omega_c^2} \eta_i^2 \times \\
 & \times \left[ (b_{0x} \mp b_{0y}) \sin (\dot{\Phi}_{0i} + \Phi_{0c}) - (b_{0x} \pm b_{0y}) \sin (\dot{\Phi}_{0i} - \Phi_{0c}) \right] - \\
 & - \frac{q^2 \sigma_c}{2\gamma^2 \omega^2 (\omega^2 - \omega_c^2)} \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{\omega + \omega_i}{(\omega + \omega_i)^2 - \omega_c^2} \eta_i \times \\
 & \times \left\{ \left[ \omega (\omega + \omega_i) + \omega_c^2 \right] (b_{0x}^2 + b_{0y}^2) \mp 2b_{0x} b_{0y} \omega_c (2\omega + \omega_i) \right\} \sin (\Phi_0 - \dot{\Phi}_{0i}) + \\
 & + \left\{ \left[ \omega (\omega + \omega_i) - \omega_c^2 \right] (b_{0x}^2 - b_{0y}^2) / (2 + \omega_i / \omega) \right\} \sin (\Phi_0 + \dot{\Phi}_{0i}) \Bigg\}.
 \end{aligned} \tag{14}$$

**Энергетические характеристики заряженной частицы  
в электромагнитном поле многотональной АМ-волны и постоянном  
однородном магнитном поле**

Получив выражения для импульса и координат движущейся в поле частицы, приступим к вычислению энергетических характеристик элементарной частицы в поле многотональной АМ-волны и постоянном магнитном поле; при этом необходимо произвести усреднение по начальной фазе, как это было проделано в работе [7]. Соответствующие математические выкладки даются ниже:

$$\begin{aligned}
 \Psi = mc^2 \left\langle h + \frac{1}{32(1+h)} \frac{q^4}{\gamma^4 \omega^4} (b_{0x}^2 - b_{0y}^2) \right\{ & \frac{1}{(1-\eta^2)^2} \sigma^4 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1+\alpha_i)^4}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^4 \Bigg\} + \\
 + \frac{q^2 \sigma^2}{4(1+h)\gamma^2 \omega^2 (1-\eta^2)^2} \frac{R^2 \omega_c^2}{c^2} & \left[ (1+\eta)^2 (b_{0x} \mp b_{0y})^2 + (1-\eta)^2 (b_{0x} \pm b_{0y})^2 \right] + \\
 + \frac{q^2 \sigma^2}{4(1+h)\gamma^2 \omega^2} \frac{R^2 \omega_c^2}{c^2} \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l & \frac{(1+\alpha_i)^2}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \times \\
 \times \left\{ \left[ (1+\alpha_i) + \eta \right]^2 (b_{0x} \mp b_{0y})^2 + \right. & \left. \left[ (1+\alpha_i) - \eta \right]^2 (b_{0x} \pm b_{0y})^2 \right\} + \\
 + \frac{q^4 \sigma^2}{8(1+h)\gamma^4 \omega^4 (1-\eta^2)^2} \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l & \frac{(1+\alpha_i)^2}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \times \\
 \times \left\{ \left[ (1+\alpha_i + \eta^2) (b_{0x}^2 + b_{0y}^2) \mp 2b_{0x} b_{0y} \eta (2 + \alpha_i) \right]^2 + \right. & \left. (1+\alpha_i - \eta^2)^2 (b_{0x}^2 - b_{0y}^2)^2 \right\} \Bigg\},
 \end{aligned} \tag{15}$$





где  $\Psi = \bar{\epsilon} - mc^2$  – энергия частицы без учета ее энергии покоя;  $\eta = \omega_c / \omega$  – отношение циклотронной частоты к частоте несущей волны.

Полученное таким образом выражение демонстрирует кинетическую энергию частицы в поле многотональной АМ-волны и постоянном магнитном поле.

**Влияние постоянного магнитного поля на энергетические характеристики частицы, движущейся в электромагнитном поле многотональной АМ-волны круговой и линейной поляризации, при отсутствии у нее начальной скорости**

После вывода выражения для средней кинетической энергии частицы следует оценить влияние постоянного магнитного поля на энергетические характеристики частицы, движущейся в поле многотональной АМ-волны и не имеющей при этом начальной скорости. Рассмотрим два частных случая поляризации волны: круговой и линейной. Итак, имеем:

$$\mathbf{v}_0 = 0, \quad \Phi(0) = \Phi_0 = -\frac{\Omega}{c} z_0, \quad \dot{\Phi}_i(0) = \dot{\Phi}_{0i} = -\frac{\Omega}{c} (1 + \alpha_i) z_0.$$

Если подставить выражения (9) – (10) в формулу (5), то получим:

$$h = \frac{R^2 \omega_c^2}{c^2} + \frac{\mu}{4} \left\{ \left( \frac{1 \mp \eta}{1 - \eta^2} \right)^2 \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1 + \alpha_i)^2 [(1 + \alpha_i) \mp \eta]^2}{[(1 + \alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\}, \quad (16)$$

где  $\mu = \frac{q^2 b^2}{\gamma^2 \omega^2} = \frac{2q^2}{\pi m^2 c^5} I \lambda^2$ ;

$$\begin{aligned} \frac{R^2 \omega_c^2}{c^2} = & \frac{\mu}{4} \left\langle \left( \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \eta_i^2 \right) + \eta^2 \left\{ \frac{1 + \eta^2}{(1 - \eta^2)^2} \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1 + \alpha_i)^2 + \eta^2}{[(1 + \alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\} \pm \right. \\ & \left. \pm 4\eta^3 \frac{b_{0y} b_{0y}}{b_{0x}^2 + b_{0y}^2} \left\{ \frac{1}{(1 - \eta^2)^2} \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{1 + \alpha_i}{[(1 + \alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\} \right\rangle. \end{aligned} \quad (17)$$

Далее предположим, что многотональная АМ-волна обладает круговой поляризацией; тогда сформулируем следующие условия:

для круговой поляризации  $b_{0x} = b_{0y} = b/\sqrt{2}$ ;

для правой поляризации –

$$\begin{aligned} \Psi = mc^2 \frac{\mu}{2} \left\langle \frac{1}{2} \left( \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \eta_i^2 \right) + \frac{\eta^2}{2} \left\{ \frac{1 + \eta^2}{(1 - \eta^2)^2} \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1 + \alpha_i)^2 + \eta^2}{[(1 + \alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\} - \right. \\ - \eta^3 \left\{ \frac{1}{(1 - \eta^2)^2} \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{1 + \alpha_i}{[(1 + \alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\} + \\ \left. + \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{(1 - \eta^2)^2} \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1 + \alpha_i)^2}{[(1 + \alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\} + \right. \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\mu}{4(1+h)} \left\langle \left( \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \eta_i^2 \right) + \eta^2 \left\{ \frac{1+\eta^2}{(1-\eta^2)^2} \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1+\alpha_i)^2 + \eta^2}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\} \right\rangle - \\
 & - 2\eta^3 \left\langle \left\{ \frac{\sigma^2}{(1-\eta^2)^2} + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{1+\alpha_i}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\} \right\rangle \left\langle \left\{ \frac{\sigma^2}{(1-\eta^2)^2} + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1+\alpha_i)^2}{[(1+\alpha_i) - \eta]^2} \eta_i^2 \right\} \right\rangle + \quad (18) \\
 & + \frac{\mu}{4(1+h)} \left( \frac{\sigma}{1-\eta} \right)^2 \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1+\alpha_i)^2}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 [(1+\alpha_i) + \eta]^2 \Bigg\rangle;
 \end{aligned}$$

для левой поляризации –

$$\begin{aligned}
 \Psi = mc^2 \frac{\mu}{2} & \left\langle \frac{1}{2} \left( \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \eta_i^2 \right) + \frac{\eta^2}{2} \left\{ \frac{1+\eta^2}{(1-\eta^2)^2} \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1+\alpha_i)^2 + \eta^2}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\} \right\rangle - \\
 & - \eta^3 \left\langle \left\{ \frac{\sigma^2}{(1-\eta^2)^2} + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{1+\alpha_i}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\} \right\rangle + \\
 & + \frac{1}{2} \left\langle \left\{ \frac{\sigma^2}{(1+\eta^2)^2} + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1+\alpha_i)^2}{[(1+\alpha_i)^2 + \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\} \right\rangle + \quad (19) \\
 & + \frac{\mu}{4(1+h)} \left\langle \left( \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \eta_i^2 \right) + \eta^2 \left\{ \frac{1+\eta^2}{(1-\eta^2)^2} \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1+\alpha_i)^2 + \eta^2}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\} \right\rangle + \\
 & + 2\eta^3 \left\langle \left\{ \frac{\sigma^2}{(1-\eta^2)^2} + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{1+\alpha_i}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\} \right\rangle \left\langle \left\{ \frac{\sigma^2}{(1+\eta^2)^2} + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1+\alpha_i)^2}{[(1+\alpha_i) + \eta]^2} \eta_i^2 \right\} \right\rangle + \\
 & + \frac{\mu}{4(1+h)} \left( \frac{\sigma}{1+\eta} \right)^2 \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1+\alpha_i)^2}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 [(1+\alpha_i) - \eta]^2 \Bigg\rangle.
 \end{aligned}$$

Анализ полученных выражений позволяет заключить, что имеется существенная разница между величинами кинетической энергии частицы, движущейся в электромагнитном поле многотональной АМ-волны правой круговой поляризации и соответствующей энергии для волны левой поляризации. Согласно результатам, представленным в работе [8], в отсутствие постоянного магнитного поля ( $\eta = 0$ ) такой разницы не наблюдается.

Теперь предположим, что частица движется в электромагнитном поле многотональной АМ-волны линейной поляризации при условии, что начальная скорость частицы

равна нулю. Тогда сформулируем следующие условия:  
 для линейной поляризации  $b_{0x} = b$ ;  $b_{0y} = 0$ ;

$$\Psi = mc^2 \frac{\mu}{4} \left\{ \left( \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \eta_i^2 \right) + \theta + \frac{\mu}{2\sqrt{\theta\mu+4} \sqrt{\left[ 2 \left( \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \eta_i^2 \right) + \theta \right] \mu + 4}} \left\{ \frac{\sigma^4}{(1-\eta^2)^2} + \right. \right. \\ \left. \left. + \left( \frac{2\sigma}{1-\eta^2} \right)^2 \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1+\alpha_i)^2 [(1+\alpha_i)^2 + \eta^4]}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1+\alpha_i)^4}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^4 \right\} + \right. \\ \left. + \left\{ \frac{1+\eta^2}{(1-\eta^2)^2} \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{(1+\alpha_i)^2 [(1+\alpha_i)^2 + \eta^2]}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\} \times \right. \quad (20)$$

$$\times \left\{ \frac{4\mu}{\sqrt{\theta\mu+4} \sqrt{\left[ 2 \left( \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \eta_i^2 \right) + \theta \right] \mu + 4}} \left\{ \frac{\eta^2 (1+\eta^2) \sigma^2}{(1-\eta^2)^2} + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \frac{\eta^2 [(1+\alpha_i)^2 + \eta^2]}{[(1+\alpha_i)^2 - \eta^2]^2} \eta_i^2 \right\} \right\} + 4 -$$

$$- \frac{4\theta\mu+16}{\sqrt{\theta\mu+4} \sqrt{\left[ 2 \left( \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \eta_i^2 \right) + \theta \right] \mu + 4}},$$

где  $\theta = \left( \frac{1+\eta^2}{1-\eta^2} \right)^2 \sigma^2 + \sum_{\substack{i=-l \\ i \neq 0}}^l \left[ \frac{(1+\alpha_i)^2 + \eta^2}{(1+\alpha_i)^2 - \eta^2} \right]^2 \eta_i^2$ .

Получив выражения (18) – (20), приступим к оценке влияния однородного постоянного магнитного поля на энергетические характеристики частицы. Построим график зависимости  $\Psi$  от  $\eta$  (рис. 2).

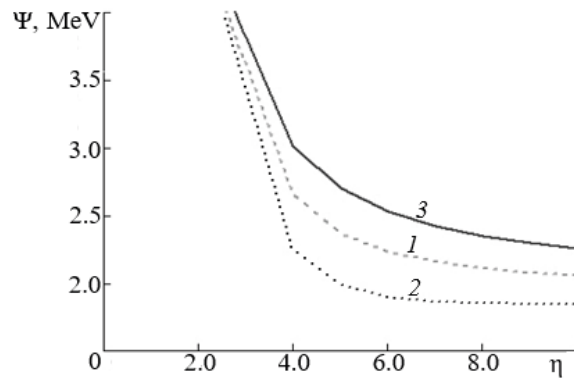


Рис. 2. Зависимости разности  $\Psi$  от величины магнитного поля многотональной АМ-электромагнитной волны линейной (1), а также правой (2) и левой (3) круговой поляризации;

$$\Omega^2 = 10^{19} \text{ Вт} \cdot \text{мкм}^2 / \text{см}^2; \alpha_i = 1; \delta_{\text{AM}} = 1$$

Приведем также зависимости  $\Psi$  от величин  $\alpha_i, \Omega^2 \delta_{\text{AM}}$  (рис. 3 – 5).

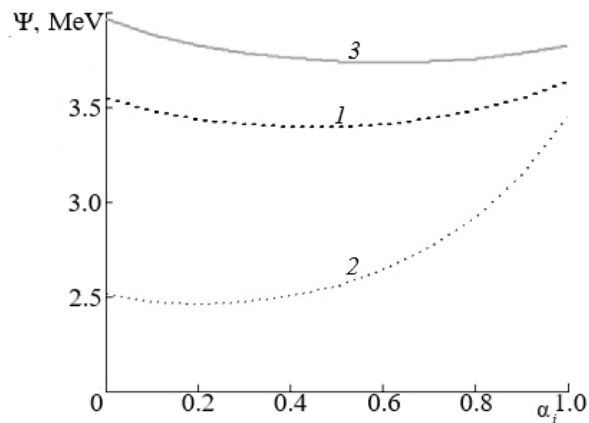


Рис. 3. Зависимости разности  $\Psi$  от отношения частоты несущей к частоте модуляции волны многотональной АМ-электромагнитной волны (нумерация кривых идентична приведенной на рис. 2);

$$\Omega^2 = 10^{19} \text{ Вт} \cdot \text{мкм}^2 / \text{см}^2; \alpha_i \gg 1; \delta_{\text{AM}} = 1.$$

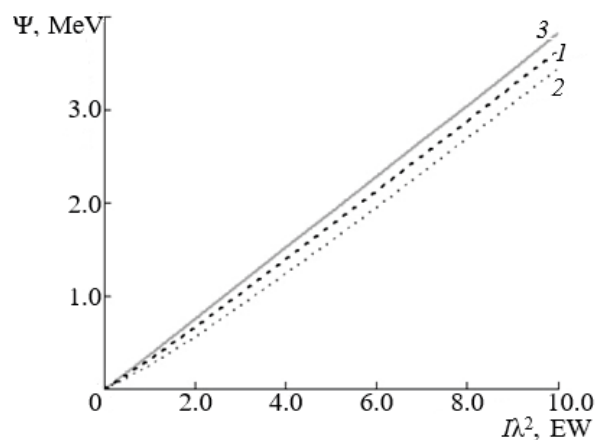


Рис. 4. Зависимости разности  $\Psi$  от интенсивности многотональной АМ-электромагнитной волны (нумерация кривых идентична приведенной на рис. 2 и 3);

$$\alpha_i = 1; \eta \gg 1; \delta_{\text{AM}} = 1.$$

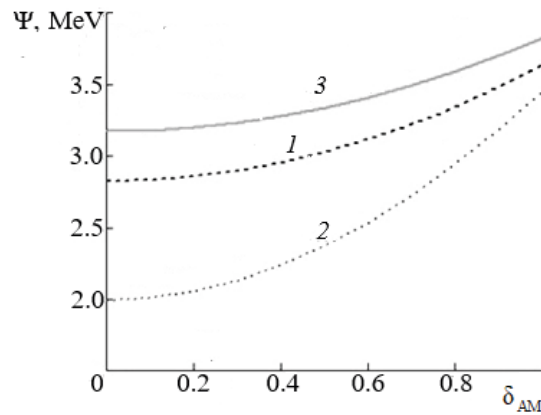


Рис. 5. Зависимости разности  $\Psi$  от глубины модуляции многотональной АМ-электромагнитной волны (нумерация кривых идентична приведенной на рис. 2 – 4);

$$I\lambda^2 = 10^{19} \text{ Вт}\cdot\text{мкм}^2/\text{см}^2; \alpha_i = 1; \eta \gg 1$$

Анализ всех этих зависимостей позволяет сделать вывод, что наибольшая энергия соответствует случаю движения частицы в поле волны с круговой правой поляризацией ( $\Psi_{right}$ ), а наименьшая – с круговой левой поляризацией ( $\Psi_{left}$ ). Энергия частицы, движущейся в поле волны с линейной поляризацией ( $\Psi_{lin}$ ), расположена в следующем диапазоне:

$$\Psi_{left} < \Psi_{lin} < \Psi_{right}.$$

### Заключение

В завершение настоящей работы необходимо отметить полученные результаты: дана оценка влияния постоянного магнитного поля с помощью построения зависимости разностной энергии частицы (без учета ее энергии покоя) от величины магнитного поля;

получены графики зависимостей энергии  $\Psi$  от таких параметров, как  $\alpha_i$ ,  $I\lambda^2$ ,  $\delta_{AM}$  в присутствии магнитного поля ( $\eta \gg 1$ ).

Заметим, что при условии, когда магнитное поле слабое или нулевое ( $\eta \ll 1$ ,  $\delta_{AM} = 0$ ), все формулы принимают вид выражений для плоских монохроматических электромагнитных волн, приведенный в статье [6]. А при приближении циклотронной частоты к несущей наблюдается явление циклотронного авторезонанса, которое впервые получили и описали А. А. Коломенский и А. Н. Лебедев в работе [14], а также (независимо от них) В. Я. Давыдовский в работе [15]. В настоящей статье авторезонанс выходит за рамки данного исследования, однако описание этого явления можно найти, например, в работах [16 – 18].

Таким образом, в настоящей работе, которая продолжает исследования, представленные в нашей статье [12], подробно проанализирована задача о влиянии постоянного магнитного поля на динамику и энергетические характеристики заряженной частицы во внешнем заданном поле многотональной амплитудно-моделированной электромагнитной волны.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Галкин А. Л., Галстян А. М., Коробкин В. В., Романовский М. Ю., Ширяев О. Б. Движение заряженной частицы в поле короткого лазерного импульса релятивистской интенсивности // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2007. № 3. С. 31–40.
2. Галкин А. Л., Калашников М. П., Трофимов В. А. Угловое распределение электронов в поле короткого лазерного импульса релятивистской интенсивности // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2012. № 8. С. 35–42.
3. Волков Д. М. Электрон в поле плоских неполяризованных электромагнитных волн с точ-

ки зрения уравнения Дирака // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1937. Т. 7. № 11. С. 1286–1289.

4. **Френкель Я. И.** Собрание избранных трудов. В 3 тт. Т. 1. Электродинамика (Общая теория электричества). Москва-Ленинград: Изд-во АН СССР, 1956. 373 с.

5. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Теория поля. М.: Наука, 2012. 536 с.

6. **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.

7. **Kopytov G. F., Martynov A. A., Akintsov N. S.** The motion of a charged particle in the field by a frequency-modulated electromagnetic wave // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. 2015. Vol. 6. No. 5. Pp. 661–671.

8. **Копытов Г. Ф., Акопян Г. М., Глазков А. А., Фотиев Л. В.** Исследование характеристик движения заряженной частицы в поле циркулярно-поляризационной амплитудно-модулированной электромагнитной волны // *Современные проблемы физики, биофизики и инфокоммуникационных технологий: Коллективная монография*. Краснодар: ЦНТИ, 2016. № 5. С. 95–104.

9. **Копытов Г. Ф., Мартынов А. А., Акинцов Н. С.** Движение заряженной частицы в поле циркулярно-поляризованной амплитудно-модулированной электромагнитной волны // *Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества*. 2014. № 2. С. 39–43.

10. **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 // *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 2014. No. 4 (206). Pp. 55–63.

11. **Акинцов Н. С., Исаев В. А., Копытов Г. Ф., Мартынов А. А.** Движение заряженной частицы в поле частотно-модулированной электромагнитной волны и постоянном магнитном поле // *Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки*. 2015. № 4 (230). С. 164–174.

12. **Копытов Г. Ф., Мартынов А. А., Акинцов Н. С.** Движение заряженной частицы в поле циркулярно-поляризованной амплитудно-модулированной электромагнитной волны и постоянном магнитном поле // *Известия высших учебных заведений. Физика*. 2015. Т. 58. № 4. С. 72–78.

13. **Батура М. П., Кузнецов А. П., Курулёв А. П.** Теория электрических цепей. Минск: Высшая школа, 2015. 606 с.

14. **Коломенский А. А., Лебедев А. Н.** Авторезонансное движение частицы в плоской электромагнитной волне // *Доклады АН СССР*. 1962. Т. 145. № 6. С. 1259–1261.

15. **Давыдовский В. Я.** О возможности резонансного ускорения заряженных частиц электромагнитными волнами в постоянном магнитном поле // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 1962. Т. 43. № 3. С. 886–888.

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

17. **Милантьев В. П., Степина С. П.** Ускорение электронов в режиме циклотронного авторезонанса // *Динамика сложных систем – XXI век*. 2009. № 4. С. 39–51.

18. **Абдулов Н. А., Милантьев В. П.** Особенности ускорения ультрарелятивистских электронов мощным лазерным излучением в режиме циклотронного авторезонанса // *Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Математика, информатика, физика*. 2016. № 3. С. 66–78.

## REFERENCES

1. **Galkin A. L., Galstyan A. M., Korobkin V. V., et al.**, Charged particle motion in the field of a short laser pulse of relativistic intensity, *Bull. Lebedev Phys. Inst.* 34 (3) (2007) 84–89.

2. **Galkin A. L., Kalashnikov M. P., Trofimov V. A.**, Angular distribution of electrons in the field of a short laser pulse of relativistic intensity, *Bull. Lebedev Phys. Inst.* 39 (8) (2012) 84–89.

3. **Wolkow D. M.**, Über eine Klasse von Lösungen der Diracschen Gleichung, *Z. Phys.* 94 (3–4) (1935) 250–260.

4. **Frenkel Ya. I.**, *Sobraniye izbrannykh trudov v 3 tt.*, Т. 1. *Elektrodinamika (Obshchaya teoriya*



elektrichestva) [Collection of selected works in 3 Vols., Vol. 1. Electrodynamics (General theory of electricity), Acad. Nauk SSSR Publishing, Moscow-Leningrad, 1956 (in Russian).

5. **Landau L. D., Lifshitz E. M.**, The classical theory of fields, Course of theoretical physics, Vol. 2, 4-th ed., Elsevier, USA, 1980.

6. **Andreyev S. N., Makarov V. P., Rukhadze A. A.**, On the motion of a charged particle in a plane monochromatic electromagnetic wave, Quantum Electronics. 39 (1) (2009) 68–72.

7. **Kopytov G. F., Martynov A. A., Akintsov N. S.**, The motion of a charged particle in the field by a frequency-modulated electromagnetic wave, Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. 6 (5) (2015) 661–671.

8. **Kopytov G. F., Akopyan G. M., Glazkov A. A., Fotiev L. B.**, Investigation of the motion characteristics of a charged particle in the field of a circularly polarized amplitude-modulated electromagnetic wave, In: “Modern Problems of Physics, Biophysics and Infocommunication Technologies” (Multi-author book), CSTP, Krasnodar (5) (2016) 95–104 (in Russian).

9. **Kopytov G. F., Martynov A. A., Akintsov N. S.**, A charged particle moves in the field by a circularly amplitude-modulated electromagnetic wave, Ecological Bulletin of Research Centers of the Black Sea Economic Cooperation. (2) (2014) 39–43 (in Russian).

10. **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, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (4 (206)) (2014) 55–63.

11. **Akintsov N. S., Isaev V. A., Kopytov G. F., Martynov A. A.**, The motion of a charged particle in the field by a frequency-modulated electromagnetic wave and in the constant magnetic field, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (4 (230)) (2015) 164–174 (in Russian).

12. **Kopytov G. F., Martynov A. A., Akintsov N. S.**, Motion of a charged particle in the field of a circularly polarized amplitude-modulated electromagnetic wave in the presence of a constant magnetic field, Russian Physics Journal. 58 (4) (2015) 508–516.

13. **Batura M. P., Kuznetsov A. P., Kurulev A. P.**, Teoriya elektricheskikh tsepey [Theory of electrical circuits], Vysshaya Shkola Publishing, Minsk, 2015 (in Russian).

14. **Kolomenskii A. A., Lebedev A. N.**, Self-resonant particle motion in a plane electromagnetic wave, Dokl. Acad. Nauk SSSR. 145 (6) (1962) 1259–1261 (in Russian).

15. **Davydovskii V. Ya.**, Possibility of resonance acceleration of charged particles by electromagnetic waves in a constant magnetic field, Sov. Phys. JETP. 16 (1) (1963) 629–630.

16. **Milant'ev V. P.**, Cyclotron autoresonance and its applications, Phys. Usp. 40 (1) (1997) 1–14.

17. **Milant'ev V. P., Stepina S. P.**, Electron acceleration in the cyclotron autoresonance mode, Journal Dynamics of Complex Systems – XXI century. (4) (2009) 39–51 (in Russian).

18. **Abdulov N. A., Milant'ev V. P.**, The peculiarities of acceleration of ultra-relativistic electrons by the powerful laser radiation at the regime of cyclotron autoresonance, Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science. (3) (2016) 66–78.

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**КОПЫТОВ Геннадий Филиппович** – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики Московского государственного университета технологий и управления имени К. Г. Разумовского (Первый казачий университет), Москва, Россия.

109004, Россия, г. Москва, ул. Земляной вал, 73.

rektorat@mgut.ru

ORCID: 0000-0003-1378-576X

**КУДРЯВЦЕВ Дмитрий Игоревич** – магистрант физико-технического факультета Кубанского государственного университета, г. Краснодар, Россия.

350040, Россия, г. Краснодар, Ставропольская ул., 149.

dmitriy-kudryavtsev-2016@mail.ru

ORCID: 0000-0003-3975-9025

## THE AUTHORS

**КОПУТОВ Gennadiy F.**

*Moscow State University of Technology and Management*

*(The First Cossack University)*

73, Zemlyanoy Val St., Moscow, 109004, Russia

rektorat@mgutm.ru

ORCID: 0000-0003-1378-576X

**KUDRYAVTSEV Dmitriy I.**

*Kuban State University*

149 Stavropolskaya St., Krasnodar, 350040, Russia.

dmitriy-kudryavtsev-2016@mail.ru

ORCID: 0000-0003-3975-9025

*Статья поступила в редакцию 30.08.2021. Одобрена после рецензирования 28.01.2022.  
Принята 28.01.2022.*

*Received 30.08.2021. Approved after reviewing 28.01.2022. Accepted 28.01.2022.*



Научное издание

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

**«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.  
PHYSICS AND MATHEMATICS»  
ТОМ 15, № 1, 2022**

Учредитель и издатель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор).  
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-51457 от 19.10.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор *В. К. Иванов* – председатель ред. коллегии  
д-р физ.-мат. наук, профессор *А. Э. Фотиади* – зам. председателя ред. коллегии  
д-р физ.-мат. наук, профессор *В. В. Дубов*  
д-р физ.-мат. наук, профессор *П. А. Карасёв*  
канд. физ.-мат. наук, доцент *В. М. Капралова*  
канд. физ.-мат. наук *О. А. Яцуержинская* – научный редактор, корректор  
*А. С. Колгатина* – переводчик  
*Н. А. Бушманова* – ответственный секретарь

Телефон редакции 8 (812) 294-22-85

Сайт <http://ntv.spbstu.ru>

E-mail: [physics@spbstu.ru](mailto:physics@spbstu.ru)

Компьютерная верстка *Н. А. Бушмановой*

---

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
Адрес университета: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

**УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ**  
в журнале «Научно-технические ведомости  
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.  
Физико-математические науки»

**1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ**

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 года журнал издавался в составе сериального издания "Научно-технические ведомости СПбГПУ". **Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», журнал издавали под двойными международными стандартными сериальными номерами ISSN 1994-2354 (сериальный) 2304-9782.** В 2012 году он зарегистрирован как самостоятельное периодическое издание **ISSN 2304-9782** (Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.). С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика**, включая следующие шифры научных специальностей: 01.02.04, 01.02.05, 01.04.01, 01.04.02, 01.04.03, 01.04.04, 01.04.05, 01.04.06, 01.04.07, 01.04.10, 01.04.15, 01.04.21.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базах данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), Web of Science (Emerging Sources Citation Index).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

**2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ**

**2.1. Оформление материалов**

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

В списки литературы **рекомендуется** включать ссылки на научные статьи, монографии, сборники статей, сборники конференций, электронные ресурсы с указанием даты обращения, патенты.

Как правило, **нежелательны** ссылки на диссертации и авторефераты диссертаций (такие ссылки допускаются, если результаты исследований еще не опубликованы, или не представлены достаточно подробно).

В списки литературы **не рекомендуется** включать ссылки на учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, ГОСТы и др. нормативные документы, на законы и постановления, а также на архивные документы (если все же необходимо указать такие источники, то они оформляются в виде сносок).

Рекомендуемый объем списка литературы для обзорных статей – не менее 50 источников, для остальных статей – не менее 10.

Доля источников давностью менее 5 лет должна составлять не менее половины. Допустимый процент самоцитирования – не выше 10 – 20. Объем ссылок на зарубежные источники должен быть не менее 20%.

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор **текста** осуществляется в редакторе **MS Word**.

6. **Формулы** набираются в редакторе MathType (не во встроенном редакторе Word) (мелкие формулы, символы и обозначения набираются без использования редактора формул). **Таблицы** набираются в том же формате, что и основной текст. В тексте буква «ё» заменяется на букву «е» и оставляется только в фамилиях.

7. **Рисунки** (в формате .tiff, .bmp, .jpeg) и **таблицы** оформляются в виде отдельных файлов. Рисунки представляются только в черно-белом варианте. Шрифт – **Times New Roman**, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без переносов. Абзацный отступ – 1 см.

## 2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (<http://journals.spbstu.ru>). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

## 2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончиться **ДОСРОЧНО**.

**Более подробную информацию можно получить по телефону редакции:**

**(812) 294-22-85 с 10.00 до 18.00 – Бушманова Наталья Александровна**

**или по e-mail: [physics@spbstu.ru](mailto:physics@spbstu.ru)**